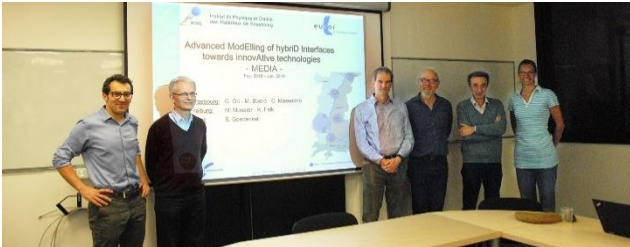


Advanced modelling of hybrid interfaces towards innovative technologies

<p>Projektpartner</p>	
<p>Universitäten Strasbourg, Freiburg und Basel</p>	
<p>Projektlaufzeit / Förderbetrag</p>	
<p>01.01.2018 – 31.03.2020 / 47 250 €</p>	<p>V.l.n.r.: Guido Ori (Unistra), Carlo Massobrio (Unistra), Stefan Goedecker (Unibas), Michael Moseler (Freiburg/Fraunhofer IWM), Mauro Boero (Unistra), Kerstin Falk (Freiburg/Fraunhofer IWM)</p>
<p>Kurzbeschreibung des Projekts</p>	<p>Die Partner bauen ein grenzüberschreitendes wissenschaftliches Netzwerk zwischen den 4 führenden Forschungsgruppen im Bereich der computergestützten Materialforschung auf, um interdisziplinäre Kooperationen zu errichten und Wissenstransfer und Innovation zu erhöhen. Sie erforschen komplexe Grenzflächen, die in vielfachen Anwendungen in den Bereichen Energie, Elektronik und Speicherung verbaut sind.</p>
<p>Konkrete Umsetzung des Projekts</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Einstellung von 3 Masterstudierenden für Forschungspraktika (2018-2019) über Simulationen von (FP)MD Grenzflächen und ungeordneten Systemen (2 Praktika von jeweils 6 Monaten in Strasbourg und 1 Praktikum von 2 Monaten in Freiburg) • Einstellung eines Masterabsolventen für drei Monate (2019) zur Fortsetzung seiner Forschung • Aufnahme von 2 Doktoranden für je 2 Wochen (2019, Strasbourg) zur Modellierung von (FP)MD Grenzflächen • Organisation eines Symposiums an der EMRS 2018 und Teilnahme an Konferenzen
<p>Ergebnisse des Projekts und Fortführung der Zusammenarbeit</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Veröffentlichung 3 wissenschaftlicher Artikel (in J. Chem. Phys. 153, 074704 2020, Solid State Sci. 95, 105925 2019, J. Non-Cryst. Solids 498, 288-293 2018) und 1 Buchkapitels (in Theory and Simulation in Physics for Materials Applications. Springer Series in Materials Science, vol 296. Springer, Cham.) unabhängig voneinander u. Vorbereitung eines 1. gemeinsamen Artikels. • Bildung eines internationalen Netzwerks (8 Partner) um auf einen Projektaufruf der EU zu antworten (H2020 FET-Proactive-HPC-2018 „Hochleistungsrechnen für fortgeschrittene Werkstoffe“). Das Projekt wurde nicht berücksichtigt, soll aber erneut eingereicht werden. • Finanzierung 1 Promotion (2019-22) (Modellierung hybrider Grenzflächen) im Team des IPCMS, in Zusammenarbeit mit Freiburg, Initiative für int. Doktoranden des IDEX-Programms. • Finanzierung 1 QUSTEC-MSCA-Promotion (2019-23) (Modellierung von Verbundwerkstoffen).
<p>Weiterführende Informationen</p>	<p>Webseite des Projekts</p>