

Die Vorträge finden jeweils um 16.15 Uhr im Hörsaal H3, Egerlandstr. 3 statt.
Alle Interessenten sind herzlich eingeladen.

21. Januar 2010

Prof. Dr.-Ing. Hans Hasse

Technische Universität Kaiserslautern

Molekulare Modellierung und Simulation in der Verfahrenstechnik

Mit der Molekularen Modellierung und Simulation lassen sich in der Verfahrenstechnik Aufgaben erfolgreich bearbeiten, die mit klassisch phänomenologischen Ansätzen nicht zu lösen sind. Hierzu zählt die Untersuchung nanoskaliger Vorgänge genauso wie z.B. die Vorhersage aller Stoffeigenschaften eines Fluids aus einem einzigen Modell. Ausgehend von der Modellierung der zwischenmolekularen Wechselwirkungen liefert die Molekulare Simulation rein prädiktiv, d.h. ohne weitere Modellannahmen, die unterschiedlichen interessierenden Größen. Die Möglichkeiten, die sich hier bieten, erweitern sich rasch, unter anderem durch den Einsatz von Methoden und Hardware aus dem Bereich des High Performance Computings. Im Vortrag wird zunächst ein Überblick über unterschiedliche molekulare Methoden und ihren Einsatz in der industriellen Praxis in der Verfahrenstechnik gegeben. Anschliessend werden Kraftfeldmethoden näher behandelt und ihre Leistungsfähigkeit an zahlreichen Beispielen erläutert.