

## Bachelor- oder Masterarbeit

**Thema:** Molekulardynamische Simulationen zur Untersuchung von Phasengleichgewichten in Mischungen aus Modellfluiden

**Betreuer:** Dipl.-Ing. Joshua Marx

Universität Innsbruck  
Telefon: +43 512 507 55204  
E-Mail: joshua.marx@uibk.ac.at

**Beschreibung:** Phasengleichgewichtsdaten von Mischungen einfacher Modellfluide können dabei helfen, den Einfluss molekularer Wechselwirkungen auf das Phasenverhalten zu verstehen und sind für die Entwicklung theoretischer Werkzeuge zur Beschreibung des Phasenverhaltens von Mischungen essenziell. Phasengleichgewichte zwischen mehreren flüssigen Phasen stellen für die molekulare Simulation eine Herausforderung dar, weil Monte-Carlo Methoden, die auf der Berechnung des chemischen Potentials durch das Einsetzen von Molekülen in der Simulationsbox beruhen, in dichten Phasen versagen.

Deshalb sollen im Rahmen dieser Arbeit Phasengleichgewichte von einfachen Modellfluiden mit mehreren flüssigen Phasen (flüssig-flüssig und dampf-flüssig-flüssig) mit direkten molekulardynamischen Simulationen bestimmt werden. In einer kurzen Literaturrecherche sollen zunächst geeignete Methoden ausgewählt werden. Anschließend sollen Simulationen mit einem bestehenden Simulationscode durchgeführt und ausgewertet werden, um diese mit Literaturdaten zu vergleichen und eine robuste Methodik zur Bestimmung von entsprechenden Phasengleichgewichte mit direkten Simulationen aufzustellen. Schließlich soll diese Methodik genutzt werden, um Phasengleichgewichte ausgewählter neuer Mischungen zu bestimmen.

**Vorkenntnisse:** Sie sollten Interesse an Thermodynamik, thermischer Verfahrenstechnik, Modellierung und Simulation haben. Vorzugsweise sollten Sie über grundlegende Programmierkenntnisse verfügen. Für eine gute Einarbeitung wird gesorgt.

**Beginn:** ab sofort / nach Absprache

