

Kurzbeschreibung für das Großprojekt nic00018

Prof. Dr. Marcus Müller
Institut für Theoretische Physik
Georg-August-Universität
Friedrich-Hund-Platz 1, 37077 Göttingen

Göttingen, den 23. Januar 2010

Titel des Forschungsvorhabens:

**Simulation der Dynamik von Polymersystemen:
Gleiten von Tröpfchen auf deformierbaren Oberflächen
und Kinetik der Strukturbildung in mehrkomponentigen Systemen**

Beteiligte Wissenschaftler: Prof. Dr. M. Müller (federführend)
Dr. V. Chappa
Dr. K. Ch. Daoulas
Dr. F. Léonforte
M.Sc. M. Mülayim
Dipl.-Phys. B. Steinmüller
M.Sc. N. Tretyakov

Zusammenfassung

Das Ziel unserer Untersuchung ist das Verständnis der Dynamik in makromolekularen Systemen mit einem Schwerpunkt auf (i) der Bewegung von Polymertröpfchen auf weichen, elastisch deformierbaren oder reaktiven Substraten und (ii) der Kinetik der Strukturbildung in mehrkomponentigen Polymersystemen. Beide Phänomene sind durch ein breites Spektrum an Zeit- und Längenskalen gekennzeichnet, welche die atomistischen Dimensionen bei weitem übersteigen. Deshalb verwenden wir einfache, vergrößerte Modelle, welche sich auf die wesentlichen Wechselwirkungen beschränken. Diese Modelle werden mit komplementären, rechnergestützten Methoden – Monte-Carlo Simulationen, Molekulardynamiksimulationen mit DPD-Thermostaten, numerischer selbstkonsistenter Feldtheorie und Single-Chain-in-Mean-Field Simulationen – untersucht.