

Modellierung der molaren Leitfähigkeit von wässrigen Metallsalzlösungen

Masterarbeit (m/w/d) (experimentell/theoretisch)

Beginn: ab sofort

Themenstellung: Die kontinuierliche hydrothermale Synthese (CHTS) ist ein chemisches Verfahren, bei dem ein kalter wässriger Metallsalzstrom mit einem nahe- oder überkritischem Wasserstrom gemischt wird und dabei das Metallsalz zum Metalloxid reagiert. Durch gezielte Variation der Prozessparameter können die Größe und Oberflächeneigenschaften der Metalloxid Nanopartikel eingestellt werden. Um diese Reaktion sowohl Zeit, als auch orts aufgelöst messen zu können wird der verwendete Reaktor mit einem Messgerät für die Impedanzspektroskopie ausgestattet. Durch die indirekte Messung der Leitfähigkeit, über die Impedanz, kann die Restkonzentration im Produktstrom bestimmt werden. Für eine sensitive Messung ist eine optimale Elektrodengeometrie und Frequenzbereich elementar wichtig. Um zukünftig eine experimentelle Optimierung der Elektrodengeometrie und des Frequenzbereichs so gering wie möglich zu halten soll in dieser Arbeit die Leitfähigkeit von verschiedenen Metallsalzsyste men modelliert werden. Anschließend soll mit dieser der Impedanzverlauf für gegebene Elektrodengeometrien bestimmt werden.

Im Rahmen der studentischen Tätigkeit sind folgende Arbeiten durchzuführen:

- Recherche über geeignete Theorien zur Berechnung von molaren Leitfähigkeiten von Elektrolytsystemen
- Modellierung und Validierung der molaren Leitfähigkeit für verschiedene Elektrolyte
- Konzentrationsabhängige Berechnung der Impedanz für verschiedene Elektrolytsysteme und deren Vergleich mit experimentellen Daten

Genauer Umfang und Art der Arbeit können nach Absprache mit dem Betreuer besprochen werden. Eine genauere Beschreibung und Klärung von offener Fragen ist nach Absprache jederzeit möglich. Kenntnisse in physikalischer Chemie, chemischer Thermodynamik und Impedanzspektroskopie sind von Vorteil, aber kein muss. Erste Erfahrungen in Modellierung und Programmierung in Python sollten vorhanden sein.

Martin Zürn
martin.zuern@kit.edu
+49 721 608-25457
Campus Nord, Geb. 695

Prof. Thomas Hanemann
thomas.hanemann@kit.edu
+49 721 608-22585