

Programmkomitee

K. Binder, Institut für Physik, Universität Mainz,
Staudinger Weg 7, 55128 Mainz
Tel. 06131/392-3348

D. Herlach, Ruhr-Universität Bochum,
Universitätsstr. 150, 44780 Bochum
Tel. 02203/601-2332

P. Leiderer, Universität Konstanz, Postfach M 676
78457 Konstanz
Tel. 07531/88-3792

H. Löwen, Theoretische Physik II, Universität Düsseldorf,
Universitätsstr. 1, 40225 Düsseldorf
Tel. 0211/81-12746

B. Nestler, Computer Science, FH Karlsruhe,
Moltkestr. 30, 76133 Karlsruhe
Tel. 0721/925-1504

Th. Palberg, Institut für Physik, Universität Mainz,
Staudinger Weg 7, 55128 Mainz
Tel. 06131/392-3638

R. Schmid-Fetzer, Institut für Metallurgie, TU Clausthal
38678 Clausthal-Zellerfeld
Tel. 05323/72-2150

Internationales Mitglied im Programmkomitee

F. Spaepen, Division of Engineering and Applied Science,
Harvard University, Cambridge, MA 02138, USA
Tel. +1-617/495-2677

Koordination

H. Emmerich, Institut für Gesteinshüttenkunde und
Center for Computational Engineering Science,
Mauerstr. 5, RWTH Aachen, 52064 Aachen
Tel. 0241/80-98331

emmerich@ghi.rwth-aachen.de

Programm

12:30 – 12:45
,SPP 1296 in survey: Goals, intended interdisciplinary
cooperation, theoretical methods, experimental
approaches' (H. Emmerich/B. Jahnen)

12:45 – 13:00
Questions, discussion

13:00 – 13:15
,Thermodynamic calculations and density functional
theory' (H. Löwen)

13:15 – 13:30
Questions, discussion

13:30 – 13:45
,Molecular simulation' (K. Binder/J. Horbach)

13:45 – 14:00
Questions, discussion

14:00 – 14:15
,Phase-field simulation' (B. Nestler/H. Emmerich)

14:15 – 14:30
Questions, discussion

14:30 – 14:15
,Metal material systems' (D. Herlach)

14:45 – 15:00
Questions, discussion

15:00 – 15:15
,Colloidal systems' (T. Palberg/P. Leiderer)

15:15 – 15:30
Questions, discussion

15:30 – 16:00
Concluding general discussion

Kick-off zum
DFG Schwerpunktprogramm 1296

Heterogene Keim- und Mikrostrukturbildung: Schritte zu einem system- und skalen- übergreifenden Verständnis

am
Max-Planck-Institut
für Physik komplexer Systeme
in Dresden

am 13.11.2006
um 12:30 Uhr



MAX-PLANCK-GESellschaft

Ausrichtung*:

Praktisch jedes neue Produkt basiert auf der Weiterentwicklung eines Werkstoffes. Daher bergen bereits moderate Fortschritte bei der Werkstoffentwicklung ein grosses wirtschaftliches Potenzial in sich. Die Werkstoffentwicklung wurde in den letzten Jahren begleitet durch breitgefächerte Anstrengungen, die Strukturierung relevanter Materialien auf immer kleineren Skalen kontrollieren zu können. Trotz dieser intensiven Bemühungen, gelten die anfänglichen Stadien dieser Strukturbildungsprozesse auf kleinster Skala, i.e. die Keim- und Mikrostrukturbildung in einem heterogenen Medium, immer noch als weitestgehend unverstanden. Dies gilt sowohl für die insbesondere in der Mikrosystemtechnik und Mikroelektronik wichtige anfängliche Strukturierung an metallischen Oberflächen, als auch hinsichtlich der z. B. für die Entwicklung neuer Materialien in der Medizintechnik interessante kleinskalige Strukturentwicklung im Volumen metallischer Legierungen, ebenso wie für die in den z. B. im Hinblick auf zukünftige photonische Kristalle bedeutenden Kolloide.

In diesem Schwerpunktprogramm sollen daher grundlagenorientierte Anstrengungen geleistet werden, um diese Lücke anhand einer interdisziplinären Erforschung der einfachsten denkbaren Modellsysteme für heterogene kristalline Ordnung, i.e. binärer Metalllegierungen und Kolloide, zu schließen. Experimentell wie theoretisch haben sich gerade für diese beiden Modellsysteme bei der Betrachtung ähnlich gelagerter Fragestellungen in den letzten Jahren sich synergetisch ergänzende Methoden entwickelt, deren Zusammenbringen in diesem Schwerpunktprogramm verspricht, einen signifikanten Beitrag auf diesem Gebiet leisten zu können.

* Bei dem vorliegenden Text handelt es sich um eine vorläufige inhaltliche Beschreibung des Schwerpunktprogrammes, NICHT um einen Ausschreibungstext.

Zielgruppe:

Aufgerufen zur Antragstellung sind daher grundlagenorientierte Wissenschaftler aus den Material- und Werkstoffwissenschaften, der Physik, der physikalischen Chemie und der angewandten Mathematik.

Konkret soll innerhalb des Schwerpunktes insbesondere folgenden Fragestellungen nachgegangen werden:

• **Heterogene Nukleation:**

Wie sieht ein kritischer Nukleationskeim aus? Macht das klassische Konzept des Kontaktwinkels bei der heterogenen Nukleation Sinn? Stehen Aussagen zu dominierenden Beiträgen zur Keimbildungsbarriere für heterogene Nukleationen, wie sie durch Molekularsimulationen gewonnen werden können, im Einklang mit Aussagen, die durch die Phasefeldmethode möglich sind? Wie ist der Zusammenhang zwischen Wechselwirkungspotenzialen und relevanten Grenzflächenenergien?

▪ **Übergang Keim – Mikrostruktur:**

Wie entwickelt sich – im Wechselspiel zwischen Kristallisation und Entmischung – je nach Bezugspunkt im Phasendiagramm eine konkrete Mikrostruktur aus dem Nukleationskeim? Wie stabil sind diese Szenarien gegenüber Verschiebungen des Bezugspunktes im Phasendiagramm? Wie gut lassen sich diese Szenarien durch binäre kolloidale Modellsysteme reproduzieren?

▪ **Mikrostrukturentwicklung**

Welche Konsequenzen ergeben sich aus dem neuen Verständnis der Nukleation für die anfängliche Entwicklung der Mikrostruktur? Welchen kinetischen Gesetzmäßigkeiten folgt das anfängliche Wachstum der erstarrenden Mikrostruktur? Lassen sich allgemeingültige Bedingungen identifizieren, unter denen mehrere mikroskopische Morphologien gleicher Phasenzusammensetzung kinetisch stabil sind?

Abgrenzung:

Ziel dieses Schwerpunktprogrammes ist damit die grundlegende Erforschung von der heterogenen Keimbildung zu Grunde liegenden Mechanismen ebenso wie der anschließenden Entwicklung des Keimes in eine konkrete heterogene Mikrostruktur.

Die Präparation sowie die Chemie der kolloidalen Modellsysteme soll dabei nicht im Vordergrund stehen. Nicht nachgegangen werden sollen Fragestellungen, die

- a) Ordnungs-Unordnungs-Umwandlungen oder Nukleation in der festen Phase,
 - b) reine flüssig-flüssig Entmischungen,
 - c) Schmelzen im Gleichgewicht,
 - d) Strukturbildung unter dem Einfluß äußerer Felder (Scherströmung, elektromagnetische Felder etc.),
 - e) kristallographische Aspekte von Gefüge und Aufbau realer Kristalle, sowie
 - f) die alleinige Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung ohne der Berücksichtigung des Zusammenhangs zur Keimbildung
- betreffen.