

# Detect the nonlinear effect – MD-Simulation zur Vorhersage von nichtlinearen Effekten in Raman-Spektren

## Forschungsschwerpunkt

Thermodynamik, Messtechnik, Verfahrenstechnik

## Unser Profil

Der Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) der RWTH Aachen unter Leitung von Prof. Dr.-Ing. André Bardow beschäftigt sich in der Energie- und Verfahrenstechnik mit dem „thermodynamischen Aufzug“: vom Molekül bis zum Prozess.

Die Messsystemtechnik-Gruppe am LTT ist ein interdisziplinäres Team junger Wissenschaftler, die experimentell und theoretisch arbeiten. Wir beschäftigen uns mit der Entwicklung nicht-invasiver, orts- und zeitaufgelöster Messmethoden sowie mit der modellgestützten, experimentellen Ermittlung von Stoffdaten.

Die Gruppe der Molekularen Thermodynamik am LTT erklärt und beschreibt das Materialverhalten fluider und fester Stoffe in Abhängigkeit vom molekularen Aufbau der Materie.

## Hintergrund

Die Raman-Spektroskopie bietet die Möglichkeit einer schnellen und nicht-invasiven Konzentrationsbestimmung.

Für die Auswertung von Raman-Spektren können statistisch basierte oder modellgestützte Methoden verwendet werden. So können die Raman-Spektren als Summe von Peakfunktionen dargestellt werden. Starke intermolekulare Wechselwirkungen können nichtlineare Effekte wie beispielsweise Peakverschiebungen oder –verbreiterungen hervorrufen. Durch die Freigabe der entsprechenden Parameter in den Funktionen der betroffenen Peaks können solche nichtlinearen Effekte berücksichtigt werden, um weiterhin eine korrekte Konzentrationsbestimmung zu gewährleisten. Die sich verändernden Peaks müssen bisher in einem aufwändigen iterativen Verfahren mit Hilfe von Kalibrationspektren identifiziert werden.

## Aufgabenstellung

Das Ziel dieser Arbeit ist es, Schwingungsspektren von Einzelmolekülen und Clustern quantenmechanisch zu berechnen. Das erste System besteht aus Wasser und Methanol. Die berechneten Frequenzverschiebungen sollen anschließend mit gemessenen Raman-Spektren korreliert werden. Im Falle einer Masterarbeit werden in einem zweiten Schritt komplexere Stoffsysteme untersucht und bei Bedarf aufwendigere Methoden eingesetzt, wie z. B. ab initio Molekulardynamik.

## Dein Profil

Du studierst Maschinenbau, CES, Chemie, Physik oder einen vergleichbaren Studiengang. Du hast Spaß daran dich in neue Themengebiete einzuarbeiten und hast idealerweise Vorkenntnisse im Bereich der molekularen Thermodynamik.

## Unser Angebot

Du arbeitest in einem jungen, motivierten Team an einem spannenden Thema. Zudem bekommst du Einblick in zwei verschiedene Forschungsgruppen am LTT. Wenn Du Interesse hast, melde dich oder komm vorbei.

