

Ankündigung einer Abschlussarbeit:

Simulation mittelgroßer molekularer Ionen mit einem Moleküldynamik-Kollisionsmodell

Die detaillierte Beschreibung der Interaktion von molekularen Ionen mit neutralen Hintergrundgaspartikeln ist eine wichtige Grundlage für die Simulation von modernen analytischen Instrumenten wie Massenspektrometern oder Ionenmobilitätsspektrometern. In der PTC wurde kürzlich ein neues Molekül-Dynamik basiertes Kollisionsmodell für diese Aufgabe in ein offenes Simulationsprogramm integriert. Dieses Modell ist in der Lage, die Wechselwirkungen zwischen einem Ion und neutralen Hintergrundgaspartikeln während einer molekularen Kollision mit einem Kraftfeld-Ansatz detailliert zu berechnen. Es erlaubt damit, dass die Dynamik von molekularen Ionen in komplexen nicht-gleichgewichts Prozesse modelliert werden können.

In der geplanten Arbeit soll das neue Kollisionsmodell eingesetzt werden, um die Dynamik von analytisch relevanten, mittelgroßen Ionen zu modellieren. Dabei soll zunächst überprüft werden, ob das Kollisionsmodell in der Lage ist, die Ionenmobilität verschiedener pharmazeutischer und verwandter Moleküle vorherzusagen. Dann sollen weitergehende Simulationen komplexerer Prozesse, wie beispielsweise des Transfers der molekularen Ionen durch eine Kollisionszelle eines Massenspektrometers, mit dem Kollisionsmodell durchgeführt werden um die Anwendbarkeit des Modells auch für solche komplexe Fragestellungen zu zeigen.

Die Arbeiten ist geeignet für

- Bachelor oder Master Chemie
- Bachelor Applied Science:
Chemie / Physik, Chemie / Mathematik, Chemie / Informatik

Ansprechpartner:

Walter Wißdorf

V. 08.072

wissdorf@uni-wuppertal.de