

Studienarbeit/Masterarbeit: Untersuchung von Force Field Potenzialen für die Beschreibung von Benzolderivaten

Ein Forschungsgebiet der Arbeitsgruppe Nanomaterialien am IPAT ist die Synthese von Metalloxid-Materialien wie ZnO und aluminiumdotiertem ZnO (AZO), die aufgrund ihrer chemischen und optischen Eigenschaften großes Potenzial für die Anwendung in Dünnschichtsolarzellen, Touchscreens, Leuchtdioden u.v.m. besitzen. In experimentellen Untersuchungen am IPAT hat sich gezeigt, dass die Form der synthetisierten ZnO bzw. AZO Nanopartikeln stark vom verwendeten Lösungsmittel beeinflusst wird. Während Benzylalkohol als Lösungsmittel beispielsweise zu stabförmigen Partikeln führt, begünstigt Benzylamin eine Kugelform. Ein Verständnis der zugrundeliegenden Mechanismen der Interaktion von Nanopartikel und Lösungsmittel würde es daher ermöglichen, durch geeignete Wahl des Reaktionssystems maßgeschneiderte Nanopartikel für verschiedene Anwendungen herzustellen. Gegenstand eines geplanten gemeinsamen Forschungsprojekts vom IFT und dem IPAT ist daher die detaillierte Untersuchung zur Interaktion von Lösungsmitteln und ZnO-Nanopartikeln, mit dem Ziel, die grundlegenden Mechanismen und Einflussfaktoren auf das Kristallwachstum zu identifizieren.

Bevor jedoch Simulationsstudien zur Wechselwirkung der Lösungsmittelmoleküle mit der ZnO-Oberfläche durchgeführt werden können, müssen zunächst geeignete molekulare Modelle (Force Fields) zur Beschreibung der reinen Komponenten identifiziert werden. Im Rahmen der studentischen Arbeit sollen daher gebräuchliche Force Fields aus der Literatur wie GAFF oder OPLS hinsichtlich ihrer Eignung zur Beschreibung der Eigenschaften von Benzylalkohol, Benzylamin und Benzoesäure untersucht werden. Dafür sollen MD Simulation zu Stoffeigenschaften wie Dichten, Viskositäten u.ä. durchgeführt werden, und die Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten verglichen werden.

