

Stellentyp: Masterarbeit

Ausschreibungsdatum: ab 10.10.2018

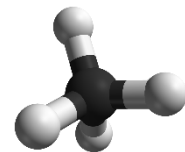
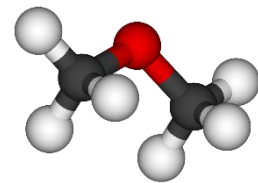
Quantenmechanische Berechnung thermodynamischer Eigenschaften verzweigter Moleküle

Unser Profil:

In der Arbeitsgruppe „Modellbasierte Kraftstoffentwicklung“ am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik werden quantenmechanische Methoden verwendet, um Kraftstoffeigenschaften vorherzusagen. Diese Berechnungen werden mit Kooperationspartnern im Exzellenzcluster „Maßgeschneiderte Kraftstoffe aus Biomasse“ (TMFB) eingesetzt, um nachhaltige Biokraftstoffe zu designen.

Deine Aufgaben:

Momentan entwickeln wir einen neuartigen Ansatz zur Beschreibung molekularer Bewegungen für die genauere Berechnung der thermodynamischen und chemischen Moleküleigenschaften. Das verwendete Schema ist bereits auf zahlreiche Formen von Molekülen anwendbar, muss jedoch noch auf bestimmte Verzweigungen (die vor allem in kleinen Molekülen auftreten) erweitert werden. Im Rahmen dieser Masterarbeit beschäftigst du dich mit einem mitbewegten Koordinatensystem, der dazugehörigen Jacobimatrix und implementierst eine Verzweigung. Damit berechnest du thermodynamische Eigenschaften von Methan und Dimethylether (DME).



Unser Angebot:

Schreibe deine Masterarbeit mit exzellenter Betreuung in einem motivierten Team. Du bekommst einen Einblick in wissenschaftliche Arbeitsweisen und vertiefst deine Kenntnisse in Programmieren und Verbrennungschemie. Es besteht außerdem die Möglichkeit einer Publikation.

Dein Profil:

Idealerweise hast du Interesse an Chemie und Programmierung (Python) und hast in HöMa gut aufgepasst. Dann möchten wir dich näher kennenlernen!

Schreib uns einfach eine Mail an folgende Adresse:

Laura.malsch@lth.rwth-aachen.de