

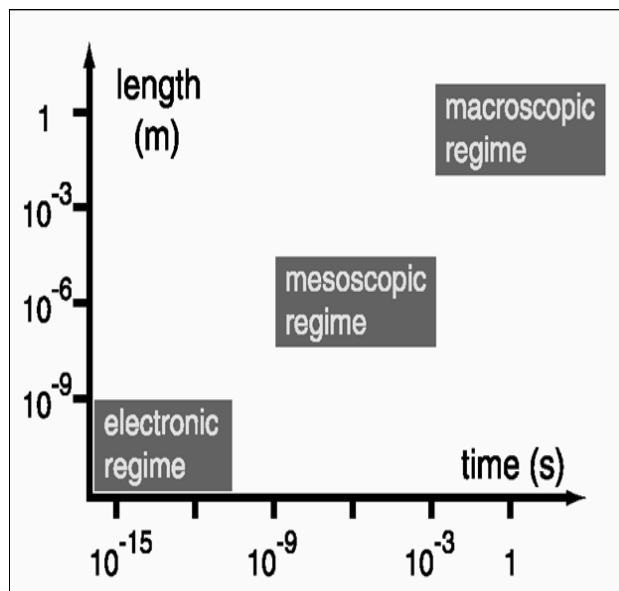


# Physikalisches Kolloquium

08.02.2010, 17 Uhr c.t. Hörsaal E

## Von Elektronen zum Reaktor: Multiskalen Modellierung katalytischer Prozesse

Prof. Dr. K. Reuter  
Ludwig-Maximilians-Universität München



Das Brechen und Formen chemischer Bindungen auf atomarer Ebene, das Wechselspiel vieler Elementarprozesse im mesoskopischen Ensemble, und der makroskopische Transport von Masse und Wärme im Reaktor – all diese Aspekte tragen kritisch zur schlussendlichen Funktion und Effizienz von Festkörperkatalysatoren bei. Recht typisch für materialwissenschaftliche Anwendungen spielen also Faktoren eine Rolle, die sich über viele Größenordnungen in Länge und Zeit erstrecken. Mit der Zielsetzung einer materialspezifischen und quantitativen theoretischen Beschreibung stellen sich moderne Multiskalen-Modellierungsansätze dieser Herausforderung. In meinem Vortrag gebe ich einen Überblick über den von unserer Gruppe verfolgten Ansatz, der Elektronenstrukturtheorie mit Methoden der Statistischen Mechanik und Kontinuumsmechanik verknüpft. Ein Schwerpunkt wird hierbei in der kritischen Diskussion offener Fragestellungen liegen, insbesondere der Beschreibung elektronischer Austausch- und Korrelationseffekte, der Simulation langer Zeitskalen und der Wärmedissipation an der Grenzfläche.