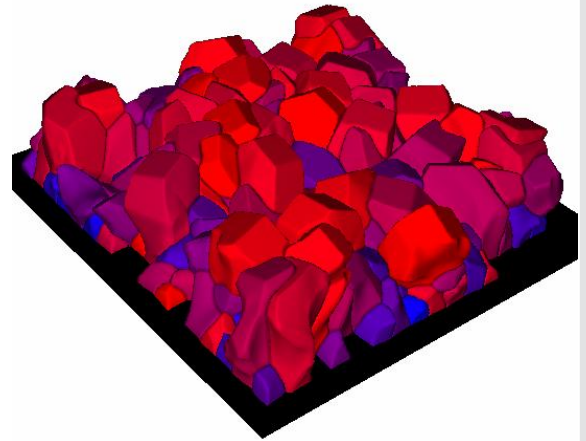


## Simulation des Wachstums dünner polykristalliner Zeolith-Filme

### Hintergrund:

Zeolithe sind eine Gruppe mikroporöser Silikatminerale, die durch ihre Funktion als Molekularsiebe eine enorme technische Bedeutung erlangt haben. In der Herstellung werden polykristalline Dünnschichten ( $\approx 5 \mu\text{m}$ ) auf einem makroporösen Substrat durch Hydrothermalsynthese abgeschieden. Durch selektives Wachstum setzen sich die optimal orientierten Keimkristalle durch, ein Prozess, der ähnlich auch in der CVD-Diamantbeschichtung von Werkzeugen auftritt. Die Kristallorientierungen bestimmen wesentlich die technische Funktionalität und thermisch-mechanische Stabilität des Films.



### Ihre Aufgabe:

Aufbauend auf Vorarbeiten sollen mit einem Phasenfeld-Modell mesoskopische Simulationen des Wachstums von Zeolith-Filmen (2D und 3D) durchgeführt werden, um Prozessbedingungen zu optimieren. Insbesondere der Einfluss des Substrats auf den Selektionsprozess ist interessant, wozu variable Startkonfigurationen generiert werden sollen. Morphologie und Textur des Films sollen analysiert und mit experimentellen Aufnahmen bzw. analytischen Wachstumsgesetzen verglichen werden. Evtl. können weitere Modellverfeinerungen (z.B. Wachstumszwillinge, anisotrope Korngrenzenergien) untersucht werden.

### Voraussetzungen:

Für die Bearbeitung des Themas sind Grundkenntnisse in Werkstoffkunde von Vorteil. Interesse an numerischen Simulationen sollte vorhanden sein.

### Wir bieten:

- intensive Betreuung
- moderne Workstations und Hochleistungsrechner als Arbeitsumgebung
- produktive und dynamische Atmosphäre in einem Team von Mitarbeitern
- Kooperationen mit internationalen Forschergruppen
- Karriereperspektiven als Nachwuchswissenschaftler

### Neugierig?

Kontaktieren Sie mich: Prof. Dr. Britta Nestler  
[britta.nestler@kit.edu](mailto:britta.nestler@kit.edu)