



Multiskalensimulation der mechanischen Eigenschaften und des Wachstumsverhaltens von hybriden Nanostrukturen

Markus Pötschke

Thematische Einordnung

Im Rahmen der Forschungstätigkeit wird das Wachstum von metallischen Nanodrähten (engl.: *nano wires*) untersucht. Diese finden bereits jetzt Anwendungen im Bereich der Nanoelektronik, insbesondere in der Sensorik und bei der elektronischen Kontaktierung von Bauelementen.

Die Nanodrähte werden aus metallhaltigen Komplexionen bzw. aus Nanopartikeln (engl.: *cluster*) aufgebaut. Die Herstellung aus kleinsten Bausteinen (engl.: *bottom-up*) hat gegenüber der konventionellen Technologie (engl.: *top-down*) den Vorteil, dass die Elemente nicht mehr einzeln strukturiert werden müssen, sondern die in den Bausteinen und dem Herstellungsvorgang enthaltenen Strukturinformationen können auf viele Elemente gleichzeitig übertragen werden. Somit können die Nanodrähte im größeren Maßstab hergestellt werden. Eine Herausforderung stellt dabei jedoch das Identifizieren der Prozessparameter, die zur gewünschten Struktur führen dar.

Wissenschaftlicher Fokus

Der aktuelle Themenschwerpunkt liegt auf der Untersuchung der Einflussfaktoren, welche die Drahtmorphologie und dessen Wachstumsgeschwindigkeit bestimmen. Zu diesem Zweck werden Kontinuumsmodelle in Differentialgleichungsform zur Beschreibung von Elektrodynamik, Hydrodynamik und Diffusion im Potentialgradienten. Ein weiterer wichtiger Punkt der Modellierung ist die Elektrochemie, insbesondere das Verhalten an der Phasengrenze zwischen Elektrode und Elektrolyt im elektrischen Wechselfeld.

Die numerische Simulation der multiphysikalischen Modelle ermöglicht Aussagen zum Drahtwachstum sowie die Abschätzung von dessen Kenngrößen. Durch den Vergleich mit experimentellen Daten aus der Arbeitsgruppe können die Modellparameter angepasst und damit die Vorhersagekraft verbessert werden. Mit Hilfe einer Stabilitätsanalyse kann das Modell zusätzlich validiert werden.

Ausblick

Das Ziel der Untersuchung ist das Verständnis der Ursachen und Mechanismen des Drahtwachstums zu verbessern und somit die gezielte Suche nach den eingangs erwähnten Prozessparametern zu beschleunigen. Nach der abgeschlossenen Validierung können auf Grundlage der Modelle halbquantitative Prognosen zum Wachstumsverhalten dazu beitragen den im Experiment zu betrachtenden Parameterraum stark einzuschränken.