

## **Atomistische molekulare Simulationen für Ingenieurwissenschaften: Methoden, Werkzeuge und Ergebnisse**

Prof. Dr.-Ing. habil. Jadran Vrabec, Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik, Universität Paderborn

Durch den Einsatz von kraftfeldbasierten Molekulardynamik (MD) und Monte-Carlo (MC) Simulationen sind zahlreiche praxisrelevante Probleme in den Ingenieurwissenschaften erstmals überhaupt der Modellierung und Simulation zugänglich geworden. Auf der Grundlage physikalisch sinnvoller und quantitativ validierter Modelle der molekularen Wechselwirkungen, die sich auf quantenchemische Rechnungen und die verfügbaren Experimentaldaten stützen, können technisch relevante Stoffsysteme sicher und zuverlässig mit der molekularen Simulation analysiert werden. Getrieben wird dies sowohl durch methodische Fortschritte als auch den weiterhin exponentiellen Zuwachs an Rechenleistung.

In gemeinschaftlicher Arbeit von Ingenieuren und Informatikern werden zwei Simulationswerkzeuge entwickelt: *ms2* [1] und *ls1 mardyn*. Sie sind auf unterschiedliche Anwendungsbereiche ausgelegt: *ms2* zielt auf thermophysikalische Eigenschaften makroskopischer Fluide ab, *ls1/MarDyn* auf nanoskalige Prozesse. Solche Prozesse erfordern zur Untersuchung typischerweise sehr viel größere molekulare Ensembles, die räumliche Inhomogenitäten aufweisen. Zur effizienten Simulation auf aktuellen Großrechnern sind daher besondere Anstrengungen erforderlich.

Im Vortrag wird ein Überblick über die Arbeiten in der Gruppe des Vortragenden gegeben. Dabei wird auch eine neue Methode zur Generierung umfassender thermodynamischer Datensätze für die Entwicklung von Zustandsgleichungen für Reinstoffe vorgestellt. Weiterhin werden Ergebnisse zu Mischungseigenschaften technisch relevanter Mehrkomponentensysteme diskutiert.

- [1] S. Deublein, B. Eckl, J. Stoll, S. V. Lishchuk, G. Guevara-Carrion, C. W. Glass, T. Merker, M. Bernreuther, H. Hasse and J. Vrabec: *ms2: A Molecular Simulation Tool for Thermodynamic Properties*, *Computer Physics Communications* **182**: 2350-2367 (2011).