

# Studentische Arbeiten Atomistische Simulation

Am Institut für Werkstoffe werden Materialien auf atomarer Längenskala simuliert. Dazu werden unterschiedliche Verfahren eingesetzt. Die genaue Themenstellung richtet sich nach dem Forschungsstand der jeweiligen Projekte.

Bei Interesse an einer Arbeit wenden Sie sich an Dr. Martin Bäker, martin.baeker@tu-bs.de

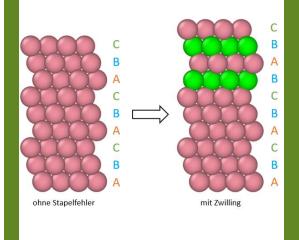
# Cobalt-Rhenium-Legierungen

Cobalt-Rhenium-Legierungen sind eine vielversprechende Legierungsklasse für Anwendungen bei sehr hohen Temperaturen. Die Legierungen können in unterschiedlichen Phasen vorliegen, deren Stabilität in diesem Projekt untersucht wird.

Das Bild zeigt beispielhaft einen Stapelfehler in einer solchen Legierung, bei dem die Reihenfolge der Atomlagen gestört ist.

# Voraussetzung für studentische Arbeit

Bereitschaft zur Einarbeitung in komplexes Thema Spaß am Arbeiten mit komplexen Programmen Kenntnisse in python und Linux



### Atomistische Simulation von Grenzflächen

Nickelbasis-Legierungen enthalten unterschiedliche Phasen, die die Legierung verfestigen. In diesem Projekt wird die Grenz-flächenenergie solcher Phasen berechnet, um besser zu verstehen, wie die Phasen sich ausbilden und wachsen.

Das Bild zeigt die Konfiguration einer Grenzfläche zwischen reinem Nickel (links) und der  $\delta$ -Phase (rechts). Die Atome sind entsprechend ihrer Kristallstruktur eingefärbt. An der Grenzfläche ist die Struktur gestört, dadurch ist die Grenzflächenenergie hoch.

### Voraussetzung für studentische Arbeit

Bereitschaft zur Einarbeitung in komplexes Thema Spaß am Arbeiten mit komplexen Programmen Kenntnisse in Linux und evtl. python.

