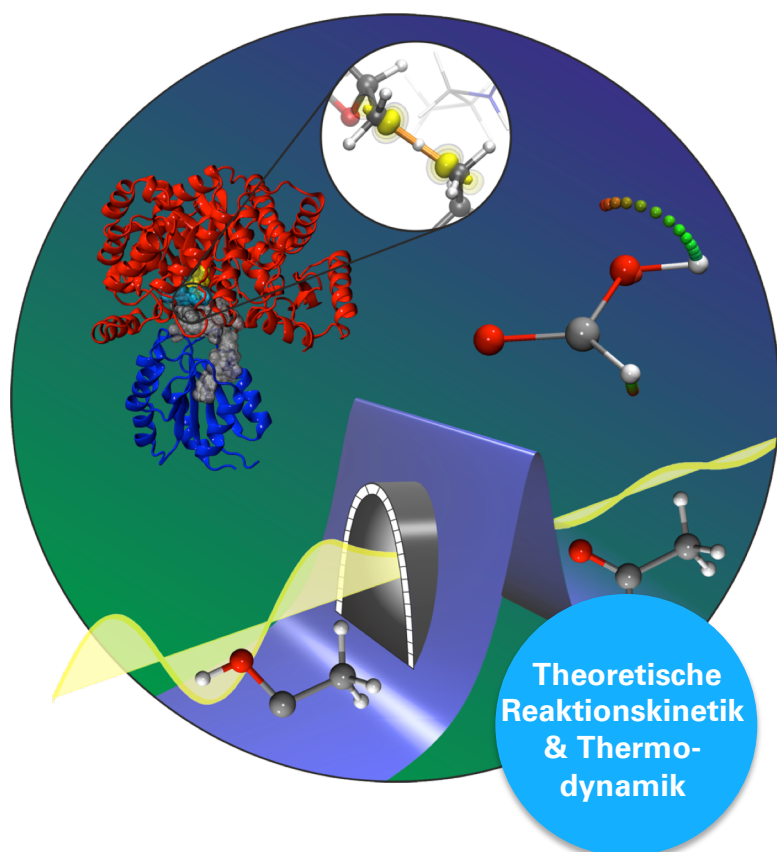


Universität Stuttgart
Institut für theoretische Chemie
Prof. Dr. Johannes Kästner
Dr. Mark Pfeifle



KINETISCHE UND THERMODYNAMISCHE MODELLIERUNG AUF MOLEKULARER EBENE

Projektarbeit am Institut für theoretische Chemie

Die Zustandssumme ist eine der zentralen Größen in der physikalischen Chemie, da sie die Berechnung makroskopischer Eigenschaften aus Molekülparametern ermöglicht. Beispielsweise kann man mit ihrer Hilfe die Geschwindigkeit einer Reaktion aus quantenchemischen Simulationen ableiten, und so Aussagen über den Mechanismus einer Reaktion oder die Effizienz eines Katalysators treffen.

Im Prinzip kann die Zustandssumme berechnet werden, in dem man Energiebeiträge aller Quantenzustände des Moleküls addiert. Für größere Moleküle werden solche Berechnungen aber schnell aufwändig oder sogar unmöglich.

Hier bietet es sich an, das Verfahren mit dem Landau-Wang-Algorithmus zu beschleunigen. Dieses Verfahren soll im Rahmen der Projektarbeit in unser bestehendes Programm (DL-FIND) implementiert werden. Das Projekt kann bei Interesse zu einer Bachelorarbeit ausgebaut werden.

Kontakt:
Prof. Johannes Kästner
Institut für theoretische Chemie
kaestner@theochem.uni-stuttgart.de

www.uni-stuttgart.de/theochem/groups/kaestner/forschungspraktikum.html

