

Theoretische Chemie

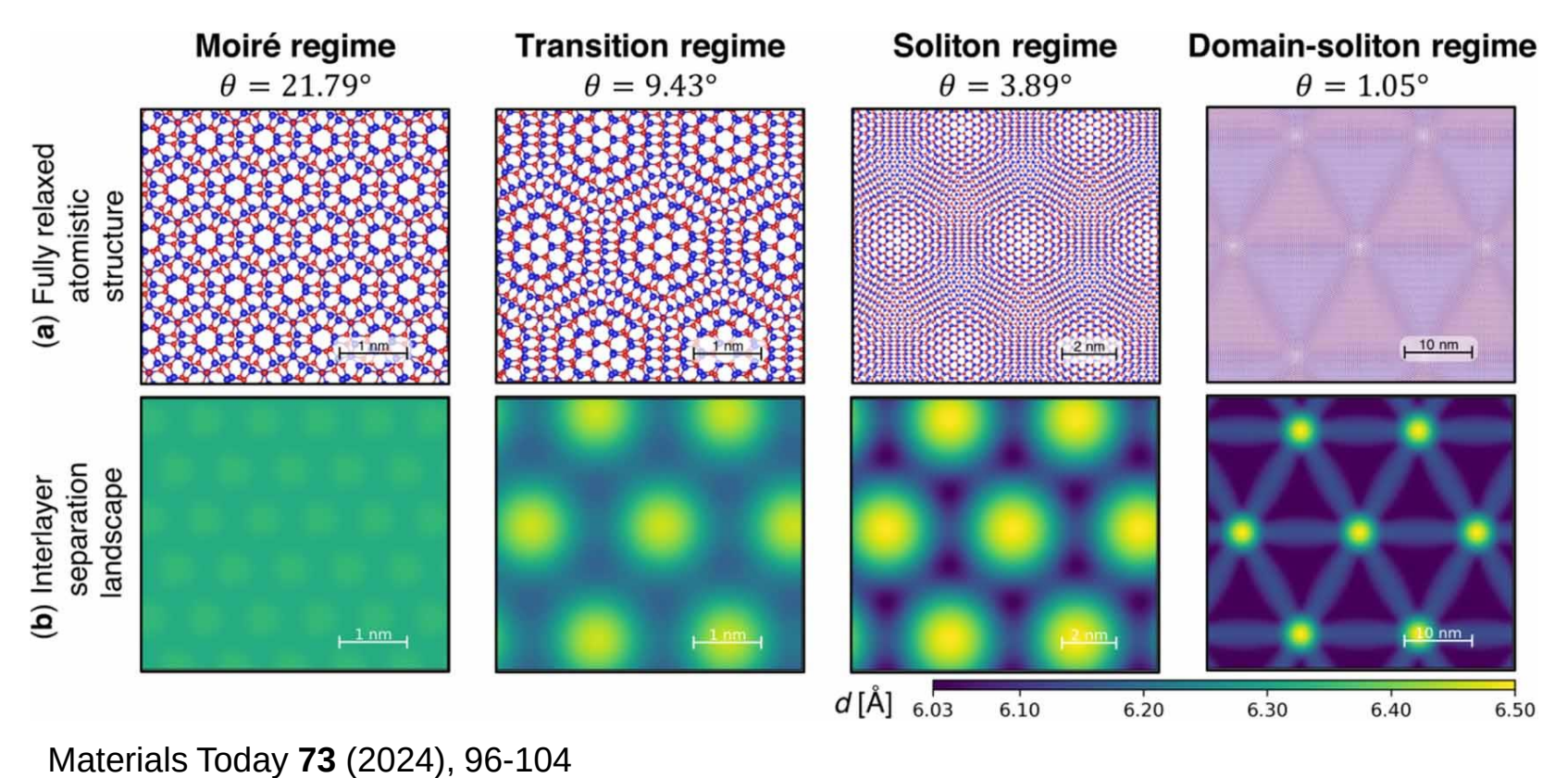
Prof. Dr. Thomas Heine

Theoretische Chemie, TU Dresden, König-Bau, Bergstr. 66c, 01069 Dresden

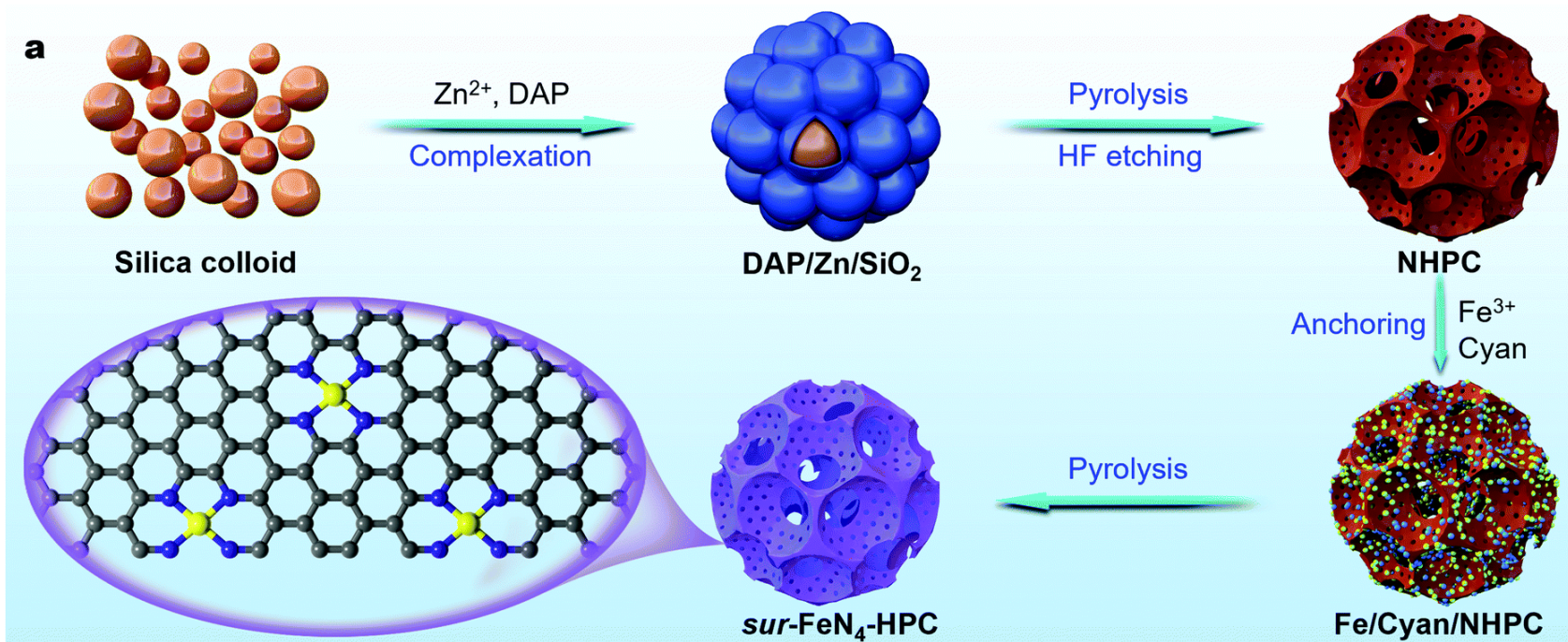
Machine Learning

BSc-Thema: Generierung eines Machine-Learned Interaction Potentials (MLIPs) aus vorhandenen Datensätzen zu Heterostrukturen von Übergangsmetall-Dichalkogeniden (TDMCs). Ziel ist die Simulation von Moiré-Strukturen großer Systeme.

Forschungsgebiet: Einzelschichten von 2D-Materialien (z.B. Graphit oder MoS₂) können gegeneinander verdreht werden und bilden dann Überstrukturen aus (Moiré-Strukturen). Je kleiner der Drehwinkel ist, umso größer muss im Allgemeinen die Simulationszelle sein. Mehrere 100.000 Atome können mit herkömmlichen quantenchemischen Berechnungsmethoden nicht untersucht werden. Hier kommen MLIPs zum Einsatz.



Materials Today **73** (2024), 96-104



Energy Environ. Sci., **15** (2022), 2619-2628

Single-Atom Catalysis

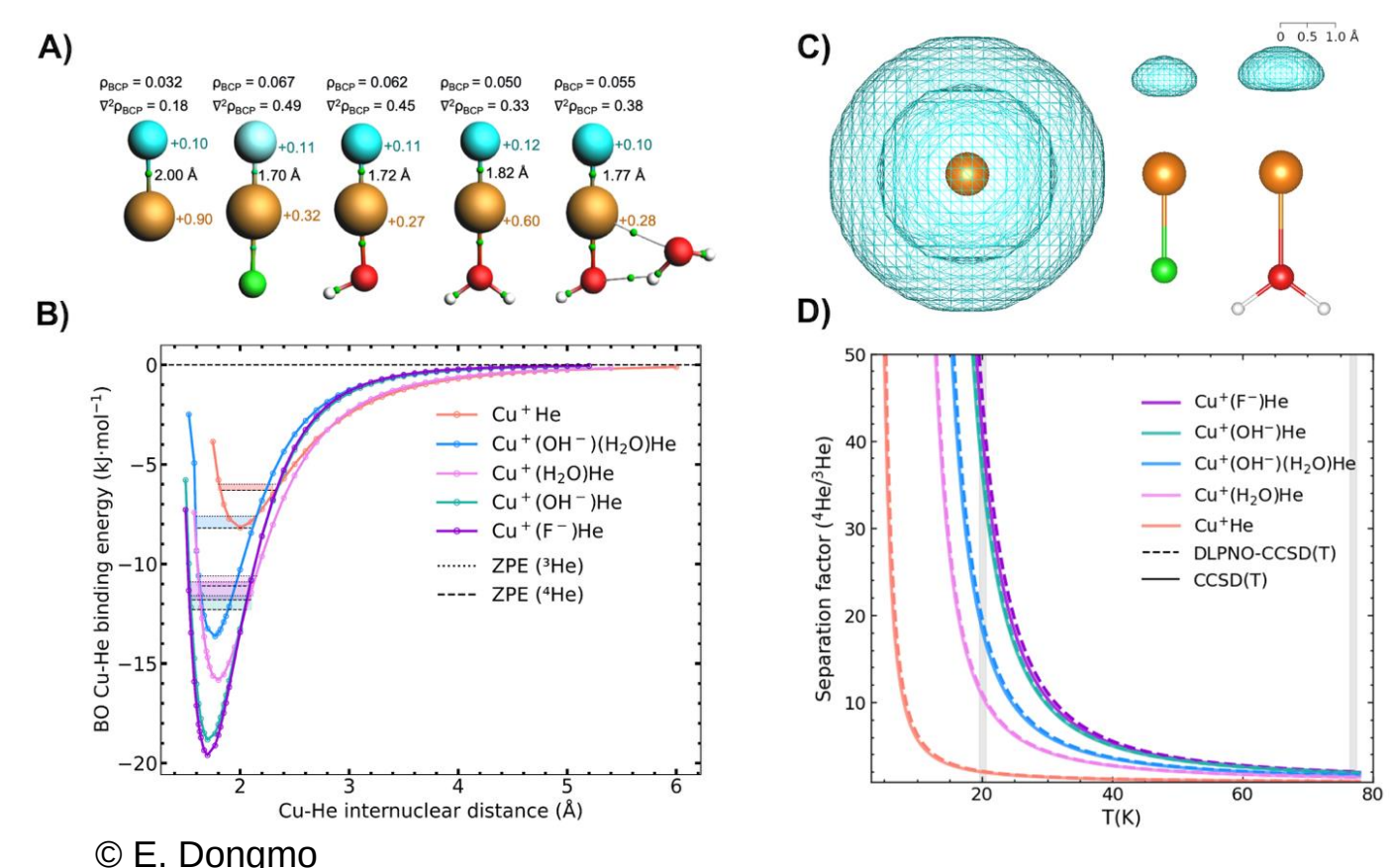
BSc-Thema: Theoretische Beschreibung der Sauerstoff-Reduktionsreaktion (ORR) an Einzelatom-Katalysatoren.

Forschungsgebiet: Katalytisch wirkende Einzelatome können immobilisiert werden und trotzdem gut zugänglich für die Reaktanden sein. Die Immobilisation kann z.B. an 2D-Materialien (z.B. Graphen) oder in porösen 3D-Materialien (z.B. metallorganische Gerüstverbindungen, MOFs) erfolgen. Wir wollen die Wirkungsweise immobilisierter Einzelatom-Katalysatoren auf verschiedene Reaktionen verstehen.

Nuclear Quantum Effects

BSc-Thema: Berechnung von Separationskoeffizienten zwischen 3He und 4He an Übergangsmetall-Komplexen

Forschungsgebiet: Isotope bzw. Isotopologe (z.B. H₂/D₂/T₂ oder 3He/4He) unterscheiden sich chemisch kaum. Daher sind sie sehr schwer zu trennen. Man kann sich aber den Einfluss der unterschiedlichen Nullpunktenergien zunutze machen, um eine chemische Trennung zu erreichen. Das wird häufig durch Adsorption erreicht. In diesem Projekt soll die Wechselwirkung von Helium-Isotopen mit Übergangsmetallen untersucht werden. Durch ein Screening der Metalle können für die Trennung geeignete Komplexe identifiziert werden.



© E. Dongmo

Arbeitskreis Theoretische Chemie

Wir sind

- eine internationale und interdisziplinäre Arbeitsgruppe mit ca. 45 Wissenschaftlern aus den Bereichen Chemie, Physik, Materialwissenschaften u.a.
- weltweit vernetzt mit anderen führenden wissenschaftlichen Institutionen
- offen für neue BSc/MSc/PhD-Student:innen

Euch erwartet

- individuelle Betreuung durch erfahrene Wissenschaftler und technisches Personal
- Teamarbeit (interne und externe Kooperationen)
- Einbindung in alle Aktivitäten des AK Heine (Gruppenseminare, Retreats, Workshops, Freizeitaktivitäten...)

Ansprechpartner: Prof Dr. Thomas Heine, thomas.heine@tu-dresden.de
Dr. Jan-Ole Joswig, jan-ole.joswig@tu-dresden.de

