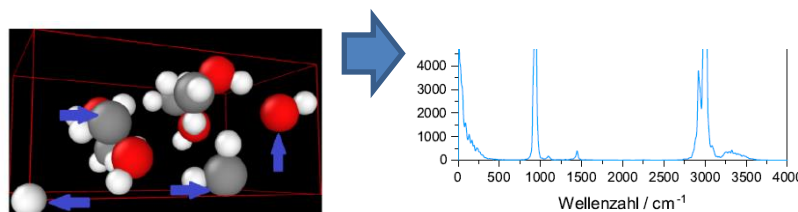


Simulation von Raman-Spektren via ab-initio Molekulardynamik

Forschungsschwerpunkt

Thermodynamik, Messtechnik, Verfahrenstechnik

Unser Profil



Der Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) der RWTH Aachen beschäftigt sich in der Energie- und Verfahrenstechnik mit dem „thermodynamischen Aufzug“: vom Molekül bis zum Prozess.

Die Messsystemtechnik-Gruppe am LTT beschäftigt sich 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 ihres molekularen Aufbaus.

Hintergrund

Die Raman-Spektroskopie bietet die Möglichkeit einer schnellen und nicht-invasiven Konzentrationsbestimmung. Um aus den Spektren die Konzentrationen der zugehörigen Mischungen zu bestimmen, kann Indirect Hard Modeling (IHM) verwendet werden. IHM modelliert Reinstoffspektren mit mathematischen Peakfunktionen und überlagert diese gemäß der Zusammensetzung zu den Mischungsspektren. In komplexen Systemen kommt es in den Gemischspektren häufig zu nichtlinearen Effekten wie beispielsweise Peakverschiebungen. Die Parametrisierung der Modelle in IHM erlaubt es, diese Effekte zu berücksichtigen.

Stoffsysteme, in denen einzelne Komponenten nicht als Reinstoff vermessen werden können, stellen für die Spektrenauswertung eine besondere Herausforderung dar. Um die Zusammensetzung in solchen Stoffsystemen bestimmen zu können, sollen mit Hilfe von ab-initio Molekulardynamik die nicht verfügbaren Reinstoffspektren simuliert werden, um diese anschließend für die Spektrenauswertung mit IHM nutzen zu können. Zusätzlich sollen Gemischspektren simuliert werden, um nichtlineare Effekte wie Peakverschiebungen in den Spektren vorhersagen zu können und in IHM zu berücksichtigen.

Aufgabenstellung

Das Ziel dieser Arbeit ist es, mit einer ab-initio Molekulardynamik-Simulation Raman-Spektren für ein einfaches Stoffsystem zu berechnen. Diese Ergebnisse sollen anschließend benutzt werden, um vorhandene experimentelle Spektren auszuwerten.

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. Da es sich um eine theoretische Arbeit handelt, ist es möglich, die Aufgaben komplett von zu Hause aus zu bearbeiten, mit einer engen Betreuung via Online-Meetings. Wenn Du Interesse hast, melde dich.