

MATERIALDESIGN AUF DER NANOSKALA – WINZIGE STRUKTUREN MIT MEGAWIRKUNG!

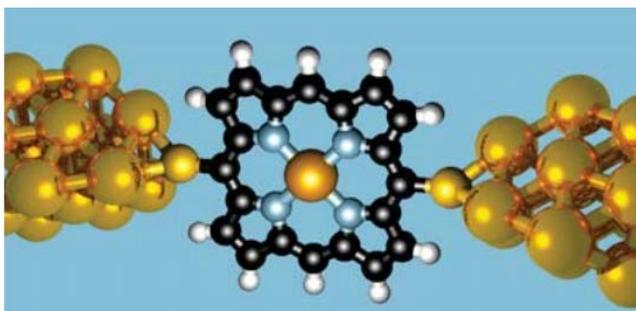
Mittwoch, 27.11.2024, 17:00 Uhr, Hörsaal B, Fachbereich Chemie, Martin-Luther-King-Platz 6

Moleküle als Bausteine für Materialien: Was können wir von einzelnen Molekülen über Materialien lernen?

Prof. Dr. Carmen Herrmann
Institut für Anorganische und Angewandte Chemie, Universität Hamburg
E-Mail: carmen.herrmann@uni-hamburg.de

Moleküle können Bausteine sein für Materialien, die dann in Sensoren, organischen lichtemittierenden Dioden (OLEDs), in der Elektrokatalyse oder als Bauteile in Verzerrern für E-Gitarren mit besonders weichem Sound eingesetzt werden können. Um die Moleküle zu finden, die am besten für ein bestimmtes Material geeignet sind, ist es oft hilfreich, ihre Eigenschaften am Computer erst einmal zu simulieren. Dadurch können Kosten gespart werden und werden weniger Chemikalien benötigt.

In der Vorlesung wird erläutert, wie man die Eigenschaften dieser Moleküle mithilfe von Simulationen verstehen kann. Es wird auch gezeigt, wie man dabei auf grundlegende naturwissenschaftliche Fragestellungen stößt, die noch ungeklärt sind, zum Beispiel die überraschende Beobachtung, dass nichtmagnetische Moleküle sich wie Magneten verhalten können – vorausgesetzt, sie sind nicht spiegelsymmetrisch. Dadurch ergeben sich vielversprechende neue Perspektiven für die Wasserstoffproduktion.



$$I_s(V) = \frac{e}{h} \int_{E_F - \frac{eV}{2}}^{E_F + \frac{eV}{2}} dE T_s(E, V)$$