

Neu bewilligter Spezialforschungsbereich 2009

Projektnummer: F 41

Projekttitel: Vienna Computational Materials Laboratory

Sprecher: Georg Kresse

Forschungsstätte: Universität Wien

In den letzten Jahrzehnten konnten sich Computer-Simulationen als unverzichtbares Forschungsinstrument in vielen Bereichen der Naturwissenschaften etablieren und stellen somit ein drittes, komplementäres Standbein neben den traditionellen theoretisch-analytischen und den experimentellen Methoden dar. Insbesondere in der Materialforschung, wo rechnerunterstützte Untersuchungen mittlerweile eine zentrale Rolle spielen, haben sich ungeahnte Möglichkeiten eröffnet: Anwendungen, die man vor zwanzig Jahren noch nicht einmal angedacht hatte und die vor fünf Jahren noch unmöglich waren, sind heute routinemäßig möglich. Diese Erfolge basieren einerseits auf der extrem rasch wachsenden Leistungsfähigkeit von Computern, und andererseits auf neuen theoretischen Methoden der Quantenmechanik und der Statistischen Mechanik sowie auf neuen numerischen Algorithmen und deren Implementierung. Diese Entwicklung ist aber bei weitem noch nicht abgeschlossen. Aktuelle Problemstellungen in den Grundlagenwissenschaften und in der modernen Technologie konfrontieren die rechnerunterstützten Materialwissenschaften mit neuen Herausforderungen: (i) Grundzustandsenergien und Aktivierungsenergien für chemische Reaktionen und Phasenumwandlungen sollen mit einer Genauigkeit von 1 kcal/mol vorhersagbar sein. Dazu ist vor allem eine wesentlich verbesserte Beschreibung der Korrelationen in Viel-Elektronen Systemen notwendig; während hier die Quantenchemie für molekulare Systeme bereits neue Wege aufgezeigt hat, ist das Erreichen dieses Ziels für Festkörper wesentlich schwieriger. (ii) Durch neue methodische Entwicklungen in der experimentellen Forschung, wie etwa in der elektronischen, optischen oder magnetischen Spektroskopie, sind neue Materialeigenschaften zugänglich geworden. Um den Dialog mit der experimentellen Forschung weiterhin intensiv gestalten zu können, muss die Funktionalität existierender Programmpakete verbessert und erweitert werden. (iii) Die Zeit- und Längen-Skalen von realen Materialien und Prozessen und jene Skalen, die in Computer-Simulationen zugänglich sind, unterscheiden sich – trotz der verfügbaren Rechnerressourcen – immer noch durch viele Größenordnungen. Diese Diskrepanz kann durch die Entwicklung von neuen Multi-Skalen Simulationen überbrückt werden.

WissenschaftlerInnen der Universität Wien und der Technischen Universität Wien haben in den letzten Jahrzehnten wesentliche Beiträge zum Fortschritt der rechnerunterstützten Materialwissenschaften geleistet. Um sich den neuen Herausforderungen in diesem Forschungsgebiet zu stellen, sollen im Rahmen dieses Spezialforschungsbereiches die verfügbaren Erfahrungen und Kompetenzen vereint werden. Wien wird auf diese Weise seine Rolle als eines der führenden Zentren auf diesem Gebiet festigen.