

Master-Arbeit: Molekular-Dynamik-Simulationen von Polymerbürsten-Doppelschichten

Polymerbürsten spielen eine wichtige Rolle sowohl in der Natur als auch in technischen Anwendungen. Viele Forschungsergebnisse sprechen dafür, daß Polymerbürsten entscheidend zur Schmierung von Gelenken, zum Verhindern von Anlagerungen in Arterien und generell zur Biolubrikation beitragen. Die Fähigkeit von Polymerbürsten, sehr hohe Normalkräfte tragen zu können, scheint bei vielen dieser Prozesse wichtig zu sein. Unglücklicherweise ist aber die theoretische Beschreibung solcher Normalkräfte uneinheitlich, sodaß verschiedene Vorhersagen, z.B. für das Kraft-Abstandsprofil in sogenannten Polymerbürsten-Doppelschichten (bestehend aus zwei aufeinandergepresste Bürsten), in der Literatur zu finden sind. So sagt eine etablierte Theorie voraus, daß die Normalkraft, F , mit dem Abstand, D , zwischen den Bürsten bei starker Kompression gemäß $F \sim D^{-2}$ skaliert. Demgegenüber steht eine neue, am IPF entwickelte Theorie, nach der $F \sim D^{-3.5}$ gelten sollte. Ebenso sagen die Theorien unterschiedliche Abhängigkeiten der Kräfte von den molekularen Parametern der Bürsten, d.h. Länge der Polymere und Oberflächenbelegungsichte, vorher.

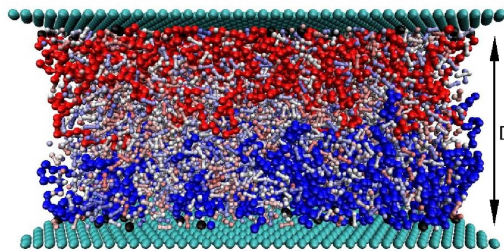


FIG. 1: Momentaufnahme einer Molekular-Dynamik-Simulation einer Polymerbürsten-Doppelschicht mit Wänden (hellblau), oberer (rot) und unterer (blau) Bürste. Weiterhin sind Lösungsmittelmoleküle (kleine Dimere) zu sehen.

Mittels Molekular-Dynamik-Simulationen ist das Kraft-Abstandsprofil für Polymerbürsten-Doppelschichten unter Variation der molekularen Parameter aufzunehmen. Hierbei sollen die gemessenen Daten gegen die bestehenden Theorien getestet werden und gegebenenfalls neue theoretische Ansätze entwickelt werden.

Voraussetzung für die Durchführung des Projekts ist ein Bachelor in Physik, Grundkenntnisse in Molekular-Dynamik-Simulationen und Polymertheorie.

Kontakt: Dr. Kreer, IPF Dresden, kreer@ipfdd.de