

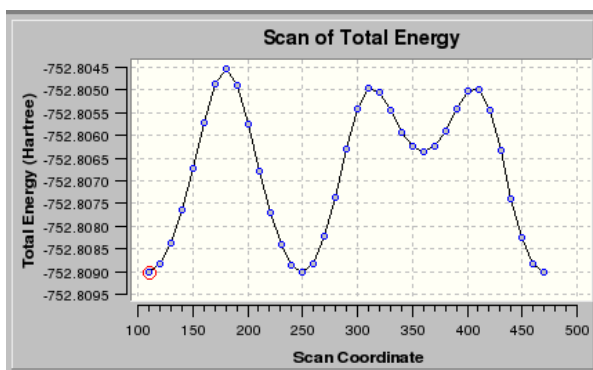
Studienarbeit/Masterarbeit:

Einfluss des Torsionspotenzials auf die Wiedergabe der Viskositäten von fluorierten Butenen

Ein bestehendes Force Field - Modell für Hydrofluorolefine umfasst derzeit hauptsächlich fluoriierte Propene, die als Arbeitsmedien für verschiedene kältetechnische Anwendungen diskutiert werden. Aktuell werden aber auch vermehrt HFO Komponenten auf Basis von fluoriierten Butenen als neue Arbeitsfluide für Hochtemperaturwärmepumpen oder Organic Rankine Prozesse vorgeschlagen. Daher soll das Force Field auf diese Komponenten erweitert werden. Dies soll exemplarisch anhand der Komponenten HFO-1345fz, -1354mfy und -1336fy erfolgen.



Die Modellierung der fluoriierten Butene mit beliebiger Position der Doppelbindung stellt jedoch eine besondere Herausforderung für die Parametrisierung der intramolekularen Terme dar, da mit wachsender Komplexität der Moleküle auch die gegenseitige Beeinflussung der inneren Freiheitsgrade zunimmt. Die größten Geometrieänderungen in Molekülen resultieren immer aus Torsionen um Dihedrale, so dass deren korrekte Beschreibung wichtig ist, um die Dynamik der Moleküle richtig wiederzugeben. Bei den fluoriierten Butenen wie HFO-1345fz, -1354mfy und -1336fy liegt die Doppelbindung am ersten C-Atom an. Daher sind Rotationen um den CM=CM-CT-CT Dihedral u.ä. möglich, die in sehr komplexen Torsionsprofilen resultieren, wie in der folgenden Abbildung exemplarisch für HFO-1336fy dargestellt ist.



.Torsionsprofil um den CM=CM-CT-CT Dihedral-Winkel des fluoriierten Butens HFO-1336fy aus ab initio Simulationen auf dem B3LYP/DGDZV-Niveau mit Gaussian.
Screenshot aus der Gaussview-Ergebnisansicht.

Für die in den Komponenten HFO-1345fz, -1354mfy und -1336fy vorhandenen Dihedralwinkel soll untersucht werden, mit welcher funktionalen Form das Torsionspotenzial am besten abgebildet werden kann. Bei der Untersuchung von geeigneten Torsionspotenzialen zur Beschreibung der komplexen fluoriierten Butene sind insbesondere die Übertragbarkeit der Torsionsparameter zwischen verschiedenen Komponenten und die Auswirkungen der Modellierung auf die Simulation von dynamischen Eigenschaften wie Viskositäten zu analysieren.

Betreuer: PD Dr.-Ing. Gabriele Raabe