

In-silico Modellierung und Simulation molekularer Systeme

Quantenmechanik (QM) / Molekulardynamik (MD)

Mit Hilfe von Berechnungen und Simulationen auf Basis von Quantenmechanik und Molekulardynamik auf unseren Rechenclustern können stoffspezifische Konstanten und Eigenschaften bestimmt werden. So können wir neue Materialien erforschen und ihre Strukturen für die Anwendung optimieren. Die Vorhersage von spektroskopischen Daten und Reaktionsweisen erlaubt darüber hinaus ein zielführendes Verständnis experimenteller Daten.

Simulationen von energetischen Materialien und deren Komponenten

Die Verwendung von quantenmechanischen und molekulardynamischen Verfahren zur Bestimmung der Kräfte innerhalb von Molekülen erlaubt uns einen direkten Zugang zur Dynamik und Thermodynamik komplexer Prozesse.

Ziele dieser Berechnungen sind:

- Entwicklung von neuen energetischen Materialien wie Treib- und Sprengladungen
- Untersuchung des Reaktionsverhaltens der energetischen Materialien und ihrer Komponenten
- Modellierung von thermo-mechanischem Verhalten und Bruchvorgängen
- Einblick in die Wechselwirkungsprozesse zwischen Komponenten (zum Beispiel Glas-Gummi-Übergang in Elastomerbindern)

Beispiele für eine Anwendung:

- Berechnung der Reaktionswege bei der Zersetzung von Komponenten wie der Nitrocellulose und der Reaktionsweisen der Stabilisatoren
- Berechnung von (Standard-) Bildungs- und Reaktionsenthalpien
- Simulation von Aushärtungsvorgängen durch Quervernetzung
- Berechnung von Glasübergangstemperaturen
- Vorhersage von IR/Raman-Spektren komplexer Strukturen und Gemische

Die in-silico Modellierungen unterstützen so die experimentellen Arbeiten in Labor und Entwicklung, erleichtern die Auffindung geeigneter Komponentenkombinationen und erweitern das Verständnis für das thermo-mechanische und reaktionskinetische Verhalten von Komponenten und Formulierungen.

Anwendungsbeispiele

- Stabilisierung von NC und chemischen Reaktionsweisen mit Stabilisatoren
- Reaktionswege der Zersetzung von ADN
- Simulation energetischer Kokristalle, Zersetzung mit reaktivem Kraftfeld (CL-20/HMX)
- MD-Simulation von Mikro-Zugversuchen und kohäsiven Parametern in polymer gebundenen Explosivstoffen (PBX)

Kontakt

Dr. Andreas Omlor
Tel. +49 721 4640-266
andreas.omlor@
ict.fraunhofer.de

www.ict.fraunhofer.de