|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| KIT-Campus Nord | ITES | Postfach 3040 | 76021 Karlsruhe | **Institut für Thermische Energietechnik  und Sicherheit (ITES)**  Leiter/in: Prof. Dr. D. Banuti  Wiss. Betreuung:  Prof. Dr. D. Banuti  Hermann-von-Helmholtz-Platz 1  76344 Eggenstein-Leopoldshafen  Telefon: 0721 6082-3451  E-Mail: secretary@ites.kit.edu  Web: https://ites.kit.edu |
| **Masterarbeit**  **Molekulardynamiksimulationen von**  **Hochdruckflüssigkeiten**  **(numerisch / theoretisch)** |

Im Streben nach mehr Effizienz sind die Betriebsdrücke in Kraftwerken, Strahltriebwerken, Verbrennungsmotoren und organischen Rankine-Kreisläufen im Laufe der Jahrzehnte gestiegen. Häufig werden bei diesen Prozessen überkritische Drücke erreicht, was zu einem Flüssigkeitsverhalten führt, das dramatisch von den bekannten idealen Gasen oder Flüssigkeiten mit konstanter Dichte abweicht und in den letzten Jahren noch einige spannende neue Erkenntnisse bietet.

Ziel dieser Arbeit ist es, mit Hilfe von Molekulardynamiksimulationen unser Verständnis für das Verhalten überkritischer Fluide zu verbessern, indem molekulare Wechselwirkungen und Gruppenverhalten untersucht werden.

Die Arbeit erfordert

- Kenntnisse in Thermodynamik / Wärmeübertragung / numerischen Methoden

- idealerweise Erfahrung mit numerischen Simulationen

- Erfahrung oder Interesse und Bereitschaft, Python/Jupyter-Notebooks für die Datenanalyse und Simulationen unter Verwendung des Open-Source-Molekulardynamik-Lösers LAMMPS zu erlernen.

Die Arbeit wird insbesondere Folgendes umfassen

- Literaturrecherche zur molekularen Struktur überkritischer Flüssigkeiten

- LAMMPS-Simulationen des Flüssigkeitsverhaltens unter verschiedenen Randbedingungen

- Analyse der Ergebnisse

- Dokumentation und Verbreitung der Ergebnisse (Dissertation, Präsentation, eventuell Aufsatz)).

Kontakt:

Prof. Dr.-Ing. Daniel Banuti,

email: [banuti@kit.edu](mailto:banuti@kit.edu);

ITES, Karlsruher Institut für Technologie, Campus Nord

76021 Karlsruhe