

# Modellierung und Simulation von Wasserstoffkatalysatoren

## Motivation

- Molekularer Wasserstoff tritt als Gemisch aus zwei Spin-Isomeren – Para- und Orthowasserstoff – mit temperaturabhängigem Gleichgewichtszustand auf
- Das Verständnis der entweder exo- oder endothermen Spin-Umwandlung ist in der Kryotechnik von hoher Relevanz
- Beispielsweise in der brennstoffzellen-elektrischen Mobilität basierend auf kryogenem Wasserstoff kann die endotherme Umwandlung ausgenutzt werden

## Fragestellungen

- Modellierung und Simulation von Katalysatoren der Spin-Umwandlung basierend auf vorhandenen Modellansätzen sowie Komponenten- und Stoffdaten-Bibliotheken

Simulation	X	Modellierung	X
Experiment	O	Konstruktion	O

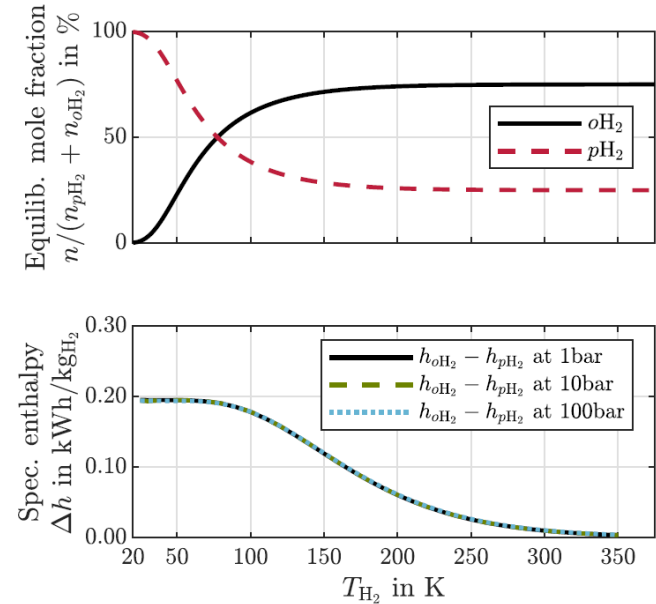


Abb. 1: Oben: Gleichgewichtsverteilung der beiden Spinisomere Para- und Orthowasserstoff ( $pH_2$ ,  $oH_2$ ). Unten: Enthalpiedifferenzen der beiden Isomere.

Zu diesen Fragestellungen werden **Bachelor-, Studien- und Masterarbeiten** angeboten.