

**Antrag auf Rechenzeit am HLRN für den Zeitraum
1. April 2012 – 31. März 2013 (1 Jahr)
Fortsetzungsantrag für das Großprojekt nic00018**

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

Göttingen, den 27. Januar 2012

Titel des Forschungsvorhabens:

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

Beteiligte Wissenschaftler: Prof. Dr. M. Müller (federführend),
Dr. V. Chappa,
Dr. A. Galuschko,
Dr. F. Léonforte,
Dr. U. Welling,
Dr. D. W. Sun,
M.Sc. M. Mülayim,
M.Sc. N. Tretyakov

Das Ziel unserer Untersuchung ist das Verständnis der Dynamik in makromolekularen Systemen mit zwei Schwerpunkten. Das erste Teilprojekt untersucht die Bewegung von Polymertröpfchen auf verschiedenen Substraten (z.B. weich oder reaktive) ohne oder mit verdampfendem Lösungsmittel. Das zweite Teilprojekt behandelt Kinetik der Strukturbildung in mehr-komponentigen Polymersystemen und neuen Simulationsmethoden zur Kopplung von teilchenbasierten Modellen und einer Kontinuumsbeschreibung (*heterogeneous multiscale modelling* oder *equation-free modelling*). Beide Phänomene sind durch ein breites Spektrum an Zeit- und Längenskalen gekennzeichnet, die die Grenzen von atomistischen Modellen weit überschreiten. Deshalb verwenden wir minimale, vergrößerte Modelle, welche sich auf die wesentlichen Wechselwirkungen beschränken. Diese Modelle werden mit komplementären, rechnergestützten Methoden – Monte-Carlo-Simulationen, Molekulardynamiksimulationen mit DPD-Thermostaten, numerisch selbstkonsistenter Feldtheorie und Single-Chain-in-Mean-Field Simulationen – untersucht. Trotz der effizienten vergrößerten Modelle und modernen Simulations- und Analysetechniken können diese Fragestellungen nicht auf einem Cluster von Hochleistungs-PCs bearbeitet werden und setzen die Verwendung von Supercomputern für eine erfolgreiche Bearbeitung zwingend voraus.