

FACT SHEET

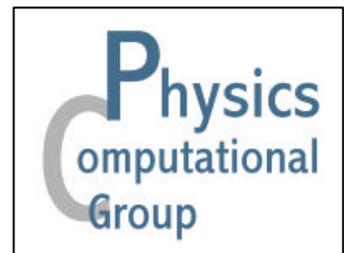
BMBF Kompetenzzentrum: Werkstoffmodellierung – Wege zum computergestützten Materialdesign

Institut für Theoretische Physik
Universität Heidelberg
Philosophenweg 19
D-69120 Heidelberg

Projektleitung: Prof. Dr. D.W. Heermann
Tel. +49-6221-549-448, Fax: +49-6221-549 331
Email: heermann@tphys.uni-heidelberg.de

Kontakt: Prof. Dr. D.W. Heermann
Tel. +49-6221-549-448, Fax: +49-6221-549 331
Email: heermann@tphys.uni-heidelberg.de

Internet: www.wcp.tphys.uni-heidelberg.de



Bearbeitete Systeme: Polymere und Metalle, z.B.

◆ Polymerschmelzen ◆ Polymere in Lösung ◆ Polymere an Grenzflächen ◆ Entmischung von Polymeren und Metallen ◆ Keimbildung ◆ Kratzfestigkeit von Materialien ◆ Nanosysteme

Methodisches Know-how: Modelle für verschiedene Längenskalen, z.B.

◆ Molekulardynamik und Monte-Carlo-Verfahren ◆ Hybrid Verfahren ◆ Simulationen mit chemisch-realistischen Kraftfeldern, mesoskopische Modelle ◆ Systematische Verknüpfung von Modellen verschiedener Längen- und Zeitskalen (Multiscale-Modelling) ◆ Interpretation von Experimenten mittels Simulation

Software: Eigenentwicklungen für Simulation, Analyse und Visualisierung, sowie Entwicklungen, die in kommerzielle Programme eingeflossen sind

◆ DEPOSITO (atomistische und mesoskopische Simulationen) ◆ CRAPS (Simulation, MD und Hybrid-Verfahren) ◆ optimierte Software für verschiedene Hardware (PC, Workstation, Vektor-, Massivparallelrechner)

Industriepartner in bilateralen Kooperationen (Stand 6/00):

◆ Bayer AG , Byte XXL GmbH

Sonstiges: ◆ Mitglied des IWR Heidelberg (Zentrum für interdisziplinäres wissenschaftliches Rechnen) ◆ Mitglied verschiedener Garduiertenkollege, die sich mit der Modellierung und Simulation befassen ◆ zahlreiche Kooperationen weltweit