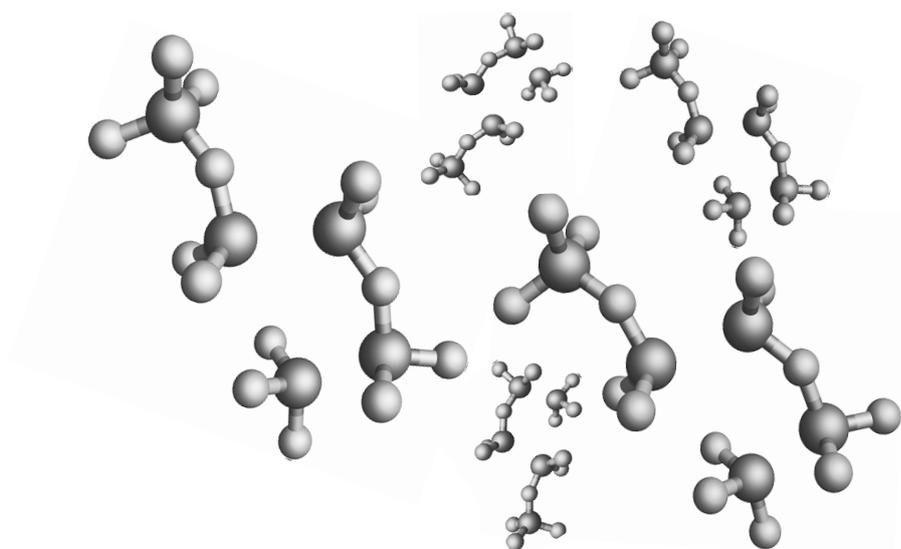




Geschäftsbereich der
AQcomputare Gesellschaft für Materialberechnung mbH

Dienstleistungsangebot

Our services



Wir lassen die Atome tanzen
We make the atoms dance

AQcomputare
Gesellschaft für Materialberechnung mbH

Annaberger Straße 240
09125 Chemnitz

E-Mail info@matcalc.de

Telefon 0371 / 5347 - 591
Telefax 0371 / 5347 - 554

Unsere Arbeitsweise

Our work flow

» **Computersimulationen in der Auftragsforschung**

Unser Team analysiert Ihre konkrete Problemstellung und legt mit Ihnen zusammen den genauen Projektinhalt fest. Auf dieser Grundlage erhalten Sie durch den gezielten Einsatz modernster Computersimulationswerkzeuge ein tiefgründiges Verständnis Ihres Materialsystems auf der atomaren Skala. Als Ergebnis entwickelt unser Expertenteam von Physikern, Chemikern, Ingenieuren und Softwareentwicklern eine weiterführende Forschungsempfehlung für Ihr R&D-Vorhaben.

» **computer simulations in contract research**

Our team of experts analyzes your specific problem. In close cooperation with you the detailed project content is defined. At this basis, state of the art simulation tools are applied to obtain a profound knowledge about your material system at an atomic scale. Finally, our team of physicists, chemists, engineers and software developers provides you with recommendations for your proceeding R&D project.

» **Unsere Kompetenzen**

Wir sind ein unabhängiges Team von hochqualifizierten Wissenschaftlern und Ingenieuren aus dem Bereich der computerbasierten Materialwissenschaften. Durch beste Kontakte zu universitären und institutionellen Forschergruppen verfügen wir auf der einen Seite über das wissenschaftliche Knowhow weltweit anerkannter Wissenschaftler. Andererseits besitzen wir aber auch die Flexibilität um kurzfristige Aufträge aus der Wirtschaft bearbeiten zu können.

» **our competencies**

We are an independent team of leading scientists in the field of computer based materials sciences. On the one hand, our excellent relations with several groups of academic and institutional researches provides us with the know-how of leading scientific experts, on the other hand, we are flexible enough to handle request on short notice from the industry.

Unser Weg ans Ziel

How we do - what we do

» **Projektverlauf**

Typische Forschungs- und Entwicklungsprojekte besitzen eine Laufzeit zwischen drei Monaten und einigen Jahren. Aber auch kurzfristigere Anfragen bearbeiten wir gerne. Die anfallenden Kosten hängen dabei sehr stark vom personellen und rechentechnischen Aufwand ab. Durch die Einwerbung öffentlicher Fördergelder können diese jedoch um bis zu 50% reduziert werden.

» **course of project**

Common research and development projects have a contract period between three month and several years. However, also request on short notice are gladly processed. The costs depend strongly on the necessary human and computational resources. The application for public grants can reduce these financial expenses by up to 50%.

AQcomputare

Gesellschaft für Materialberechnung mbH

Annaberger Straße 240
09125 Chemnitz

E-Mail info@matcalc.de

Telefon 0371 / 5347 - 591
Telefax 0371 / 5347 - 554

Ihr Forschungsvorhaben

Your Research Project

1

» Fördermittel

Wir beraten Sie aktiv bei der Beantragung öffentlicher Fördermittel für Ihr Forschungsprojekt.

» public grants

We support you by the application of public grants for your R&D project.

1

2

» Tieferes Verständnis

Sie gewinnen ein detailliertes physikalisches und chemisches Verständnis über ihr Materialsystem auf atomarer Ebene.

» deeper insights

You gain detailed physical and chemical knowledge about your material system on an atomic scale.

2

3

» Optimierung

Verbesserung von Materialeigenschaften durch gezielte Optimierung des Materialsystems.

» optimization

Improvement of material properties by well-directed optimization of your material system.

3

4

» Schneller

Kürzere Entwicklungs- und Produktzyklen mittels Reduktion der notwendigen Experimente.

» faster

shorter development and production cycles by reduction of necessary experiments

4

Ihre Vorteile im Überblick

Your benefits at a glance

5

» Billiger

Durch alle diese Punkte erreichen Sie eine Kostensenkung für Forschung und Entwicklung.

» cheaper

By all these points your company will achieve smaller expenses for R & D

5

6

» Patente & Geheimhaltung

Des Weiteren unterstützen wir sie gern bei der Registrierung von Patenten und Schutzrechten.

» patents & privacy

Moreover we support your registration of patents and property rights.

6

Geheimhaltung und Vertraulichkeit haben bei uns oberste Priorität.

Confidential and privacy have highest priority.

AQcomputare

Gesellschaft für Materialberechnung mbH

Annaberger Straße 240
09125 Chemnitz

E-Mail info@matcalc.de

Telefon 0371 / 5347 - 591
Telefax 0371 / 5347 - 554

C... PRO

ab initio calculations of chemical properties

Mit Hilfe von ab initio Molekulardynamik lassen sich detaillierte Aussagen über die Struktur von Molekülen und deren Wechselwirkung mit anderen Stoffen treffen. Chemische Reaktionen können so virtuell dargestellt, beschrieben und verstanden werden.

Praktische Anwendungen liegen zum Beispiel im Bereich von:

- » Oberflächenbeschichtung,
- » Lösungsvorgängen,
- » Polymersynthese,
- » Katalyse.

Die unten befindliche Grafik zeigt Momente einer chemischen Reaktion.

Via ab initio molecular dynamic detailed statements about the structure of molecules as well as their interaction with other materials can be made. In this way, chemical reactions can be described and understood by virtually computer experiments.

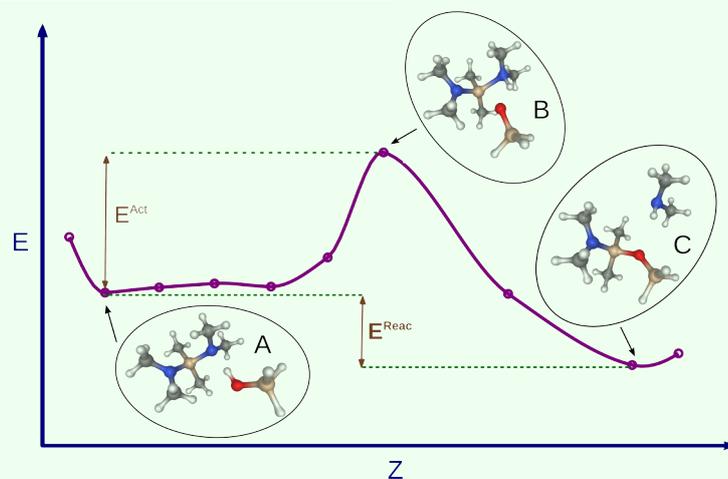
Applications are for example in the fields of:

- » **surface coating,**
- » **dissolubility processes,**
- » **polymere synthesis,**
- » **catalysis.**

These figure below shows the process steps of a chemical reaction.

Verstehen was Materialien im Innersten zusammenhält

Comprehending, what keeps materials together in their innermost



Energetischer Verlauf einer chemischen Reaktion (siehe Rückseite)

Energetic Reaction Path (see back side)

- » **A: Edukte**
- » **B: Übergangszustand**
- » **C: Produkte**

- » **A: reactants**
- » **B: transition state**
- » **C: products**

MATcalc

C... PRO

an example in detail

In der modernen Mikroelektronik werden integrierte Schaltkreise immer kleiner und kleiner. Dadurch treten vermehrt kapazitive Verluste auf. Um diese zu reduzieren verwendet man in den Isolationsschichten Materialien mit sehr geringer Dielektrizitätskonstante – so genannte ultra-low-k (ULK) Materialien. Allerdings werden bei bestimmten Fertigungsprozessen Hydroxylgruppen in der ULK-Oberfläche eingelagert. Diese führen zu einer höheren Polarität und durch die Adsorption von Wasser zu einem ungewünschten Anstieg der Dielektrizitätskonstante. Eine mögliche Lösung für dieses Problem ist die Nachbehandlung der ULK-Oberflächen mit Silazanmolekülen. Dieser Prozess wird häufig auch als k-restoring bezeichnet.

Abb. A, B und C zeigen die wichtigsten Reaktionsschritte der Chemie Bis(dimethylamino)dimethylsilane (DMADMS) mit der Hydroxylgruppe des Silanols, welches hier als Modell einer typischen ULK-Oberflächengruppe fungiert.

Basierend auf einer O-H-N Brückenbindung bildet sich in Abb. A ein Vorreaktionskomplex zwischen DMADMS und Silanol aus. Besitzt dieser eine genügend hohe Aktivierungsenergie (E_A), so ist ein Protonentransfer vom Silanol zum Stickstoff des DMADMS möglich. Der Übergangszustand (Punkt der höchsten Energie) ist in Abb. B zu sehen. Nach Überwindung des Übergangszustandes werden die Reaktionsprodukte gebildet. Dies geschieht durch eine Lockerung der Si-N Bindung, wodurch das Silanol an das Silizium des DMADMS binden kann. Abb. C zeigt die gebildeten Produktmoleküle mit der Si-O-Si Brücke.

Durch die Verwendung von Silazanen können Hydroxylgruppen silyliert und Kohlenstoff in die Systeme eingebracht werden. Dies ermöglicht eine kontrollierte Veränderung der freien Oberflächenenergie und eine Verringerung der Dielektrizitätskonstante. Durch gezielte Berechnung von Aktivierungs- und Reaktionsenergien kann die Wirksamkeit verschiedener Silazane bestimmt werden.

Weitere Details dieser Rechnungen können in der folgenden wissenschaftlichen Veröffentlichung O. Böhm et al., Phys Chem A 2011, 115, 8282 oder unter <http://www.matcalc.de/nachgelesen> werden.

In modern microelectronics, integrated circuits become smaller and smaller. This leads to increased capacitive losses. To reduce these losses materials with a very low dielectric constant - so-called ultra-low-k (ULK) materials - are used within the insulation layers. However, by certain manufacturing processes hydroxyl groups are incorporated in the ULK surface. They lead to a higher polarity and by moisture uptake to an increase of the dielectric constant. A possible solution to this problem is the treatment of ULK surfaces with silazanes. This process is often referred to as k-restoring.

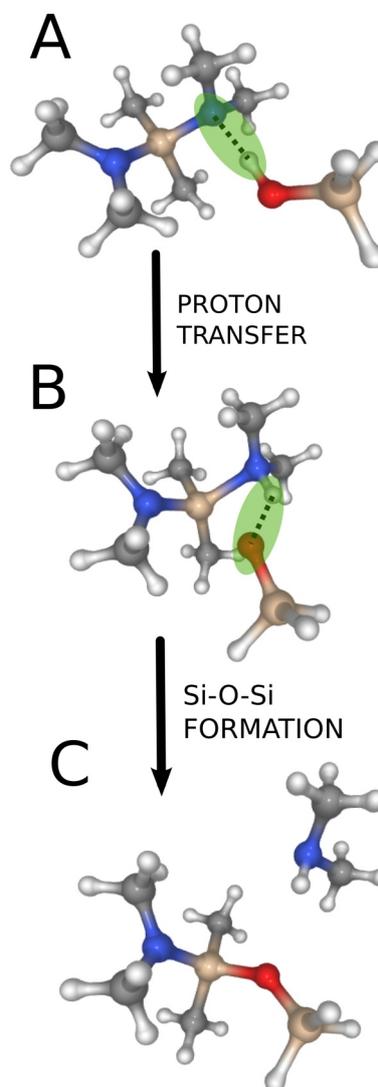
Figures A, B and C show the main steps of the chemical reaction of bis(dimethylamino) dimethylsilane (DMADMS) with the hydroxyl group of a silanol, which serves as a model of a typical ULK-surface group.

Based on an O-H-N bond formation in Figure A, a pre-reaction complex between DMADMS and silanol is formed. If the latter has a sufficiently high activation energy (E_A), a proton transfer from the silanol to the nitrogen of DMADMS is possible. The transition state (point of highest energy) is shown in Figure B. After passing the transition state of the reaction the products are formed. This is done by a weakening of the Si-N bond, so that the silanol can bind to the silicon of the DMADMS. Figure C shows the formed product molecules with the Si-O-Si bridge bond.

By the use of silazanes one can silylate hydroxyl groups and introduce carbon into the systems. This allows a controlled variation of surface free energy and a reduction of the dielectric constant. By specific calculations of the activation and reaction energies, the effectiveness of various silazanes can be determined.

More details of these calculations can be found in O. Böhm et al., Phys Chem A 2011, 115, 8282 or at

<http://www.matcalc.de>.





E... PRO

ab initio calculations of electronic properties

Die Berechnung der elektronischen Eigenschaften eines neuen Materials ist nur dann zuverlässig, wenn die relevanten - insbesondere auch quantenmechanischen Effekte - berücksichtigt werden.

The calculation of electronic properties of a new material or component can only be made on a basis of a theory that consider all relevant effects, in particular quantum mechanical effects.

Durch die Verkleinerung elektronischer Bauelemente zu **nanostrukturierten Bauteilen** ergeben sich neuartige **atomskalige Effekte**, welche sich nur unter Zuhilfenahme von "ab initio" Methoden beschreiben lassen. Auf diese Weise ist zum Beispiel eine Vorhersage von:

Due to proceeding reductions of electronic components to nanostructured components, there will be atomic scale effects, which can only be described with ab initio methods. Only with the aid of these methods it is for example possible to give an exact prediction on:

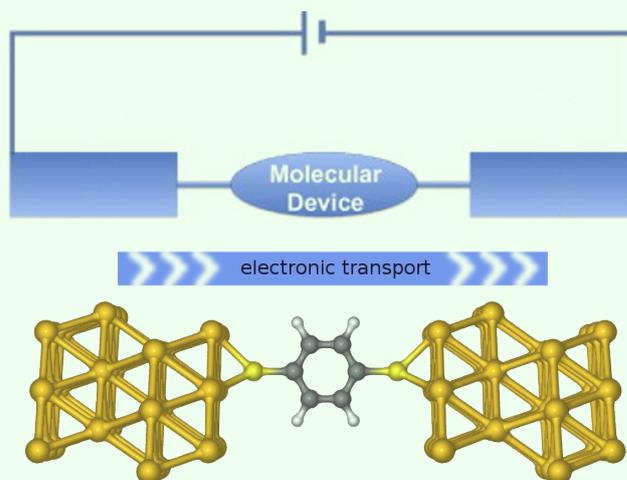
- » **Tunnelströmen,**
- » **Dielektrischen Eigenschaften,**
- » **Defektbildungsenergien,**
- » **Zustandsdichten und Bandstrukturen**

- » **tunnel current,**
- » **dielectric properties,**
- » **defect energies or**
- » **density of states and band structures.**

möglich. Die unten befindliche Grafik zeigt die Modellierung einer atomskaligen Berechnungen zur Bestimmung des elektronischen Transportes durch ein Molekül.

The figure shows an example of atomic scale calculations for the determination of the electronic transport in an organic molecule.

Die Anforderungen an moderne Werkstoffe steigen *The requirements of modern materials are rising*



» Elektronischer Transport durch ein Molekül (siehe Rückseite für weitere Details)

» *electronic transport in an organic molecule (see back side for further details)*

MATcalc



E... PRO

an example in detail

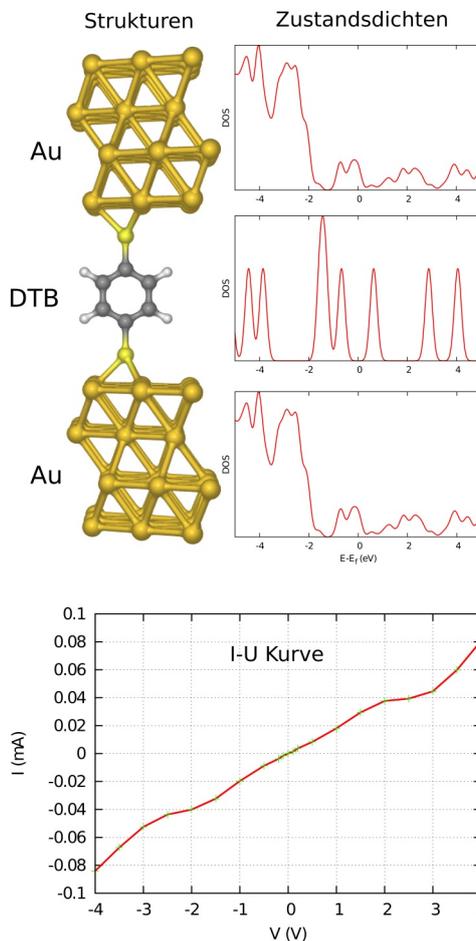
Atomskalige ab initio Modellierung wird zur Berechnung und Vorhersage von strukturellen-, opto-elektronischen- und Transporteigenschaften neuer Materialien und Nano-Strukturen eingesetzt. Dazu gehören unter anderem auch organische oder an-organischen Molekülen, Nano-Clustern und ein-dimensionalen Systemen wie z. B. Nano-Drähten und Nano-Röhren.

First principles ab initio modeling could be applied to the investigation and prediction of structural, opto-electronic, and transport properties of new materials and nano-structures. These include different organic or inorganic molecules, nano-clusters and one-dimensional systems such as nano-wires and nano-tubes.

Die elektronische Struktur und die optischen Eigenschaften inklusiver der physikalischen Größen wie z.B. Bandstruktur, Bandlücke, die elektronische Zustandsdichte, HOMO / LUMO-Niveaus, Defektniveaus innerhalb der Bandlücke, optische Bandlücke, Schwingungsmoden und die Bandstruktur der Phononen, Dielektrizitätskonstante, Spinaufgelöste Elektronendichte usw. sind alles Materialeigenschaften, die basierend auf atomaren Anordnung des Systems berechnet werden können.

The electronic structure and optical properties and the corresponding physical quantities such as band structure, band gap, density of electronic states, HOMO/LUMO levels, defect levels within the band gap, optical band gap, vibration modes and the band structure of phonons, dielectric response and dielectric function, spin density and etc. are all material properties which could be calculated based on atomic arrangement of the system.

Im folgenden Beispiel wird gezeigt wie diese Methodik für die Berechnung der Leitfähigkeit eines Di-thiol Benzol Molekül (DTB) zwischen zwei Gold (111)-Elektroden verwendet wird. Der erste Schritt ist die Berechnung der Atomstruktur des Systems. Die Goldelektroden werden von der relaxierten Struktur eines perfekten FCC Goldkristall konstruiert. Die atomare Struktur des DTB-Moleküls und die optimale Position des DTB auf den 111 Gold-Oberflächen werden dann mit der gleichen Methode berechnet.



Danach wird die elektronische Struktur berechnet und in Kombination mit NEGF Transportformalismus die Leitfähigkeit bei verschiedenen angelegten Spannungen ermittelt. Die Energie aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit von Elektronen über das DTB-Molekül, sowie IV-Kennlinie des entsprechenden Nano-Bauelementes sind in den Abbildungen dargestellt. Dieses Beispiel zeigt wie die direkt messbaren physikalischen Größen eines nano-Systems mit der leistungsfähigen abinitio Methodik parameterfrei und auf atomarer Skala berechnet und modellieren werden kann.

In the following example we show how these methods could be applied to the calculation of the conductance of the Di-thiol benzene between (DTB) to gold (111) electrodes. As mentioned above the first step is the calculation of relaxed geometry of the system. The gold electrodes are constructed from the relaxed structure of a perfect FCC gold crystal. The atomic structure of DTB molecule and the optimal position of DTB on the 111 gold surfaces is then calculated with the same methodology. After constructing the relaxed structure electronic structure calculation combined with NEGF transport formalism are applied to the calculation of the conductance at different applied voltages. The energy resolved transmission probability of electrons across DTB molecule, as well as I-V characteristic of the corresponding nano-junction is depicted in figures. This example shows the power of this methodology to calculate directly measurable physical quantities based on a first-principles parameter free and atomic scale model.



S . . . PRO

ab initio calculations of structural properties

Zur gezielten Beeinflussung der Eigenschaften eines Materialsystems wird ein genaues Verständnis der zugrunde liegenden physikalischen Effekte benötigt.

Eine Vielzahl dieser Eigenschaften lassen sich nur mit Hilfe quantenmechanischer Berechnungen exakt beschreiben. Anwendung liegen im Bereich von:

- » Rissmodellierung,
- » Haftungseigenschaften,
- » Spannungs-Dehnungs-Diagramme,
- » Kristallzüchtung,
- » Phasenübergänge,
- » Nanostrukturen (Quantenpunkte, -drähte).

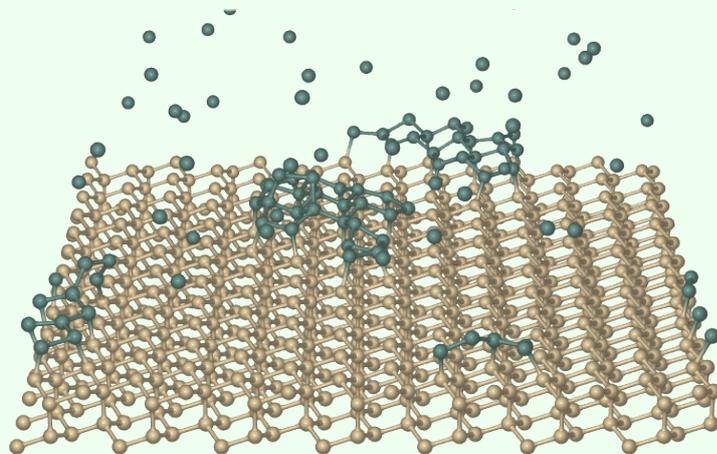
For specific manipulation of a material system an improved understanding of the fundamental physics is necessary.

Most of this effects can only be developed with quantum mechanical calculations. Applications are for example in the fields of:

- » *crack modeling,*
- » *adhesive strength,*
- » *stress-strain diagrams,*
- » *crystal growth,*
- » *phase diagrams,*
- » *nano structures (quantum dots and wires).*

Computergestützte Materialforschung Virtual material screening

MATcalc



» Zu sehen ist eine Momentaufnahme einer atomaren Simulation eines Wachstumsprozesses aus der Gasphase.

» One can see a snapshot of an atomic simulation of a deposition process from the vapour phase.

S... PRO

an example in detail

In vielen Bereichen werden kristalline oder amorphe Strukturen mit ganz bestimmten Eigenschaften benötigt. Eine Möglichkeit zur Herstellung solcher Materialien ist das „Aufwachsen“ auf vorhandenen Kristallstrukturen (Substratmaterialien). Ein solcher Prozess soll hier veranschaulicht werden.

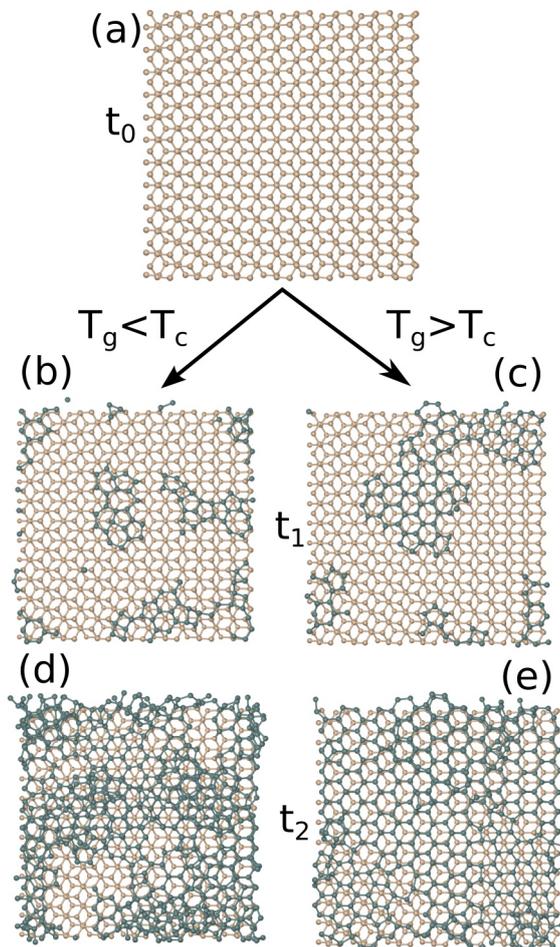
In Abbildung (a) ist zunächst ein kristallines Substratmaterial (gelb) bestehend aus einer fiktiven Atomsorte A vor dem Start des Wachstumsprozesses ($t=t_0$) dargestellt. Danach beginnt die eigentliche Simulation. Dabei werden die Substrat- und Gastemperatur sowie der Gasfluss als äußere Parameter vorgegeben.

In den Abbildungen (b) und (c) ist eine Momentaufnahme des Wachstumsprozesses zum Zeitpunkt ($t_1 > t_0$) zu sehen. In Abhängigkeit von der Gastemperatur T_g können hier schon erste Unterschiede ausgemacht werden. Es bilden sich erste „Inseln“ des aufwachsenden Materials der Atomsorte B (olivfarben) aus. Oberhalb einer kritischen Temperatur T_c sind diese deutlich größer und zusammenhängender, während sich unterhalb der kritischen Temperatur mehrere kleine Inseln ausbilden. Der Grund für dieses Verhalten liegt in der Beweglichkeit der adsorbierten Atome begründet. Je niedriger die Gastemperatur ist, desto schlechter/langsamer können sich die Atome auf der Oberfläche bewegen. Das bedeutet insbesondere, dass es bei niedrigen Temperaturen den Atomen zunehmend schwerer fällt möglichst ideale Adsorptionspositionen einzunehmen. Solche sind hauptsächlich an den Kanten von Inseln zu finden, da hier eine größere Anzahl von Nachbaratomen zur Verfügung steht als auf der flachen Oberfläche.

Die Momentaufnahmen (d) und (e) zu einem späteren Zeitpunkt ($t_2 > t_1$) bestätigen diesen Trend. Bei niedrigeren Temperaturen wächst das Material B vorzugsweise amorph auf, während bei höheren Temperaturen ein kristallines, lagenweises Wachstum beobachtet werden kann.

In many areas crystalline or amorphous structures with specific properties are required. One way to obtain such materials is the growths on existing crystal structures (substrate materials). Such a process should be illustrated in the following.

In Figure (a) a crystalline substrate material (yellow) consisting of a fictitious atom type A before the start of the growth process ($t = t_0$) is shown. Subsequently the actual simulation starts. Thereby, the substrate and gas temperature as well as the gas flow can be specified as external parameters.



In the Figures (b) and (c) a snapshot of the growth process at time ($t_1 > t_0$) is shown. Depending on the gas temperature T_g one can already identify first differences. First "islands" are formed, consisting on the deposited material of atom type B (olive). Above a critical temperature T_c these islands are much larger and more cohesive, while below the critical temperature several small islands are formed. The reason for this behavior lies in the mobility of adsorbed atoms. At lower gas temperatures, the atoms can move slower on the substrate surface. This means in particular that at low temperatures it becomes increasingly difficult for the atoms to reach an ideal adsorption position. Those are found particularly at the edges of islands, because there is a larger number of neighboring atoms available than on the flat surface.

The snapshots (d) and (e) at a later time ($t_2 > t_1$) confirm this trend. At lower temperatures the material B grows preferably in an amorphous structure, while at higher temperatures a crystalline, layerwise growth can be observed.

ReaxFF+

Large scale calculations of complex systems

Eine adäquate atomskalige Beschreibung der chemischen und physikalischen Eigenschaften komplexer Prozesse erfordern Zeit- und Längenskalen, welche mit reinen ab initio Methoden nicht erreicht werden können. Hierzu zählen unter anderem:

- » **Bruch- und Rissbildung in Verbundmaterialien**
- » **Diffusion von Makromolekülen durch Membranen**
- » **Verbrennungsreaktionen in einem Reaktor**
- » **Erstarren von Polymerschmelzen**
- » **Reibungs- und Abriebprozesse**

Die Simulation solcher Prozesse ist mit einem reaktiven Kraftfeld (ReaxFF) möglich. Die Beschreibung der interatomaren Wechselwirkungen durch analytische Funktionen ermöglicht die Simulation auf mesoskopischen Zeit- und Längenskalen bei exzellenter Genauigkeit. Die besondere Herausforderung besteht in der optimalen Wahl der Potentialparameter. Die Entwicklung von individuell angepassten Parametersätzen ist eine der Kernkompetenzen von MATcalc.

An adequate description of the chemical and physical properties of complex processes at the atomic scale require time and length scales, which can not be achieved with pure ab initio methods.

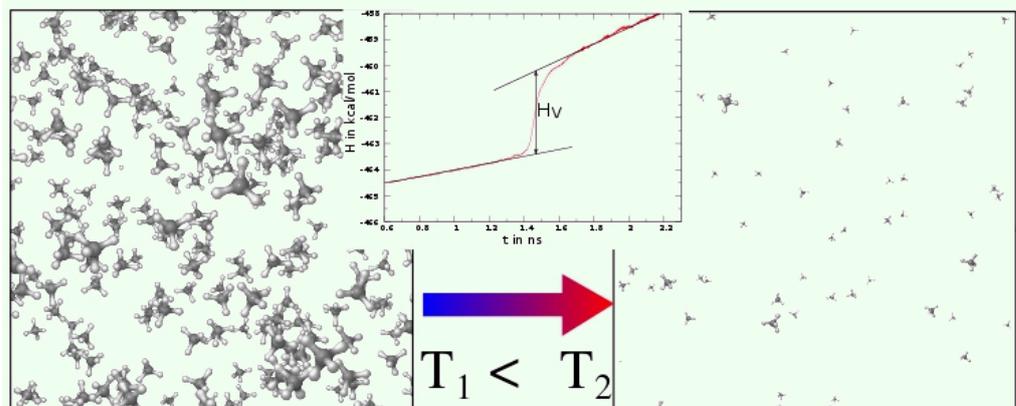
These include, among others:

- » **Breaking and cracking in composite materials**
- » **Diffusion of macromolecules through membranes**
- » **Combustion reactions in a reactor**
- » **Solidification of polymer melt**
- » **Friction processes**

The simulation of such processes is possible with a reactive force field (ReaxFF). The description of the interatomic interactions by analytical functions allows the simulation on mesoscopic time and length scales with excellent accuracy. The particular challenge is the optimal choice of the potential parameters. The development of customized parameter sets is one of the core competencies of MATcalc.

Molecular Modelling

Mit etwas Kleinem, Großes bewegen!



» Die Abbildung zeigt den Übergang von der festen zur flüssigen Phase von Methan. Links: Fest; Rechts: Flüssig; Deutlich zu erkennen ist der Sprung der Enthalpie aus welcher sich die Schmelzwärme bestimmen lässt.

» The figure shows the transition from the solid to the liquid phase of methane. Left: solid; Right: liquid; Clearly visible is the jump of the enthalpy from which the heat of fusion can be determined.

MATcalc

ReaxFF+

Unser Leistungsspektrum

Angepasst an Ihre individuellen Bedürfnisse und verfügbaren Ressourcen bieten wir ein flexibles Leistungsspektrum an. Dies reicht von der Entwicklung optimierter Parametersätze über die Bereitstellung einer Simulationsumgebung bis hin zu einem Komplettpaket zur maßgeschneiderten Lösung ihres Problems. Dabei beraten wir sie gern bei der Auswahl der optimalen Pakete um ein Maximum an Effizienz bei der Lösung ihrer Fragestellung zu erzielen.

Unser Leistungsspektrum:

Basic

Nach einer Analyse Ihrer Problemstellung entwickeln wir einen dafür optimierten Parametersatz und/oder Potentiale. Diese können Sie dann in LAMMPS oder ihrem eigenen Programmpaket verwenden, um selbst die notwendigen Simulationen durchzuführen.

Basic plus

Dieses Paket ist eine Erweiterung des Basic Pakets. Wir stellen Ihnen die zur ReaxFF-Simulation notwendige Software inkl. Support auf einer sofort funktionsfähigen virtuellen Maschine bereit. Sie verwenden diese dann selbstständig.

Optional kann die virtuelle Maschine auch bei MATcalc gehostet werden.

Premium

Im Fokus steht die Effiziente Lösung ihrer Problemstellung mittels ReaxFF. Dazu bieten wir einen umfangreichen Komplettservice:

- » **detaillierte Problemanalyse**
- » **Entwicklung eines optimierten Parametersatzes**
- » **Auswahl der notwendigen Simulationen**
- » **Durchführung der Simulationen auf unserem Cluster**
- » **Auswertung und Analyse der Ergebnisse**

Adapted to your individual requirements and available resources, we offer a flexible range of services. These range from the development of optimized parameter sets and providing a simulation environment to a complete package with a detailed analysis of your problem resulting in a customized solution. We'll gladly assist you in finding the optimal package in order to achieve maximum efficiency in solving your problem.

Our range of services:

Basic

After an analysis of your problem, we develop an optimized parameter set and/or new potentials. These can then be used in LAMMPS or your own program packages to perform the necessary simulations.

Basic plus

This package is an extension of the basic package. We provide all the necessary ReaxFF simulation software including support, ready-for-use in a virtual machine, so that you can run the simulations yourself.

Optionally, the virtual machine can be hosted at MATcalc.

Premium

The focus is on the efficient solution of your problem using ReaxFF. We offer a comprehensive full service package:

- » **Detailed analysis of the problem**
- » **Development of an optimized set of parameters**
- » **Selection of the necessary simulation**
- » **Execution of simulations on our cluster**
- » **Evaluation and analysis of results**

Geschäftsleitung

Management

Die Firmengründung der AQcomputare Gesellschaft für Materialberechnung mbH erfolgte am 11. November 2009 mit dem Eintrag in das Chemnitzer Handelsregister.

Ihren Ursprung hat die AQcomputare im Geschäftsbereich Materialberechnung der GWT-TUD GmbH. Mit zunächst drei MitarbeiterInnen wurden hauptsächlich Aufgabenstellungen auf dem Gebiet der Berechnung von elektronischen Eigenschaften für die Mikroelektronik erfolgreich bearbeitet.

Zusammen mit Partnerfirmen versteht die AQcomputare sich als unabhängiger wissenschaftlicher Dienstleister für interdisziplinäre Aufgabenstellungen in der Auftragsforschung.

Die AQcomputare gliedert sich in drei Geschäftsbereiche:

- » **Materialberechnung auf atomarem Niveau**
- » **Simulation mittels FEM-Modellierung**
- » **Vermietung von Computerressourcen**

The foundation of the company AQcomputare is registered in the trade register of Chemnitz. The entry into the commercial register took place on the 11. th of November 2009.

The AQcomputare had its origins in the business area of material calculation at the GWT-TUD GmbH. Having started out initially with three employees the main tasks were located in the sector for calculation of electronic properties for the microelectronic, which were finished successfully.

The AQcomputare complained itself as an independent scientific service provider for interdisciplinary task within contract researches in cooperation with associated companies.

The company is subdivided into three sectors:

- » **material calculations on an atomic scale**
- » **simulations within FEM-Modeling**
- » **renting of computer resources**



Prof. Dr. Christian Radehaus

Gesellschafter

E radehaus@matcalc.de

T +49 371 5347 552

F +49 371 5347 554



Prof. Dr. Christian Radehaus leitete bis zum Jahr 2008 die Professur für Opto- und Festkörper-lektronik an der Technischen Universität Chemnitz. Nach seiner Emeritierung widmet er sich der Materialberechnung. Durch die Schwerpunkte der Lehre im Bereich der Nanotechnologie, Atomic Scale Engineering und der Integrierten Optik trägt er wesentlich zur wissenschaftlich fundierten Arbeit der AQcomputare GmbH bei.

Prof. Dr. Christian Radehaus was the former chair of solid state physics and opto-electronics at the Chemnitz University of Technology until the year 2008. After receiving emeritus status in 2008, Prof. Radehaus devoted himself for the material calculations. Because of his main areas of research and teaching in nanotechnology, atomic scale engineering and integrated optics, he contributes the scientific founded work of AQcomputare GmbH.



Dr. Philipp Plänitz

Geschäftsführender
Gesellschafter

plaenitz@matcalc.de E

+49 371 5347 590 T

+49 371 5347 549 F



Dr. Philipp Plänitz studierte ab 1999 an der Technischen Universität Chemnitz den Diplomstudiengang Physik. Innerhalb der Regelstudienzeit absolvierte Dr. Plänitz sein Studium und widmete sich anschließend seiner Promotion am Lehrstuhl für Opto- und Festkörperelektronik (bis 2009). Zusammen mit Herrn Prof. Dr. Radehaus gründete Dr. Plänitz im Jahre 2009 die AQcomputare Gesellschaft für Materialberechnung mbH.

Dr. Philipp Plänitz startet his physics studies in the 1999 at the Chemnitz University of Technology. After receiving his diploma in 2004, he started his doctoral studies at the professorship "Opto- und Festkörperelektronik" (until 2009). In cooperation with Prof. Radehaus he founded the AQcomputare Gesellschaft für Materialberechnung mbH in 2009.

Kontakt

Contacts



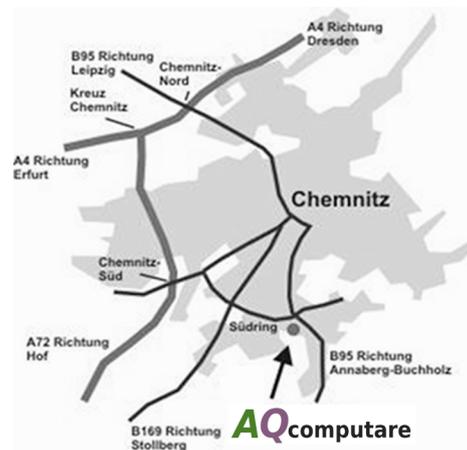
AQcomputare

Gesellschaft für Materialberechnung mbH

Annaberger Straße 240
09125 Chemnitz

Internet <http://www.matcalc.de>
E-Mail info@matcalc.de

Telefon +49 371 / 5347 - 591
Telefax +49 371 / 5347 - 554



Ankunft mit der Bahn

» Vom Hauptbahnhof aus benutzen Sie die Straßenbahn Linie 6 (Richtung Altchemnitz) oder Linie 522 (Richtung Stollberg) bis zur Haltestelle „Alt-Chemnitz-Center“ (ACC) (Fahrzeit ca. 20 Minuten).

Anfahrt mit dem Auto

» Aus Richtung Dresden bzw. Erfurt/Gera (A4) fahren Sie am Anschlusskreuz Chemnitz auf die A72 (Richtung Hof/München).

» Dann verlassen Sie (wie die aus Richtung Plauen/Hof bzw. Leipzig kommenden) die A72 an der Anschlussstelle Chemnitz Süd und fahren in Richtung Annaberg-Buchholz (auf dem Südring).

» Das Technologie Centrum Chemnitz (TCC) ist ausgeschildert und befindet sich an der Kreuzung Südring/Annaberger Straße (B 95).

Via public transport

» Arriving at the main trainstation you catch the tramway 6 (destination Altchemnitz) or tramway 522 (destination Stollberg) till "Alt-Chemnitz-Center" (duration approx. 20 min.)

Arriving by car

» From Dresden or Erfurt / Gera (A4) turn at the interchange Chemnitz on the A72 (towards Hof/München)

» Leave the A72 at the interchange Chemnitz Süd and drive towards Annabergg-Buchholz (on the Südring)

» The Technology Centrum of Chemnitz is signposted and is strategically located at the crossroad Südring/Annaberger Straße (B95)

