

Masterarbeit:

Simulationen zur Untersuchung der Flexibilität von organischen Molekülen auf der Oberfläche von geschichteten Kristallen.

Das zu untersuchende Material hat in vielerlei Hinsicht sehr interessante und vielversprechende Eigenschaften. Es handelt sich um Kristalle, die aus einer Schichtstruktur bestehen. Eine anorganischen Schicht, welche zweidimensional wächst, ist jeweils über Ionenbindungen beidseitig mit organischen Schichten bedeckt. Somit ist die Oberfläche immer mit einer solchen organischen Lage überdeckt und hat durch die Wahl der Moleküle Ähnlichkeiten mit Graphen, besteht aber im Gegensatz dazu aus Benzol-Ringen, die der Oberfläche eine Struktur verleihen.

Reibungsmessungen auf atomarer Skala weisen darauf hin, dass eine Reibungs-Anisotropie auf molekularer Ebene vorliegt. Um solche Effekte auf molekularen und atomaren Skalen besser zu charakterisieren, bieten sich atomistische Simulationen an. Solche Untersuchungen erlauben es, elektronische und sterische Effekte separat zu behandeln und im Idealfall sogar zu quantifizieren. Diese Information ist zentral, wenn man Oberflächen mit bestimmten Eigenschaften herstellen möchte. Dazu ist ein Verständnis der zwischenmolekularen Wechselwirkungen unerlässlich.

Diese Masterarbeit wird in enger Zusammenarbeit mit experimentellen Untersuchungen durchgeführt und sollte dazu beitragen, fundamentale Aspekte von Reibung auf atomaren und molekularen Längenskalen besser zu verstehen.

Betreuung: Prof. M. Meuwly und Prof. E. Meyer