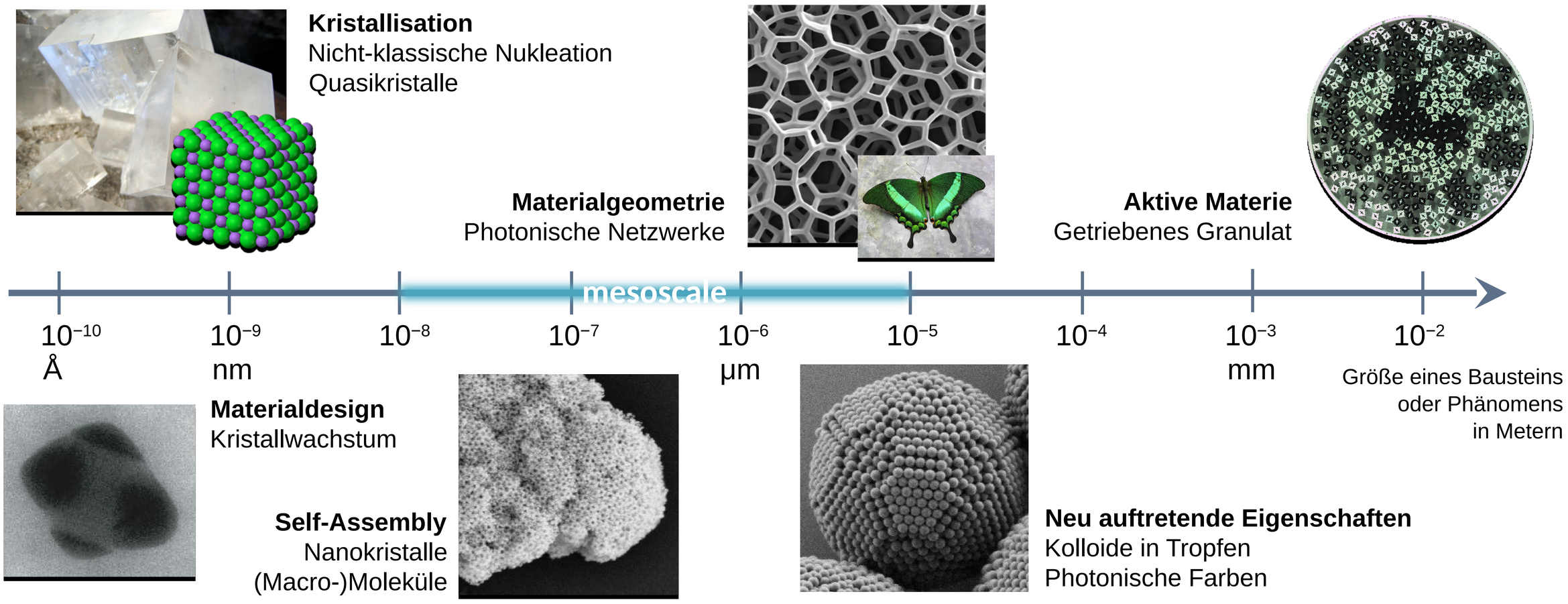
Interdisziplinäres Zentrum für Nanostrukturierte Filme (IZNF)

Modellierung von Selbstorganisationsprozessen

Übersicht über die Forschung

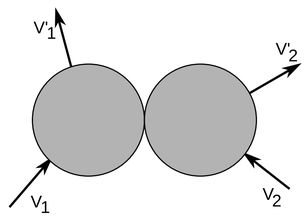
Anhand **Simulationen und Theorie** untersuchen wir nanoskalige Systeme im Grenzbereich von Chemieingenieurwesen, Physik und Materialwissenschaft. Unsere Forschung nutzt Hochleistungsberechnungen, statistische Thermodynamik, diskrete Geometrie und Kristallographie über **verschiedene Größenordnungen.**



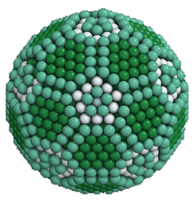
Simulation ...

... zwischen Theorie und Experiment

Eine Simulation baut auf **grundlegenden Phänomenen** und deren Gleichungen auf.
➞ Prüfen der Annahmen für theoretische Herleitungen.

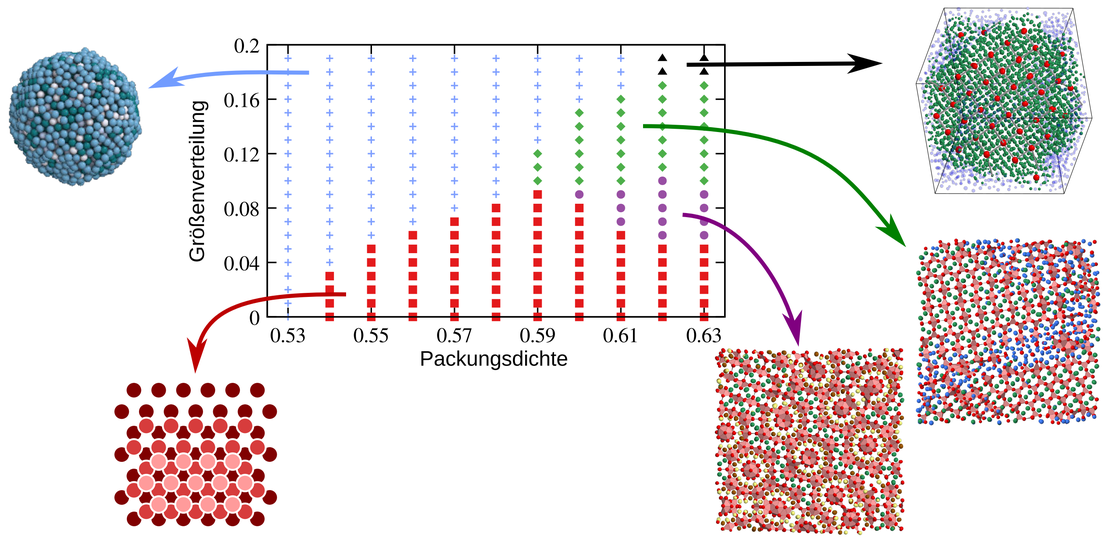


Durch Idealbedingungen und die **Vereinfachung auf das Wesentliche** kann der Charakter eines physikalischen / chemischen Effekts genau bestimmt werden. Bewusste Störungen helfen Experimente zu verstehen.



Beispiel:
Experiment: Flüssigkeitsbewegung, Oberflächenspannung, Größenverteilung
Simulation: Form ist ausschlaggebend

Durch freie Parameterwahl und schnelle Computer können große Bereiche abgetastet werden.

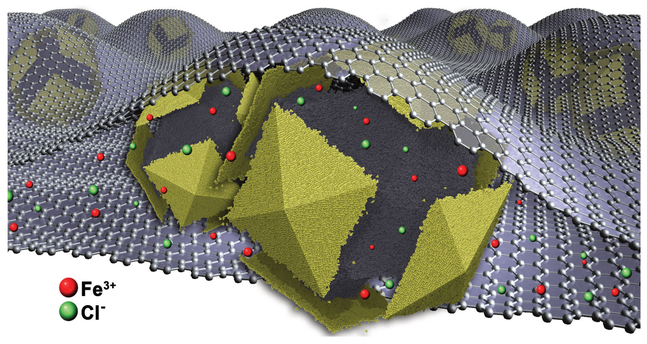


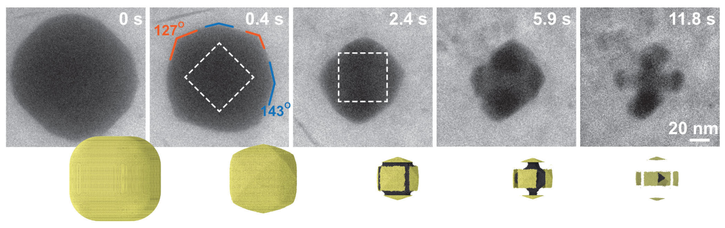
... im Zusammenspiel mit Experiment

1. Nachstellen
Haben wir verstanden was im Experiment wichtig ist?

2. Detailinformation
Die Simulation weiß alles.

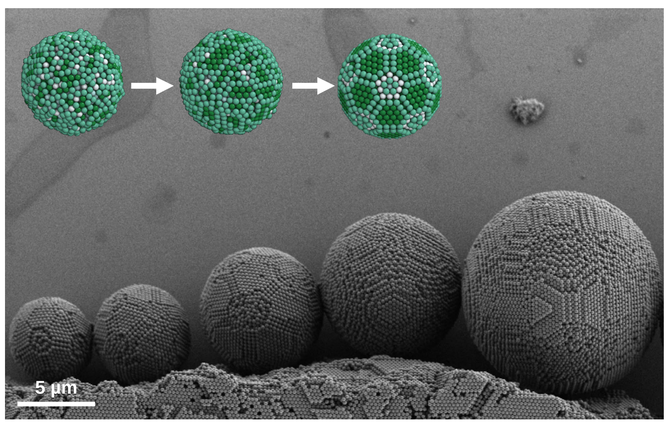
3. Erweitern
Was kann das Experiment noch nicht sagen?





Beispiel 1: Ätzen einer Kern-Schale-Struktur aus Bleikern und Goldmantel. Das Experiment (oben) wird in der Simulation (unten) reproduziert.

Beispiel 2: Kolloide im Tropfen
In Simulation und Experiment finden wir gleiche Ordnungen und können zusätzlich den Sortiervorgang beobachten und ins Innere schauen.



Institute for Multiscale Simulation MSS

FUNCTIONAL PARTICLE SYSTEMS

ZISC Zentralinstitut SCIENTIFIC COMPUTING

FAU FRIEDRICH-ALEXANDER UNIVERSITÄT ERLANGEN-NÜRNBERG