

Virtuelle Kristalle unter Spannung

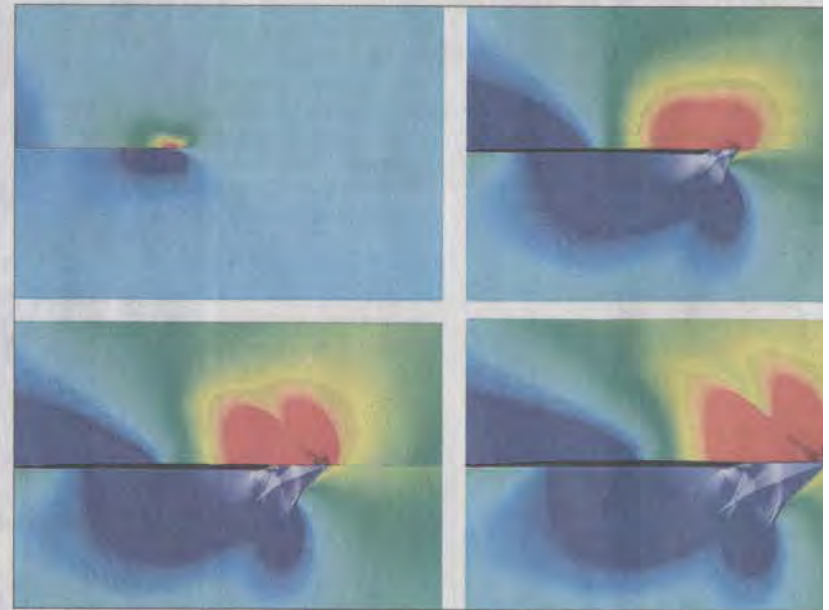
Das Verhalten von Materialien unter mechanischem Stress entscheidet oft genug über viele Menschenleben. Werkstoffwissenschaftler interessieren sich deswegen dafür, wie gross die elastische Verformung eines Metallbolzens sein kann, bevor er bricht.

Wie dieses Verhalten zustande kommt, erforschen Markus Böhler vom Massachusetts Institute of Technology (MIT) und Huajian Gao, Direktor am Max-Planck-Institut für Metallforschung in Stuttgart. Die Forscher bauen winzige Kristalle aus Metallatomen auf dem Computer nach und setzen sie unter virtuelle Spannung. Diese Kristalle können aus bis zu einer Milliarde Atomen bestehen. Das klingt nach viel, doch in natura hätten sie Abmessungen von kaum einem Millionstel Meter. Trotzdem ist die Datenmenge gigantisch. Selbst ein Supercomputer braucht einige Tage, um solch einen virtuellen Kristall zu zerreißen.

Das Resultat sind wunderschöne Bilder, die tiefe Einblicke in die Welt der Kristalle ergeben. Sie zeigen, was bei starker Verformung auf der Skala einzelner Atome passiert. Bei verformbaren («duktilen») Metallen springen Atome aus ihren ursprünglichen Positionen im Kristall. Das lässt das Material verspröden und reißen.

Spröde Materialien ermüden dagegen unter Ausbreitung Tausender mikroskopischer Risse. Neue Simulationen von Böhler und Gao zeigen, wie sich solche Risse mit Überschallgeschwindigkeit durchs Material fressen.

Die Bildsequenz zeigt, wie ein aus zwei Metallen bestehender Kristall zerreisst. Entlang der horizontalen Trennlinie, die jeweils zwischen der oberen und unteren Bildhälfte verläuft, breitet sich ein Riss immer weiter aus. In den roten Bereichen herrscht die höchste Spannung, in den blauen die niedrigste. *Roland Wengenmayr*



Simulation einer Rissbildung in einem Metallkristall. (M. Böhler/MIT)