



Aufgabenstellung für die Diplomarbeit

im Studiengang Werkstoffwissenschaft

Name der Diplomandin / Name des Diplomanden: Herr **Jonathan Heinze**

Matrikelnr.: 3780489

Thema:

High Throughput Workflow for 2D Covalent-Organic Frameworks Property Screening

Zielsetzung:

Ziel der Diplomarbeit zum oben genannten Thema ist das Aufsetzen eines high throughput workflows zur Automatisierung der Simulation und Berechnung elastischer Eigenschaften von 2-dimensionalen covalent organic frameworks. Hierbei sollen 3 Aufgabenpunkte bearbeitet werden:

1. Setup of a high throughput workflows
2. Calculation of elastic properties
3. Analysis of structure-property relationships

Betreuer: Prof. Dr. Gianaurelio Cuniberti

Ausgehändigt am: 14.01.2022

Einzureichen am: 03.06.2022

Die von der Studienrichtung erlassenen Richtlinien zur Anfertigung der Diplomarbeit sowie die Diplomprüfungsordnung sind zu beachten.

Studiengangskoordinator
Prof. Dr. rer. medic. H.-P. Wiesmann

Betreuender Hochschullehrer
Prof. Dr. Gianaurelio Cuniberti