



Beitrag ID: 116

Typ: Poster

## Fe self-diffusion in Fe-Al-Si melts – A combined ab initio molecular dynamics and experimental study

*Dienstag, 17. September 2024 21:20 (1 h 40m)*

We present a combined first principle-based molecular dynamics (AIMD) simulations and experimental study of Al-Fe melts. Measurements were performed using quasi elastic neutron scattering (QENS) to obtain the self-diffusion coefficients of Fe at different Al-Fe compositions as a function of temperature.

**Hauptautor:** DAMMER, Katharina (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt)

**Co-Autoren:** Prof. MEYER, Andreas (Institut Laue-Langevin, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt); SONDERMANN, Elke (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt); Dr. YANG, Fan (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt); Prof. KARGL, Florian (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt); JAKSE, Noel (Université Grenoble Alpes)

**Sitzung Einordnung:** Mounting Posters, Beer and light Dinner

**Track Klassifizierung:** Condensed Matter