

Studien-, Seminar- oder Masterarbeit

zum Thema

Molekular dynamische Simulationen von nanomodifizierten Kompositen

Motivation

Umwelteinflüsse wie Feuchtigkeit spielen eine bedeutende Rolle bei der Anwendung von Faserverbunden. Polymere sind bekannt für die Absorption von Wasser, welche zur Reduktion von den spezifischen Eigenschaften führen kann. Unter anderem sorgen Wassermoleküle im Polymer für eine Plastifizierung der Polymere und beeinflussen immens die mechanischen Eigenschaften der Matrix. Das Quellen ist ein weiteres Problem, welches auch die mechanischen Eigenschaften wie Viskosität ändert und zur hydrostatischen Spannungen führt. Die mit Feuchtigkeit verbundenen Effekte können nicht immer experimentell erschlossen werden. Ein Weg zur Quantifizierung dieser Effekte sind numerische Simulationen auf nanoebene. Molekulardynamische Simulationen werden für die Simulationen auf nanoebene verwendet, um den Einfluss von Wasser zu erfassen. Dadurch lassen sich Parameter wie Diffusionskoeffizient, Elastizitätsmodul, Glasübergangstemperatur etc. berechnen und die experimentelle Versuche deutlich reduzieren.

Welche Eigenschaften des Polymers in der Arbeit studiert werden sollen, wird mit dem Studenten kommuniziert. Dadurch wird der Student bei der Erstellung der Aufgabe involviert.

Ziel

Ziel der hier ausgeschrieben Arbeit ist die Untersuchung und Beschreibung des Einflusses von Wassermolekülen auf Eigenschaften wie Glasübergangstemperatur, Elastizitätsmodul, Viskosität und weiteren Eigenschaften. Für die Berechnung wird das reaktive Kraftfeld (ReaxFF) verwendet, welches uns eine akkurate Beschreibung des Polymers erlaubt. Eine Skalierung auf mikroebene kann mithilfe der Finite Elemente Methode erfolgen, damit auch der Effekt der Nanopartikeln und Fasern berücksichtigt werden kann.

Gliederung

- Literaturrecherche zum Thema Molekulardynamische Simulationen mit reaktiven Kraftfeldern (ReaxFF)
- Entwicklung von Simulationsmodellen auf nanoebene für Molekulardynamische Simulationen
- Untersuchungen der Materialparameter und der Einfluss von Feuchtigkeit auf diese
- Interpretation der Ergebnisse und Validierung
- Effekt der Nanopartikeln auf die Materialparameter (ggf. Untersuchung mithilfe der Finite Elemente Methode)

Kontakt

Betim Bahtiri, M.Sc.
Institut für Statik und Dynamik
Appelstr. 9A
30167 Hannover
E-Mail: b.bahtiri@isd.uni-hannover.de

