



# SONDERKOLLOQUIUM

AM 1. JULI 2015 UM 16 UHR S.T.

IM HÖRSAAL II IM PHYSIKHOCHHAUS



## Atomistische Simulation von funktionalen Nanosystemen – vom Dritten Körper bis zur künstlichen Nase

PROF. DR. MICHAEL MOSELER

*FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR WERKSTOFFMECHANIK, FREIBURG*

Die Modellierung von Nanosystemen stellt eine wichtige Voraussetzung für die Optimierung von Nanostrukturen in technologischen Anwendungen dar. Nur über ein grundlegendes Mechanismenverständnis können Funktionen von Nanomaterialien gezielt eingestellt werden. Oft will man Finite-Size-Effekte nutzen, die durch die elektronische Struktur oder den atomaren Aufbau des Nanosystems hervorgerufen werden. Daher muss eine entsprechende Simulation, sowohl die Quantenmechanik des elektronischen Systems als auch die diskrete Struktur des nuklearen Gerüsts berücksichtigen. In manchen Fällen kann eine derartige Atomistik mit mesoskaligen Ansätzen zu einer Multiskalenmaterialmodellierung erweitert werden.

In diesem Vortrag wird anhand von drei Beispielen aufgezeigt, wie man die derzeit verfügbaren Simulationswerkzeuge als numerisches Mikroskop nutzen kann, das tiefe und sogar für industrielle Anwender gewinnbringende Einblicke in Nanosysteme liefert. Zunächst wird auf die nanomechanischen Prozesse eingegangen, die zur Erzeugung des „Dritten Körpers“ in tribologischen Systemen führt. Dieses selbstorganisierte Nanomaterial bildet den Dreh- und Angelpunkt für industrielle Komponenten mit reduzierter Reibung und Verschleiß. Ein optimaler Dritter Körper trägt damit zu einem nachhaltigen Umgang mit Werkstoffen und Energie bei.

Quantenchemische Rechnungen können bei der Suche nach geeigneten Nanokatalysatoren zur Abgasnachbehandlung oder zur Methanolsynthese aus Kohlendioxid und Wasserstoff sehr hilfreiche Beiträge liefern.

Ein Verständnis der elektronischen Struktur der funktionellen Gruppen auf Nanodrähten kann bei der Entwicklung von Gassensoren äußerst wertvoll sein.