

Ausschreibung für Studienarbeit, Projektarbeit, Bachelorarbeit oder Masterarbeit

## Atomistische Simulation von elektrochemischen Prozessen beim elektrochemischen Abtragen

Das elektrochemische Abtragen (ECM) ist ein Verfahren, bei dem metallische Oberflächen im Mikrometerbereich in einem flüssigen Ionenleiter (Elektrolyt) unter Einfluss von elektrischem Ladungstransport aufgelöst werden. Viele hierbei auftretende elektrochemische Prozesse sind auf atomarem Level bislang nur geringfügig verstanden. Atomistische Simulationen können zu einem besseren Verständnis der relevanten elektrochemischen Reaktionen führen. Im Rahmen dieser Arbeit ist

vorgesehen, atomistische Simulationen insbesondere mit Hilfe einer erweiterten reactive force-field Methode (ReaxFF) durchzuführen. Möglich sind auch Ab-Initio bzw. Dichtefunktionaltheorie-Simulationen. Der Fokus dieser atomistischen Simulationen liegt auf der Wechselwirkung zwischen einem Elektrolyt und einer metallischen Oberfläche. Eingesetzt werden sollen Methoden wie Molekulardynamik- und Monte-Carlo-Simulationen, welche in Software-Paketen wie bspw. LAMMPS, SIESTA und Atomic Simulation Environment (ASE) implementiert sind.

Folgende Arbeiten sind vorgesehen:

- Einarbeitung in die Benutzung von Linux/Unix-Systemen (u.a. bash-scripting)
- Erarbeiten notwendiger Programmierfähigkeiten in Python und C/C++
- Einarbeitung in die theoretischen Grundlagen zu atomistischen Simulationen auf dem Level empirischer Potentiale
- Auswahl geeigneter molekularer und metallischer Systeme
- Durchführen und Auswertung der Simulationen

Betreuende Person: Dr. rer. nat. Arthur Riefer  
Lehrstuhl für Fertigungstechnik mit Schwerpunkt Trennen  
Universitätsplatz 2  
39106 Magdeburg  
Tel.: 0391 67 57542  
Mail: arthur.riefer@ovgu.de

Betreuender

Hochschullehrer: Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Dipl.-Phys. Matthias Hackert-Oschätzchen

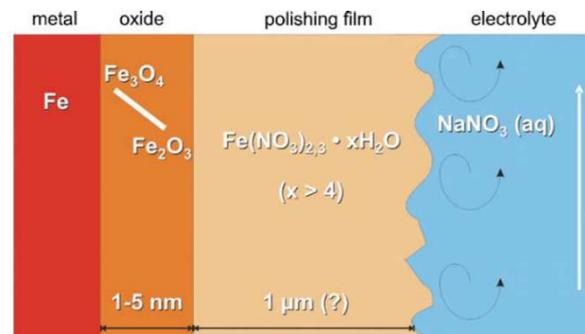


Abbildung 1: Modell einer Metall-Elektrolyt-Grenzfläche während eines ECM-Prozesses [Rosenkranz *et al.*, *Electrochimica Acta* 50, 2005]