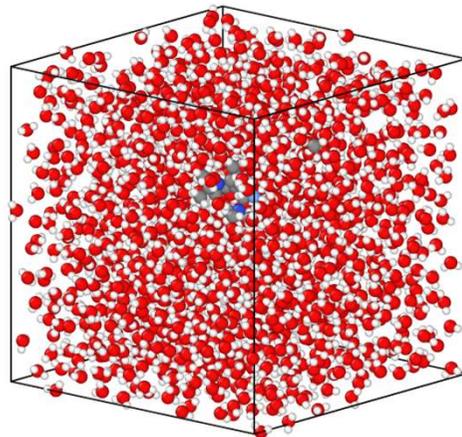


Löslichkeitsbestimmung mittels molekularer Simulationen von TEMPO-Molekülen für in Einsatz in Redox-Flow-Batterien

Motivation

- Redox-Flow Batterien als skalierbares und langfristiges Speichermedium für überschüssigen regenerativ erzeugten Strom
- Vorhersage des Löslichkeitsverhaltens des Elektrolyten essentiell für Effizienzsteigerung der Redox-Flow-Batterien



Simulation	X	Modellierung	X
Experiment	O	Konstruktion	O

Fragestellungen

- Molekulardynamische Simulationen zum Vergleich der Kraftfelder
- Strukturelle Analyse der Elektrolyt-Lösungsmittel-Wechselwirkungen
- Bestimmen der freien Solvatisierungsenthalpien

Zu diesen Fragestellungen werden Studien- und Masterarbeiten angeboten.