



Curriculum Vitae

1980 Abitur am Gymnasium Dingolfing

1986 Diplom an der Universität Regensburg

„Eigenschaften von Mischungen aus protoniertem und deuteriertem Polyethylen“

1987 Sechsmontatige Tätigkeit am MPI für Polymerforschung bei Prof. Dr. E.W. Fischer

1990 Promotion an der Universität Regensburg bei Prof. Dr. D. Göritz

„Das KS-Modell der inhomogenen Deformation am Beispiel der Crazebildung“

1990 wissenschaftlicher Assistent Universität Regensburg

1994 Auslandsaufenthalt an der University of Tennessee Knoxville und am Oak Ridge National Laboratory (USA) bei Prof. Dr. B. Wunderlich als Feodor Lynen Stipendiat der Alexander von Humboldt-Stiftung

1997 Habilitation und Ernennung zum Privatdozenten

„Die Rolle von Energie und Entropie für die Konformation einer polymeren Kette“

1997 wissenschaftlicher Oberassistent Universität Regensburg

2000 Anstellung als Erfinderberater/Schutzrechtmanager der Universität Regensburg

2004 Verleihung des Titels außerplanmäßiger Professor

Ehemaliges Forschungsgebiet - Computersimulationen

Einleitendes

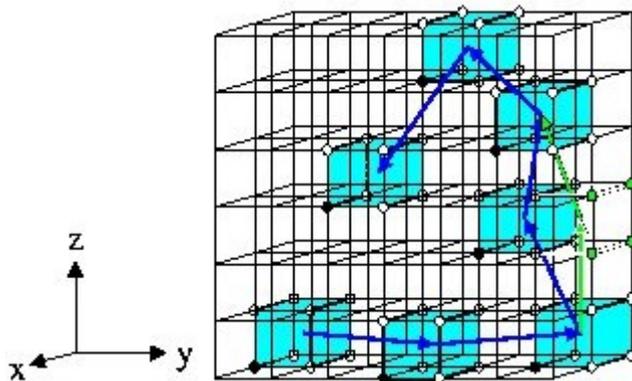
Um die Eigenschaften von Polymeren auf die mikroskopischen Eigenschaften zurückzuführen, sind experimentell große Anstrengungen notwendig. Da bieten sich Computersimulationen an, um in Modellsystemen einfach "nachschaun" zu können.

Die Objekte der Untersuchungen waren polymere Einzelkettensysteme, Brushes, polymere Netzwerke und Gläser und Kristalle. Dabei wurde insbesondere das Deformationsverhalten untersucht. Die dabei variierten Parameter waren u.a. Temperatur, Kettenlänge und Wechselwirkungsstärke. Einige erzielte Ergebnisse umfassen den Kollapsübergang, die inhomogene Deformation von Einzelketten, die Struktur von Gläsern mit van-der-Waals Wechselwirkung. Aber auch die Adsorption von Ketten an rauen Oberflächen zeigte interessante Phänomene.

Mehrere verschiedene Verfahren waren dazu im Einsatz, z.B. die Monte-Carlo Simulation mit Hilfe des Bond-Fluktuations-Algorithmus oder Molekulardynamik-Methoden.

Die Monte-Carlo-Methode

Die meisten Simulationen wurden mit dem Bond-Fluktuations-Algorithmus, einer Gitter

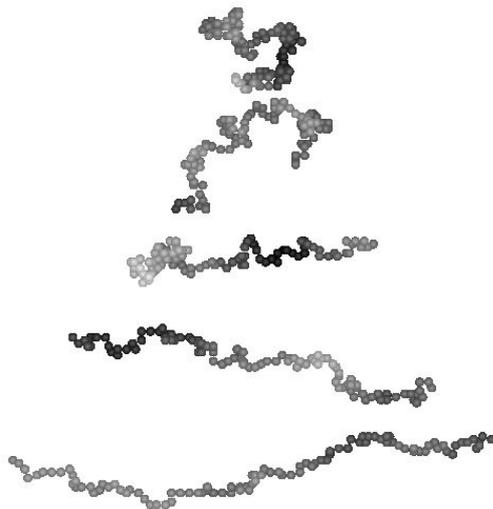


Monte-Carlo-Methode (siehe Bild), durchgeführt. Um dies zu realisieren, werden mehrere Monomere zu effektiven Monomeren, den Würfeln auf dem Gitter, zusammengefasst. Diese starke Abstraktion ist sinnvoll, so lange Skalengesetze beziehungsweise generalisierbare Probleme analysiert werden sollen. Die Bindungen fluktuieren in ihren Längen unter Einhaltung bestimmter Nebenbedingungen. Insgesamt führt dies zu einer hohen Performanz dieses Algorithmus. Einige

Beispiele der untersuchten Themen seien hier erwähnt. Eine Richtung ist die Bestimmung von Einzelketteneigenschaften.

Deformation von Einzelketten

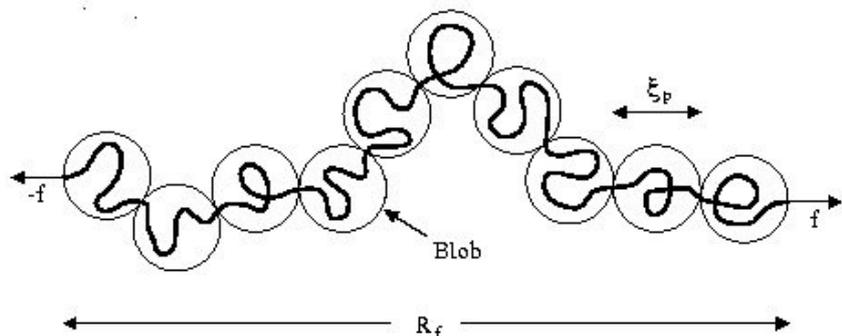
Eine polymere Kette kann unter Vernachlässigung aller Wechselwirkungen mit einem



Zufallspfad (Random Walk RW) beschrieben werden, der sich aufgrund der allein wirkenden Entropie ergibt. Dies ist der ideale Fall. Aber, auch wenn keine energetischen Wechselwirkungen auftreten, muss eine Einzelkette trotzdem der Eigenschaft der Selbstvermeidung gehorchen. Selbstvermeidung bedeutet in diesem Zusammenhang einfach, dass zwei Monomere nicht am gleichen Platz sein können und Bindungen sich nicht durchschneiden können. Die allein wirkende Entropie bewirkt in diesem Falle, dass die polymere Kette eine gequollene Knäuelgestalt annimmt [16,22,23]. Man bezeichnet dies als einen Self-Avoiding-Walk (SAW). Verstreckt man diese Kette, siehe Abbildung nebenan, indem man an den Enden

mit der Kraft f anzieht, so konnte Pincus zeigen, dass eine sinnvolle Beschreibung mit einem sogenannten Blobmodell möglich ist. Der wesentliche Parameter ist hierbei das Verhältnis

von äußerer Kraft/Energie zur Wärmemenge kT . Ist die Wärme, die ja ein Maß der Entropie ist, sehr viel größer als die Kraft, so ist die Kraft nur eine kleine Störung. Im umgekehrten Fall dominiert die Kraft das Verhalten der Kette. Die Kraft fällt über die ganze Kette ab, d.h. der

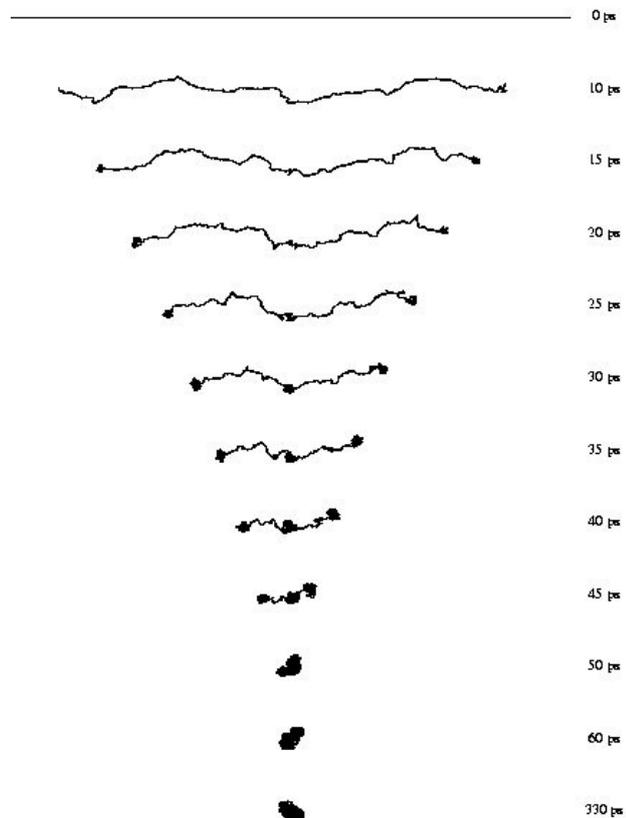


Kraftanteil pro Kettensegment hängt von der Länge des Kettensegments ab. Man kann also

in der Kette Bereiche bestimmter Ausdehnung, sogenannte Blobs, unterscheiden, in denen grob gesagt, einmal die Entropie gewinnt, und im anderen Fall die energetische Wechselwirkung dominiert [6].

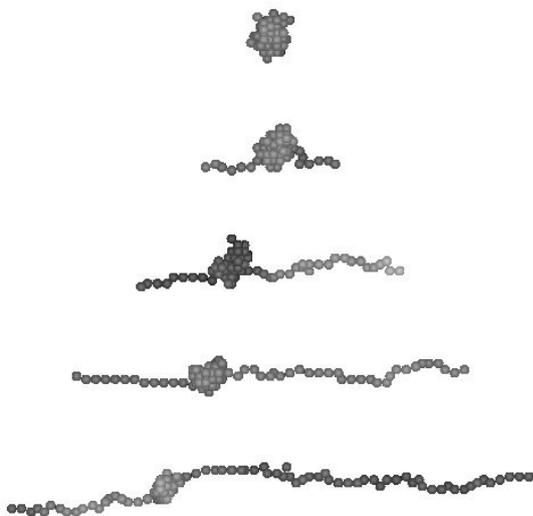
Kollapsübergang

Bezieht man energetische Wechselwirkungen mit ein, so ändert sich der Knäuelzustand. Eine attraktive Wechselwirkung, z.B. eine van der Waals Kraft zwischen den Monomeren führt zu einem Kollaps der Kette, wenn die Temperatur genügend niedrig ist. Die Abbildung zeigt das Ergebnis einer Molekuldynamik-Simulation [33]. Bei einer Molekuldynamik-Simulation werden mit numerischen Integrationsmethoden die Bewegung von Objekten aufgrund der Newtonschen Gleichungen in der Zeit weitergetrieben. Wie man hier sehr schön sieht, fällt eine gestreckte Ausgangskette im Laufe der Zeit zu einem kollabierten Knäuel, einem Globul, zusammen. Auch mit Monte-Carlo-Simulationen lässt sich der Kollapsübergang untersuchen [17].



Deformation von wechselwirkenden Einzelketten

Nachdem das Verhalten von Einzelketten ohne energetische Wechselwirkung unter Deformation sowohl simulationstechnisch als auch vom theoretischen Standpunkt mittlerweile gut verstanden ist, kann die Einbeziehung der Wechselwirkung bei der Deformation untersucht werden. Es zeigt sich, siehe nebenstehende Abbildung, dass eine Globul-Strang Bildung stattfindet. Es ist günstiger, einen relativ hochorientierten Strang und ein Restglobul auszubilden anstatt eine affine Deformation des gesamten Globuls durchzuführen, wie im Falle ohne Wechselwirkungen [4, 15, 18, 19, 36]. Eine Bemerkung am Rande: Die Untersuchungen sind auch im Hinblick auf die Proteinfaltung von Interesse. Auf einer fundamentalen Ebene stellen Proteine auch Ketten dar, die sich in einem ungünstigen Medium quasi in die kollabierte Form zusammenziehen.



Veröffentlichungen

- 1.** D. Göritz, J. Kemmerer, S. Kreitmeier, R. Rosbacher
Annealing effects in high modulus polyethylene
Coll. & Poly. Sci., **261**, (1983), 631
- 2.** S. Kreitmeier, D. Göritz
Network properties of mixtures of protonated and deuterated polyethylene
Coll. & Poly. Sci., **266**, (1988), 235
- 3.** S. Kreitmeier, D. Göritz
A new model of inhomogeneous deformation used for craze formation
Makromol. Chem., Macromol. Symp., **41**, (1991), 253
- 4.** S. Kreitmeier, M. Wittkop, D. Göritz
Computer simulation of coil deformation
J. Comp. Phys., **112**, (1994), 267
- 5.** W. Niedermeier, J. Stierstorfer, S. Kreitmeier, O. Metz, D. Göritz
Morphological investigations on carbon black particles by atomic force microscopy
Rubber Chem. & Techn., **67**, (1994), 148
- 6.** M. Wittkop, J.U. Sommer, S. Kreitmeier, D. Göritz
Monte Carlo simulations of a single polymer chain under an external force in two and three dimensions
Phys. Rev. E, **49**, (1994), 5472
- 7.** W. Niedermeier, H. Raab, J. Stierstorfer, S. Kreitmeier, D. Göritz
The microstructure of carbon black investigated by atomic force microscopy
Kautschuk Gummi Kunststoffe, **47**, (1994), 799
- 8.** S. N. Kreitmeier, G. L. Liang, D. W. Noid, B. Wunderlich
Molecular dynamics simulations of macroscopic vibrations on cooling of superheated polyethylene crystals
Polymer International, **36**, (1995), 155
- 9.** S. Kreitmeier, M. Wittkop, D. Göritz
Computer simulations of energetic and conformational changes in polymer systems
Makromol. Chem.: Macromol. Symp., **100**, (1995), 181
- 10.** S. N. Kreitmeier, G. L. Liang, D. W. Noid, B. Wunderlich
Molecular dynamics simulations of the temperature dependence of lattice parameters of paraffin crystals during cooling
J. Chem. Soc. Faraday Trans., **91**, (1995), 2601
- 11.** M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
On the deformation of hard elastic polymers - applicability of the coil-strand transition model
Acta Polymerica, **46**, (1995), 319
- 12.** W. Niedermeier, H. Raab, P. Maier, S. Kreitmeier, D. Göritz
Using lateral force and force modulation to image filled elastomers
Kautschuk Gummi Kunststoffe, **48**, (1995), 611

- 13.** B. Wunderlich, S. N. Kreitmeier
Defects in polymer crystals
MRS Bulletin, **20** (1995), 17
- 14.** S. Kreitmeier, M. Wittkop, T. Wagner, D. Göritz, R. Zietz
Investigations of hard elastic polypropylene with respect to the coil-strand transition model
Coll. & Polym. Sci., **273**, (1995), 1008
- 15.** M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
Monte Carlo Simulations of a single polymer chain under extension above and below the Theta-temperature
Phys. Rev. E, **53**, (1996), 838
- 16.** M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
The distribution function of a single polymer chain with excluded volume in two and three dimensions: A Monte Carlo study
J. Chem. Phys., **104**, (1996), 351
- 17.** M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
The collapse transition of a single polymer chain in two and three dimensions: A Monte Carlo study
J. Chem. Phys., **104**, (1996), 3373
- 18.** M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
Deformation of a single polymer chain in two dimensions above and below the Theta-temperature: A Monte Carlo study
Comput. Polymer Sci., **5**, (1995), 187
- 19.** M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
Computer simulations on energetic and entropic changes of a single chain under extension
J. Chem. Soc. Faraday Trans., **92**, (1996), 1375
- 20.** S.N. Kreitmeier, D. W. Noid, B.G. Sumpter
Quantum-Monte-Carlo simulations on linear chains
Macromol. Theory Simul., **5**, (1996), 365
- 21.** S. N. Kreitmeier, G. L. Liang, D. W. Noid, B. G. Sumpter
Thermal analysis via molecular dynamics simulation
J. Therm. Anal., **46**, (1996), 853
- 22.** M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
Swelling of subchains with excluded volume in two and three dimensions: A Monte Carlo study
Macromolecules, **29**, (1996), 4754
- 23.** M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
Monte Carlo simulations of the dynamics of single polymer chains above and below the Theta-temperature
Comput. & Theo. Polymer Sci., **6**, (1996), 41
- 24.** M. Wittkop, T. Hölzl, S. Kreitmeier, D. Göritz
A Monte Carlo study of the glass transition in three dimensional polymer melts
J. Non-Cryst. Solids, **201**, (1996), 199
- 25.** B. Wunderlich, A. Boller, I. Okazaki, S. Kreitmeier
Linearity, steady state, and complex heat capacity in modulated differential scanning calorimetry
Thermochimica Acta, **282/283**, (1996), 143

- 26.** D. Göritz, S. Kreitmeier, M. Wittkop
Micromechanism of the deformation process of macromolecular systems,
J. Macromol. Sci.-Phys., **B35**, (1996), 615
- 27.** B. Wunderlich, A. Boller, I. Okazaki, S. Kreitmeier
Modulated differential scanning calorimetry in the glass transition region, II
J. Therm. Anal., **47**, (1996), 1013
- 28.** W. Gottstein, S. Kreitmeier, M. Wittkop, D. Göritz, F. Gotsis
Monte Carlo simulations of a single polymer chain on rough surfaces Polymer, **38**, (1997), 1607
- 29.** Th. Hölzl, M. Wittkop, S. Kreitmeier, D. Göritz
Uniaxial deformation of bridging polymer systems: A Monte Carlo study
J. Chem. Phys., **106**, (1997), 7792
- 30.** S. Kreitmeier, M. Wittkop, H. L. Trautenberg, T. Hölzl, D. Göritz
Large-scale simulations on polymer melts
J. Comput. Phys., **133**, (1997), 181
- 31.** Th. Hölzl, M. Wittkop, S. Kreitmeier, H.-L. Trautenberg, D. Göritz
Structural aspects of the glass transition in three-dimensional polymer melts
J. Chem. Soc. Faraday Trans., **93**, (1997), 2185
- 32.** Ch. Hagn, M. Wittkop, S. Kreitmeier, H.-L. Trautenberg, Th. Hölzl, D. Göritz
The creation and spatial structure of end-linked bimodal polymer networks: A Monte-Carlo study
Polym. Gels & Network, **5**, (1997), 327
- 33.** A. Michel, S. Kreitmeier
Molecular dynamics simulation of the collapse transition of a single polymer chain
Comput. & Theo. Polymer Sci, **7**, (1998), 113
- 34.** W. Michalke, S. Kreitmeier
Quantum-Monte-Carlo simulations of polyethylene
European Phys. J. B, **4**, (1998), 469
- 35.** J. Fröhlich, S. Kreitmeier, D. Göritz
Surface characterization of carbon blacks
Kautschuk Gummi Kunststoffe, **51**, (1998), 370
- 36.** S. Kreitmeier, M. Wittkop, D. Göritz
Computer simulations on the cyclic deformation of a single chain above and below the Theta-temperature
Phys. Rev. E, **59**, (1999), 1982
- 37.** Th. Hölzl, C. Mesner, M. Wittkop, S. Kreitmeier, S. Kain, D. Göritz
Monte Carlo studies on the deformation behaviour of glassy model systems Comput. & Theo. Polym. Sci., **9**, (1999), 99
- 38.** A. Michel, S. Kreitmeier, B. Wunderlich
Molecular dynamics simulations of the adsorption of single chains on surfaces
Springer Proceedings in Physics, **85**, (2000), 228

39. S. Kreitmeier

Equilibrium and non-equilibrium effects of a single polymer chain during cyclic deformation: A Monte Carlo study

J. Chem. Phys., **112**, (2000), 6925

40. R. Androsch, I. Moon, S. Kreitmeier, B. Wunderlich

Determination of heat capacity with a sawtooth-type, power compensated temperature-modulated DSC

Thermochim. Acta, **357-358**, (2000), 267

41. Th. Lanzl, J. Ludwig, S. Kreitmeier, D. Göritz

A modified method in dielectric research of carbon black rubber compounds

Kautschuk Gummi Kunststoffe, **53**, (2000), 638

42. S. Kreitmeier, J. Böhm, D. Göritz

Towards a new material law for elastomers: Part I

Kautschuk Gummi Kunststoffe, **53**, (2000), 716

43. M. Lang, W. Michalke, S. Kreitmeier

Optimized decomposition of simulated polymer networks into meshes

Macromol. Theo. Simul., **10**, (2001), 204

44. M. Lang, W. Michalke, S. Kreitmeier

A statistical model for the length distribution of meshes in a polymer network

J. Chem. Phys., **114**, (2001), 7627

45. W. Michalke, M. Lang, S. Kreitmeier, D. Göritz

Simulations on the number of entanglements of a polymer network using knot theory

Phys. Rev. E, **64**, (2001), 012801

46. W. Michalke, S. Kreitmeier, M. Lang, A. Buchner, D. Göritz

Monte-Carlo simulations of end-linked bimodal polymer networks: part II

Comput. & Theo. Polym. Sci., **11**, (2001), 459

47. A. Michel, S. Kreitmeier

Adsorption of a single polymer chain on a surface: a molecular dynamics simulation

J. Polym. Sci. B: Polym. Phys., **39**, (2001), 2333

48. A. Michel, D. Göritz, S. Kreitmeier

Molecular Dynamics simulation study - Localization and multi-flip effects in a single polymer chain on a surface"

Kautschuk Gummi Kunststoffe, **55**, (2002), 447

49. M. Wacha, S. Kreitmeier

Monte Carlo studies on the deformation behavior of entangled polymer chains"

Macromol. Theo. Simul. **11**, (2002), 438

50. W. Michalke, M. Lang, S. Kreitmeier, D. Göritz

Comparison of topological properties between end-linked and statistically cross-linked polymer networks

J. Chem. Phys. **117**, (2002), 6300

51. M. Lang, W. Michalke, S. Kreitmeier

Analysis of trapped entanglements in polymer networks

J. Comput. Phys., **185**, (2003), 549

- 52.** M. Lang, D. Göritz, S. Kreitmeier
Length of subchains and chain ends in cross-linked polymer networks
Macromolecules, **36**, (2003), 4464
- 53.** M. Lang, D. Göritz, S. Kreitmeier
The effect of spatially inhomogeneous mixing of polymer and cross-links for end-linked polymer networks
in Constitutive Models for Rubber III, Busfeld & Muhr (eds), Swets & Zeitlinger, Lisse, (2003), 195
- 54.** M. Lang, M. Malinowski, D. Göntner, S. Kreitmeier, D. Göritz
Computer simulation of structure and conductivity in carbon black filled elastomers
in Filler Reinforcement of Rubbers (IOM Communications, 1 Carlton House Terrace, London, 2004)
- 55.** M. Lang, W. Michalke, S. Kreitmeier, D. Göritz
Entanglements in Polymer Networks
Kautschuk Gummi Kunststoffe, **58**(2005), 179
- 56.** M. Lang, D. Göritz, S. Kreitmeier
Intra-Molecular Reactions in End-Linked Polymer Networks and Linear (Co)Polymerizations
Macromolecules, **38**, (2005), 2515