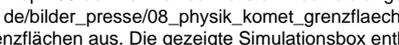
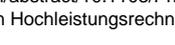




## Computersimulationen für Grenzflächenberechnungen verbessert

**Computersimulationen für Grenzflächenberechnungen verbessert** Computersimulationen spielen in der heutigen Zeit eine immer größere Rolle bei der Beschreibung und Entwicklung neuer Materialien. Aber trotz großer Fortschritte sind Simulationen in der statistischen Physik üblicherweise auf Systeme von wenigen 100.000 Teilchen beschränkt und damit um ein Vielfaches kleiner als typische Experimente. Die Wissenschaftler nutzen daher sogenannte "Finite-Size-Korrekturen", um aus vergleichsweise kleinen, simulierbaren Systemen makroskopische Größen korrekt zu bestimmen. Einem Team der Johannes Gutenberg-Universität Mainz (JGU) ist es nun gelungen, das Verständnis dieser Korrekturen bei der Bestimmung von Grenzflächenspannungen zu verbessern und damit wesentlich genauere Vorhersagen zu ermöglichen. Die Grenzflächenspannung ist für viele Phänomene wie zum Beispiel die Keimbildung von Wassertröpfchen in der Atmosphäre, die Kristallisation von Proteinen aus Lösungen oder das Wachstum und die Stabilität von Nanokristallen eine wichtige physikalische Kenngröße. Sie tritt zwischen verschiedenen Phasen eines Materials auf, also zwischen der festen, der flüssigen oder der gasförmigen Phase. Die Größe ist experimentell schwierig zu bestimmen, und verlässliche analytische Theorien fehlen oftmals auch. Deshalb ist es von großer Bedeutung, hierfür Computer-Simulationsmethoden zu entwickeln. Den Mainzer Physikern Dipl.-Phys. Fabian Schmitz, Dr. Peter Virnau und Prof. Dr. Kurt Binder ist es durch den Einsatz einer neuartigen Simulationsmethode gelungen, die Natur der "Finite-Size-Korrekturen" bei der Bestimmung von Grenzflächenspannungen zu verstehen. Diese Arbeit, die erst durch den Einsatz von mehreren Millionen CPU-Stunden auf dem Mainzer Supercomputer Mogon ermöglicht wurde, wird in Zukunft dazu beitragen, Grenzflächenspannungen mit höchster Präzision in Simulationen zu bestimmen. Die Ergebnisse wurden in dem renommierten Fachmagazin Physical Review Letters veröffentlicht. Hochleistungsrechnen gewinnt an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz immer mehr an Bedeutung. Voraussichtlich ab dem ersten Quartal 2016 wird der geplante neue Hochleistungsrechner Mogon II das aktuelle System ersetzen. Mogon II soll unter den Top 100 der weltweit schnellsten Hochleistungsrechner rangieren.  Unter Koexistenzbedingungen bilden Kristall (rot) und flüssige Phase (blau) Grenzflächen aus. Die gezeigte Simulationsbox enthält 3660 Teilchen mit Hartkugelwechselwirkung. Durch periodische Randbedingungen und Finite-Size-Scaling (systematische Variation der Boxgröße) kann mittels Simulationen die Oberflächenspannung sehr genau bestimmt werden.   
Quelle: Fabian Schmitz, Institut für Physik, JGU  
Veröffentlichung: Fabian Schmitz, Peter Virnau, Kurt Binder  
Determination of the Origin and Magnitude of Logarithmic Finite-Size Effects on Interfacial Tension: Role of Interfacial Fluctuations and Domain Breathing  
Physical Review Letters, 26. März 2014  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.125701  
Weitere Informationen: Dipl.-Phys. Fabian Schmitz  
Kondensierte Materie KOMET  
Institut für Physik  
Johannes Gutenberg-Universität Mainz (JGU)  
D 55099 Mainz  
Tel. +49 6131 39-24104  
Fax +49 6131 39-25441  
E-Mail: schmifa@uni-mainz.de  
<http://www.komet331.physik.uni-mainz.de/schmitz.php>  
Weitere Links: <http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.112.125701>  
<http://www.uni-mainz.de/presse/60142.php> (Pressemitteilung "8,7 Millionen Euro für neuen Hochleistungsrechner MOGON II")  


### Pressekontakt

Johannes Gutenberg-Universität Mainz (JGU)

55122 Mainz

schmifa@uni-mainz.de

### Firmenkontakt

Johannes Gutenberg-Universität Mainz (JGU)

55122 Mainz

schmifa@uni-mainz.de

Die Johannes Gutenberg-Universität Mainz (JGU) zählt mit rund 36.500 Studierenden aus über 130 Nationen zu den zehn größten Universitäten Deutschlands. Als einzige Volluniversität des Landes Rheinland-Pfalz vereint sie nahezu alle akademischen Disziplinen, inklusive Universitätsmedizin Mainz und zwei künstlerischer Hochschulen, unter einem Dach ? eine in der bundesdeutschen Hochschullandschaft einmalige Integration. Mit 84 Studienfächern mit insgesamt 219 Studienangeboten, darunter 95 Bachelor- und 101 Masterstudiengängen sowie 6 Zusatz-, Aufbau- und Erweiterungsstudiengängen, bietet die JGU eine außergewöhnlich breite Palette an Studienmöglichkeiten. Rund 4.150 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, darunter 540 Professorinnen und Professoren, lehren und forschen in mehr als 150 Instituten und Kliniken (Stichtag: 01.12.2011, aus Landes- und Drittmitteln finanziert). Die JGU ist eine internationale Forschungsuniversität mit weltweiter Anerkennung. Dieses Renommee verdankt sie sowohl ihren herausragenden Forscherpersönlichkeiten als auch ihren exzellenten Forschungsleistungen in der Teilchen- und Hadronenphysik, den Materialwissenschaften, den Erdsystemwissenschaften, der translationalen Medizin, den Lebenswissenschaften, den Medizindisziplinen und den historischen Kulturwissenschaften. Die wissenschaftliche Leistungsfähigkeit der Johannes Gutenberg-Universität Mainz wird durch den Erfolg in der Exzellenzinitiative des Bundes und der Länder bestätigt: Die JGU gehört zu den 23 Hochschulen in Deutschland, die es geschafft haben, sowohl eine Bewilligung für ein Exzellenzcluster als auch eine Bewilligung für eine Exzellenz-Graduiertenschule zu erhalten. Ihr Exzellenzcluster PRISMA, in dem vorwiegend Teilchen- und Hadronenphysiker zusammenarbeiten, und ihre materialwissenschaftliche Exzellenz-Graduiertenschule MAINZ zählen zur internationalen Forschungselite. Bis zu 50 Millionen Euro werden bis 2017 in diese beiden Projekte fließen. Zudem bestätigen gute Platzierungen in nationalen und internationalen Rankings sowie zahlreiche weitere Auszeichnungen die Forschungserfolge der Mainzer Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. Diese Erfolge werden u.a. durch die einzigartigen Großforschungsanlagen der JGU ermöglicht, wie den Forschungsreaktor TRIGA und den Elektronenbeschleuniger MAMI, die Forscherinnen und Forscher aus aller Welt anziehen. Die forschungsorientierte Lehre ? die gezielte und frühzeitige Einbindung von Forschungsinhalten in die Curricula ? ist ein weiteres Profilvermerkmal. Als einzige deutsche Universität ihrer Größe vereint die JGU fast alle Institute auf einem innenstadtnahen Campus, der zudem vier Partnerinstitute der außeruniversitären Spitzenforschung beherbergt.

Ebenfalls auf dem Campus angesiedelt sind studentische Wohnheime und Kinderbetreuungseinrichtungen. Die klinischen und klinisch-theoretischen Einrichtungen der Universitätsmedizin liegen nur circa einen Kilometer entfernt. Die JGU versteht sich als "offene Universität" (civic university), als integraler Bestandteil der Gesellschaft, mit der sie eng und vertrauensvoll zusammenarbeitet. Dies umfasst unter anderem das sogenannte lebenslange Lernen sowie den zügigen und umfassenden Wissens- und Technologietransfer. Zu Gutenbergs Zeiten im Jahr 1477 gegründet und nach 150-jähriger Pause 1946 von der damaligen französischen Besatzungsmacht wiedereröffnet, ist die Johannes Gutenberg-Universität Mainz dem Vorbild und dem internationalen Wirkungsanspruch ihres Namensgebers bis heute verpflichtet: innovative Ideen zu fördern und umzusetzen; Wissen zu nutzen, um die Lebensbedingungen der Menschen und deren Zugang zu Bildung und Wissenschaft zu verbessern; sie zu bewegen, die vielfältigen Grenzen zu überschreiten, denen sie täglich begegnen.