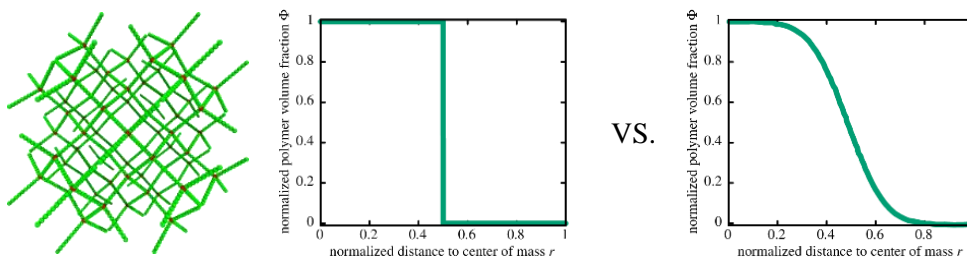


Modellierung und Monte Carlo-Simulation von Mikrogelen

Gesucht. Am Lehrstuhl für Physikalische Chemie II der RWTH Aachen wird ein/e motivierte/r Student/in (Chemiker/in; Physiker/in; Chemieingenieurswesen) für eine Master- oder Bachelorarbeit gesucht, der/die sich mit der Modellierung von Polymernetzwerken und ihrer anschließenden Charakterisierung durch Monte Carlo-Simulationen beschäftigt.

Thematik. Neben Theorie und Experiment nehmen Computersimulationen eine zunehmend wichtige Schlüsselrolle zur Aufklärung struktureller Eigenschaften im Bereich der weichen Materie ein. Sie erlauben die Untersuchung der Eigenschaften von beispielsweise polymeren Systemen, die über ein Experiment nur schwer oder gar nicht zugänglich sind. Auf diese Weise können dem Experiment komplementäre Informationen erhalten werden, die ein fundamentales Verständnis von Wechselwirkungen und Mechanismen auch in komplexen Systemen erlauben. Im Zuge der Master- bzw. Bachelorarbeit sollen Netzwerke mit verschiedenen Topologien (z. B. einer homogenen/inhomogenen Vernetzerdichte) untersucht werden. Das bisherige Modell setzt eine homogene Verteilung des Vernetzers voraus. Auf Grund der unterschiedlichen Reaktionsgeschwindigkeit der Ketten- und Vernetzermoleküle beobachtet man in realen System jedoch meist eine inhomogene Verteilung des Vernetzers. In der Regel nimmt der Vernetzeranteil und damit auch die Polymerdichte mit dem Abstand vom Zentrum des Mikrogels ab.



Normalized polymer fraction versus normalized distance to center of mass of gel particle.

Stieger *et al.*,
J. Chem. Phys., **2004**,
120, 6197.

Anforderungen. Der/die Student/in sollte daher Interesse an makromolekularer Chemie haben und Grundkenntnisse in Polymerphysik besitzen. Weiterhin sollte er/sie bereit sein, sich in statistische Thermodynamik und Programmierung mit Fortran einzuarbeiten. Für Masterstudenten ist zudem ist eine Vertiefung in MES oder COS wünschenswert; erfolgreiche abgeschlossene Forschungspraktika mit „Soft Matter“ Thematik wären vorteilhaft.

Sie lernen:

- Modellierung von Polymersystemen
- Programmierung mit Fortran und Monte Carlo-Simulation
- Umgang mit Linux-Umgebung und Automatisierung von Datenverarbeitung

Möglicher Beginn ab: 01.10.2016
Dauer: 3 Monate (Bachelorarbeit) / 6 Monate (Masterarbeit)
Arbeitsaufwand: hoch

Dozent: Dr. Stefanie Schneider / Prof. Dr. Walter Richtering

Interesse?

Bei Interesse eine E-Mail an Cornelius Hofzumahaus mit Lebenslauf, Zeugnisse/Campusauszug/kurze Beschreibung der vorherigen Bachelor-/Forschungsarbeiten

Ansprechpartner: Cornelius Hofzumahaus
Telefon: 0241 80 98623
E-Mail: hofzumahaus@pc.rwth-aachen.de