

Diese Diplomarbeit befasst sich mit einem aktuellen Problem aus der Dünnschichtpolymerphysik. Verschiedenste Experimente sind durchgeführt worden, um dünne Polymerfilme zu charakterisieren. Diese Experimente liefern allerdings gänzlich verschiedene Aussagen über die Polymer-Konformation, -Topologie und Viskosität in den Filmen. Ein Grund dafür könnte im Herstellungsprozess liegen. Die meisten Filme werden mit der „*spin coating*“ Methode hergestellt, die die Polymere im Film in einem Nichtgleichgewichtszustand einfriert. Die Filme müssen erst wieder erwärmt werden, damit die Polymere relaxieren und ihren Gleichgewichtszustand finden können.

Obwohl einige Experimente durchgeführt wurden, um die Relaxation der Filme zu beobachten, gibt es unseres Wissens keine Simulationsarbeit, die sich mit dem Thema befasst.

Gegenstand der Arbeit war es, ein Modell aufzustellen, das Filme in einem Zustand herstellt, der vergleichbar ist mit dem Zustand direkt nach dem *spin coating*. Weiter sollte analysiert werden, wie die Polymere relaxieren und welche Observablen den Relaxationsprozess beschreiben. Besonderer Wert wurde auf die Konformation und die Verhakungen (*entanglements*) gelegt, da diese auch die dynamischen Eigenschaften des Polymerfilms beeinflussen. Die Ergebnisse wurden mit denen von Experimenten verglichen und die folgenden Schlussfolgerungen gezogen: Es konnte eine zusätzliche Erklärung für die von Neutronenstreuern gemessene Schwellung der Polymerknäuel geliefert werden. Außerdem konnte die Annahme, dass die unrelaxierten Filme weniger Verhakungen aufweisen als die relaxierten, bestätigt werden. Modelle die ein anderes Verhalten voraussagen, konnten entschärft werden. Vor allem konnte gezeigt werden, dass die Relaxationszeiten der Konformation und der Topologie identisch sind. Das heißt sobald ein Polymer die Gleichgewichtskonformation erreicht hat, befindet es sich auch in der Gleichgewichtstopologie.