

EINLADUNG

zum Vortrag
von

Univ.Prof. Dr. Karlheinz Schwarz
Institut für Materialchemie, Technische Universität Wien

über

Computersimulationen von Festkörpern und Oberflächen mit WIEN2k

am

Dienstag, 23. Oktober 2007, um 17.30 Uhr

Ort: Großer Hörsaal der Experimentalphysik, Universität Wien,
1090 Wien, Strudlhofgasse 4 / Boltzmannngasse 5, 1. Stock

Abstract:

Heute können schon recht komplexe Materialien berechnet werden, was illustriert werden soll. Materialsimulationen im atomaren Bereich, bei denen es auf die elektronische Struktur ankommt, werden meist mit der Dichtefunktionaltheorie (DFT) durchgeführt. Dies ist eine quantenmechanische *ab initio* Methode, die nur die Ordnungszahlen der beteiligten Atome aber keinerlei experimentelle Daten benötigt. Für Berechnungen von Festkörpern oder Oberflächen wird dazu unter anderem häufig das von uns entwickelte WIEN2k Programm (siehe www.wien2k.at) eingesetzt, das weltweit von über 1100 Forschergruppen an Universitäten oder in der Industrie eingesetzt wird. Es erlaubt z.B. Atome in einem Kristall so zu relaxieren, dass keine Kräfte mehr auf sie wirken und sie sich im Energieminimum befinden. Man kann z.B. aus Gesamtenergien relative Stabilitäten ermitteln oder aus Variation des Volumens die Kompressibilität. Die Bandstruktur gibt Einblick in die chemische Bindung wobei die Zustandsdichte die Basis für Spektroskopien liefert und die elektrischen Eigenschaften (Isolator, Halbleiter, Metall) bestimmt. Das magnetische Verhalten (Ferro-, Ferri-, Antiferro-Magnetismus) kann berechnet werden. Eine graphische Oberfläche (W2web) erleichtert dem Materialwissenschaftler die Durchführung von Rechnungen, die für kleine Systeme (mit etwa 40 Atomen pro Elementarzelle) auf einem PC (oder Laptop) durchgeführt werden können. Neuerdings hat sich die Situation dramatisch verbessert, denn jetzt können auf modernen Computern (z.B. PC Clustern) schon Nanostrukturen (mit über etwa 1000 Atomen pro Periodizitätsvolumen) simuliert werden. Dies soll für Bornitrid auf Metalloberflächen gezeigt werden, für das sich durch Selbstorganisation eine geordnete Oberflächenstruktur mit 3.2 nm Periodizität (Nanomesh) ausbildet.

CHEMISCH-PHYSIKALISCHE GESELLSCHAFT

c/o Ao.Univ.Prof. Dr. Georg Reischl, Sekretär, Universität Wien, Fakultät für Physik, 1090 Wien, Boltzmannngasse 5
Tel.: +43-(0)1-4277/51108 - Fax: +43-(0)1-4277 9511 - E-Mail: Christl.Langstadlinger@univie.ac.at -
<http://www.cpg.univie.ac.at>

Vorsitzender 2006/07: Ao.Univ.Prof. Dr. Wolfgang Linert, Institut für Angewandte Synthesechemie, Techn.Univ. Wien