

Remagen, den 14.1.2009

Master-Wahlmodul

Computersimulation in der Polymer-Forschung

Inhalt: Simulationen auf atomistischer Ebene sollen helfen, Stoffe zu charakterisieren und einen Einblick in die fundamentalen Zusammenhänge gewähren, die für die speziellen Eigenschaften des jeweiligen Materials ausschlaggebend sind. Im Rahmen einer Fallstudie kommen Molekular-Dynamik- und/oder Monte-Carlo-Methoden zum Einsatz; die erzielten Resultate sind mit experimentellen Befunden zu vergleichen. Gegebenenfalls kann die Entwicklung eigener Auswerte-Routinen erforderlich sein.

Die Studie wird zwar unter Anleitung, aber so weit wie möglich selbständig angefertigt und soll alle wesentlichen Aspekte einer eigenständigen, abgeschlossenen Arbeit umfassen: Das Ausarbeiten der genauen Fragestellung, das Aufsetzen, Durchführen und Auswerten der Simulationen, sowie die Interpretation der gewonnenen Ergebnisse.

Voraussetzungen sind Grundkenntnisse in (organischer) Chemie und Physik (Klassische Mechanik), sicherer Umgang mit Word oder TeX, sowie Linux als Betriebssystem, vor allem aber Spaß an praktischen Anwendungen mit dem Computer. Grundkenntnisse in Statistik und Zeitreihenanalysen, sowie Programmierkenntnisse sind erwünscht, Teamfähigkeit und Abstraktionsvermögen werden vorausgesetzt.

Zeitraum: Dreiwöchige Blockveranstaltung in den Semester-Ferien nach Absprache.

Anmeldung: Persönlich nach Termin-Absprache (E-Mail) am Fraunhofer Institut SCAI bei Dr. Astrid Maaß oder Dr. Dirk Reith.

Teilnehmerkreis: 2-3 Studierende aus dem Master-Studiengang.

Prüfungsleistung: Hausarbeit und Seminarvortrag

Sonstiges:

Dieses Praktikum ermöglicht Ihnen einen Einblick in die Arbeitsweise an einem Institut der angewandten Forschung, hier dem Fraunhofer SCAI. Die Betreuung wird daher auch dort erfolgen; Arbeitsplätze werden zur Verfügung gestellt. Weitere Infos bei

Astrid.Maass@scai.fraunhofer.de oder Dirk.Reith@scai.fraunhofer.de.

Literatur:

Daan Frenkel und Berend J. Smit „Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications (Computational Science)“ (Academic Press) oder <http://www.phys.uu.nl/~vlugt/imsst/book-28-1-2008.pdf>