

Thematik: Atomare Wechselwirkung Recherche
Teilbereich: Metallkunde / Technische Physik
Geeignet als: Studienarbeit
Ansprechpartner: Dr.-Ing. Daniel Sahm



Kurzbeschreibung

Diese Arbeit (Studienarbeit) befasst sich mit der Thematik der Simulation der atomaren Wechselwirkung mithilfe numerischer Simulationstechniken. Die atomare Wechselwirkung ist ein fundamentaler Aspekt in der Materialwissenschaft, der Chemie und der Physik und spielt eine entscheidende Rolle bei der Bestimmung der Struktur, Dynamik und Eigenschaften von Materialien auf atomarer Ebene.

Das Hauptziel dieser Arbeit besteht darin, moderne numerische Simulationsmethoden, wie die Molekulardynamik (MD) und die Dichtefunktionaltheorie (DFT), zu analysieren, um die Simulationsmöglichkeiten der atomaren Wechselwirkung in verschiedenen Materialsystemen zu bewerten. Die MD-Simulation ermöglicht die Verfolgung der Bewegung der Atome über die Zeit, während DFT die Berechnung der Elektronenstruktur und der elektronischen Wechselwirkungen zwischen Atomen ermöglicht.

Die Simulation der atomaren Wechselwirkung eröffnet eine Vielzahl von Möglichkeiten, um das Verhalten von Materialien unter verschiedenen Bedingungen zu erforschen. Es können grundlegende Eigenschaften wie die energetische Stabilität, die thermische Ausdehnung, die chemische Reaktivität und die mechanischen Eigenschaften von Materialien analysiert und verstanden werden.