



## Studienarbeit

für Herr/Frau cand. M. Sc XXXXXXXX  
Matrikelnummer: XXXXXXXX

### Molekulardynamische Simulationen zum Löslichkeitsverhalten von Aktivmaterialien für Redox-Flow-Batterien

Die Suche nach kostengünstigen stationären Energiespeichersystemen ist wichtiger denn je und kann zum Beispiel durch die Redox-Flow-Batterie (RFB) realisiert werden. Die offene Zellarchitektur der Redox-Flow-Batterie, die den Ort der elektrochemischen Reaktion von der Speicherung der Energie entkoppelt, ermöglicht eine unabhängige, sehr flexible Skalierung von Batteriekapazität und Batterieleistung. Organische Aktivmaterialien, die gleichzeitig kostengünstig herstellbar sind und potentiell aus nachwachsenden Rohstoffen gewonnen werden, könnten die Gesamtkosten drastisch senken. Daher sollen Kandidaten für organische Aktivmaterialien wie beispielsweise 4-OH-TEMPO und Phenazin-COOH untersucht werden.

In der Arbeitsgruppe „Molekulare Thermodynamik“ am Institut für Thermodynamik wurde bereits mit Hilfe molekularer Simulationsmethoden das Löslichkeitsverhalten von pharmakologischen Substanzen in unterschiedlichen Lösungsmitteln untersucht. Dabei wurden mit dem Pathfinder ein Algorithmus für effiziente Löslichkeitssimulationen für die Vorhersagen der freien Solvatisierungsenthalpie  $\Delta G_{\text{Solv}}$  entwickelt. Die Auswahl eines geeigneten molekularen Modells entscheidet über die Genauigkeit der Simulationsergebnisse zum Löslichkeitsvorhersagen.

Im Rahmen dieser Studienarbeit sollen diese Methodiken zur simulativen Bestimmung der Löslichkeiten von organischen Aktivmaterialien angewendet und bewertet werden. Die Studienarbeit umfasst die Durchführung von molekularen Simulationen im Vergleich von unterschiedlichen molekularen Modellen (z.B. GAFF2/RESP und GAFF/ IPolQ-Mod+LJ-fit) zur Ermittlung von  $\Delta G_{\text{Solv}}$  in den Lösungsmitteln Wasser und Acetonitril bei unterschiedlichen Temperaturen und Salzkonzentration. Im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen und der Analyse von strukturellen Eigenschaften in den Aktivmaterial-Lösungsmittel Systemen soll die Eignung der molekularen Modelle diskutiert werden.

Betreuerin: M. Sc. Miriam Sprick

Prüferin: Prof. Dr.-Ing. Gabriele Raabe