Technische Universität Braunschweig

Wissenschaftliche*r Mitarbeiter*in (m/w/d)

Vom Grundlagenverständnis zum rationalen Design des Elektrolyten für organische Redox-Flow-Batterien (VorDERBa)

Befristet (3 Jahre), TV-L E13, 100%

Im DFG-Förderprojekt "**Vom Grundlagenverständnis zum rationalen Design des Elektrolyten für organische Redox-Flow-Batterien (VorDERBa)"** untersuchen wir Redoxflowbatterien mit organischen Aktivmaterialien (AORFB) als kostengünstige, nachhaltige Lösung zur stationären Energiespeicherung. Ziel des Kooperationsprojekts ist das maßgeschneidertes Design der Elektrolyte in Hinblick auf die Kapazität, Leistung und Lebensdauer der AORFB. Dies erfordert ein tieferes mechanistisches Verständnis der Relation zwischen mikroskopischen Eigenschaften und dem makroskopischen Verhalten der AORFB. Das Projekt verfolgt einen interdisziplinären, skalenübergreifenden Ansatz in Kooperation von zwei Arbeitsgruppen: Detaillierte molekulare Simulationen am Institut für Thermodynamik (IfT) liefern Transporteigenschaften und mikrostrukturelle Eigenschaften der Elektrolytlösung, die in Kombination mit experimenteller elektrochemischer Charakterisierung am Partnerinstitut ausgewertet werden.

Die Stelle zur Charakterisierung der Elektrolyte mittels Molekulardynamik (MD) Simulationen ist zu 100% am Institut für Thermodynamik (AG Prof. G. Raabe) angesiedelt, und befristet für voraussichtlich 3 Jahre zu besetzen. Sie soll der Qualifizierung des wissenschaftlichen Nachwuchses dienen und bietet die Möglichkeit zur Promotion/zur wissenschaftlichen Weiterqualifikation.

Ihre Aufgaben:

- Parametrisierung von molekularen Modellen (Force Fields) für Anthraquinonesulfate
- MD Simulationen zu strukturellen und Transporteigenschaften in der Elektrolytvolumenphase bei Variation der Aktivmaterial- und Leitsaltkonzentration, des Lösungsmittels sowie der Temperatur
- MD-Simulationen zur Analyse der Elektrolyt-Elektroden Wechselwirkungen
- Analysen zu den Korrelationen zwischen molekularen Eigenschaften, Transportgrößen und elektrochemischen Messgrößen

Wir bieten:

- Vergütung je nach Aufgabenübertragung und Erfüllung der persönlichen Voraussetzungen bis EG 13 TV-L einschließlich einer Jahressonderzahlung entsprechend Tarifvertrag, Stellenumfang 100%
- Forschung an einem gesellschaftlich relevanten und wissenschaftlich herausfordernden Thema in einem interdisziplinären Projekt
- eine engagierte Betreuung
- ein vielfältiges Weiterbildungs- und Sportangebot sowie ein lebendiges Campusleben in internationaler Atmosphäre an der TU Braunschweig.

Ihr Profil:

- überdurchschnittlich abgeschlossenes Masterstudium im Maschinenbau oder in vergleichbaren Studiengängen
- Gute Grundkenntnisse in der Thermodynamik
- Gute Grundkenntnisse in der molekularen Modellierung und Simulation
- Programmierkenntnisse, Grundkenntnisse in der Datenanalyse
- Team- und Kommunikationsfähigkeit, Flexibilität, Leistungsbereitschaft und eigenständiges Arbeiten

Bewerbungsprozess:

Bitte richten Sie Ihre schriftliche Bewerbung mit den üblichen, aussagekräftigen Unterlagen und dem von Ihnen angestrebten Einstellungstermin bis zum 01.12.2026 vorzugsweise per E-Mail und vorzugsweise im PDF-Format an: G.Raabe@tu-braunschweig.de