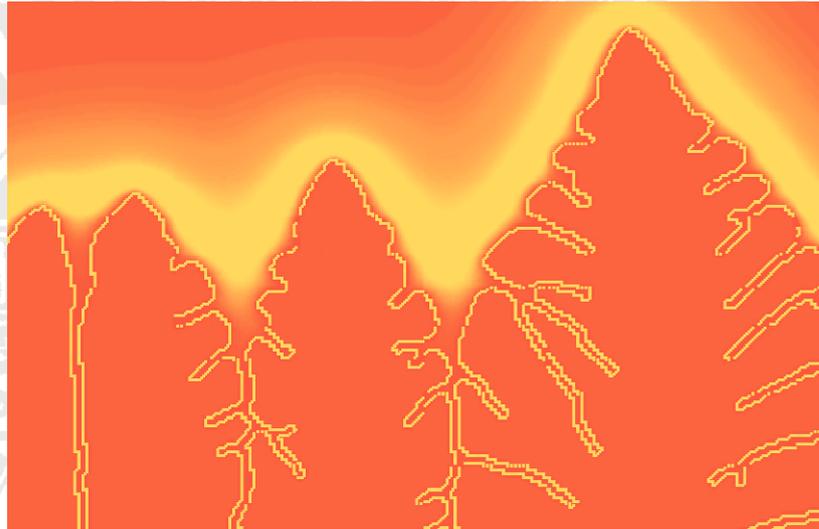




SONDERKOLLOQUIUM

AM 30. JUNI 2015 UM 13:15 UHR

IM HÖRSAAL IM PRAKTIKUMSGEBÄUDE, HERMANN-HERDER-STR. 6



Modellierung und Simulation zur Gefügeoptimierung funktionaler Nanosysteme

PROF. DR. HEIKE EMMERICH

MATERIAL- UND PROZESSSIMULATION, UNIVERSITÄT BAYREUTH

Viele der funktionalen Eigenschaften von Soft Matter Systemen werden maßgeblich durch ihre nanoskalige Struktur festgelegt, die sich oft in mehreren Prozessschritten in einem komplexen Wechselspiel zwischen Transportprozessen und Grenzflächenkinetik entwickelt. Dabei ist es gerade diese Kopplung von Transportprozessen und inneren Grenzflächenstrukturen sowie deren Kinetik, die für die Ausbildung resultierender thermischer, mechanischer oder auch optoelektrischer Eigenschaften eine zentrale Rolle spielt. Zur Simulation von Problemen dieser Art hat sich in den Materialwissenschaften in den letzten Jahren zunehmend der sogenannte Phasenfeldansatz etabliert, für dessen Weiterentwicklung mein Lehrstuhl seit vielen Jahren international anerkannt ist [1, 2, 3]. Dieser Vortrag zeigt exemplarisch Weiterentwicklungen auf, die uns in den letzten Jahren insbesondere entlang der Freiburger Themenschwerpunkte 'Materialien für die Energiespeicherung und -konversion' sowie 'Angewandte Polymerwissenschaften' möglich waren.

Dabei geht es mir einerseits darum, die Verknüpfung der Simulationsmethodik mit anderen Simulationsmethodiken sowie relevanten Experimenten für ein sukzessives weiteres Voranschreiten in der Modellentwicklung aufzuzeigen, andererseits exemplarisch einen Eindruck von der Qualität und Tragweite darauf basierender Simulationsergebnisse zur Optimierung funktionaler nanoskopischer Gefügestrukturen zu vermitteln.

[1] H. Emmerich, The Diffuse Interface Approach in Material Science: Thermodynamic Concepts and Applications of Phase-Field Models, Lecture Notes in Physics monograph, LNPM 73 (2003)

[2] H. Emmerich, Advances of and by phase-field modeling in condensed matter physics, Advances in Physics 57, 1 (2008)

[3] H. Emmerich, H. Löwen, R. Wittkowski, T. Gruhn, G.I. Toth, G. Tegze, L. Granasy, Phase-field-crystal models for condensed matter dynamics on atomic length and diffusive time scales: an overview, Adv. Phys. 61, 665 (2012)