MA14-009 - Variational Modeling of Carbon Nanostructures

Zusammenfassung

Kohlenstoff-Nanostrukturen wie Graphen, Nanoröhrchen und Fullerene zeigen außergewöhnliche elektromechanische Eigenschaften. Diese extrem vielversprechenden Materialien bieten eine Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten in der Chemie, der Nanoelektronik, der Optik bis hin zur Mechanik. Trotz ihrer bahnbrechenden Bedeutung sind viele Grundsatzfragen zur Geometrie, Mechanik und das Vorkommen bzw. die Auswirkung von Defekten in diesen Nanostrukturen noch weitgehend unerforscht.
Im Rahmen dieses Projektes werden wir uns durch eine multidisziplinäre Herangehensweise ein umfassendes Verständnis für diese Strukturen erarbeiten, sowohl für ihre ideale Kristallform als auch beim Auftreten von Defekten. Um dies zu erreichen, kombinieren wir Modellierung mit der aktuellen Elektronenmikroskopie und dem wissenschaftlichen Rechnen in der Physik. Basierend auf Variationsmethoden für atomistische Modelle baut unsere Methodik auf der Minimierung von entsprechenden Konfigurationspotentialen auf, einschließlich der Zwei- und Drei-Körper Wechselwirkungseffekte. Unser Ziel ist es, die feine Geometrie der Kohlenstoff-Nanostrukturen zu beschreiben, das mechanische Verhalten der Strukturen zu diskutieren sowie die Entstehung und Stabilität der Defekte in Graphen theoretisch und experimentell zu untersuchen.

Wissenschaftliche Disziplinen:
Mathematical physics (60%) | Nanomaterials (40%)

Schlagworte:
Variational methods, Carbon Nanostructures, Geometry and Mechanics, Stability, Defects

---

Principal Investigator: Ulisse Stefanelli

Institution: University of Vienna

Co-Principal Investigator(s): Jani Kotakoski (University of Vienna)



Status: Abgeschlossen (01.01.2015 – 30.06.2020)
GrantID: 10.47379/MA14009

Weiterführende Links zu den beteiligten Personen und zum Projekt finden Sie unter
https://www.wwtf.at/funding/programmes/past/ma/MA14-009/