

# Kurzzusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden unterschiedliche Keimbildungsphänomene analytisch und quantitativ mit Hilfe von molekulardynamischen und strömungsmechanischen Simulationen untersucht. Dabei konnten Phänomene aufgelöst werden, deren Beobachtung in experimentellen Aufbauten auf Grund von begrenzter Messtechnik nicht möglich ist. Ein gutes Beispiel hierfür, da experimentelle Untersuchungen schwierig und deshalb selten sind, findet sich in der homogenen Keimbildung von  $\text{CO}_2$ , welche innerhalb dieser Arbeit über einen Temperatur- und Übersättigungsbereich von  $T = 200 - 237 \text{ K}$  und  $S = 2.03 - 9.89$  mit und ohne Argon als Trägergas simuliert und quantitativ bestimmt werden konnte. Hierfür wurde mit Hilfe der Programmpakete MOSCITO und LAMMPS eine Simulations- und Analysestruktur entwickelt, welche auf dem Potentialmodell von *Zhang und Duan*, der Clusterstatistik von *ten Wolde und Frenkel*, sowie der Mean First-Passage Times und *Yasuoka-Matsumoto* Methodik basiert. Die erhaltenen Daten wurden mit mehreren theoretischen Ansätzen verglichen, wobei maximale Abweichungen von bis zu drei Größenordnungen zu beobachten waren. Weiterhin konnten die molekulardynamischen Simulationen eingesetzt werden um die Bildung von *Janus*-Partikeln zweier begrenzt mischbarer Modellschubstanzen aus der Gasphase auf atomarer Ebene zu analysieren. Hierbei konnten strukturelle Variationen der nahe- und postkritischen Cluster mittels simpler Modifikationen von Systemparametern nachvollzogen werden, wie sie auch in experimentellen Synthesen gefunden worden sind. Für ein besseres Verständnis der Nukleationspulskammer zur Messung von Keimbildungsraten wurde der Versuchsaufbau in einem virtuellen Modell nachvollzogen und mittels strömungsmechanischer Berechnung dynamische Druck-, Dichte- und Temperaturprofile des gesamten Messvolumens mit hoher Auflösung erstellt. Hierbei konnte der Einfluss von Wärmeübertragung über die Kammerwände auf ein übliches Expansionspulsexperiment von *n*-Propanol und Helium bestimmt werden. Dadurch konnten neue Erkenntnisse über das Verhältnis der Größe des Drucksprunges zum Ausmaß der Keimbildungsrate, welches 1993 von *Viisanen, Strey und Reiss* beobachtet wurde, gewonnen werden.