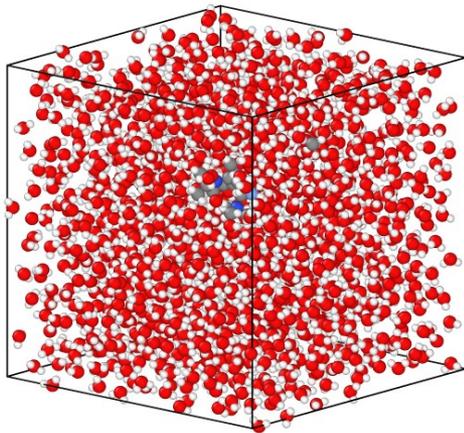


Motivation

- Molekulare Modelle (*Force Fields*) beschreiben die inter- und intramolekularen Wechselwirkungen der Moleküle in molekular-dynamischen Simulationen
- Die Genauigkeit der Modelle ist entscheidend für die Aussagekraft der Simulationsergebnisse



Simulation	X	Modellierung	X
Experiment	O	Konstruktion	O

Fragestellungen

- Erweiterung des *Force Fields* GAFF/IPolQ-Mod+LJ-fit um Atomtypen für schwefelhaltige Komponenten
- Anwendung eines Optimierungsalgorithmus und Durchführung von molekuldynamischen Simulationen

Zu dieser Fragestellung werden Studien- oder Masterarbeiten angeboten. Voraussetzung ist eine erfolgreiche Teilnahme an den Lehrveranstaltungen zum Thema Molekulare Simulation