



Aufgabenstellung für die Diplomarbeit

im Studiengang Maschinenbau, Energietechnik

Name der Diplomandin / Name des Diplomanden:

Herr Li CHEN, Matrikelnr. 4826457

Thema: Electronic properties of 2D materials for gas adsorption
(Elektronische Eigenschaften von 2D Materialien für Gasadsorption)

Zielsetzung:

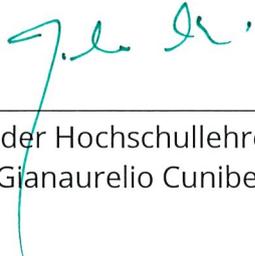
Ziel der Diplomarbeit zum oben genannten Thema ist es, verschiedene 2D Materialien auf die Nutzung zur Gasadsorption bzw. Geruchssensoren hin zu untersuchen. Hierbei sollen folgende zwei Aufgabenpunkte bearbeitet werden:

1. Elektrochemische Charakterisierung der Gas- bzw. Geruchsmoleküle durch DFT Berechnungen (Dipolmoment, HOMO\LUMO Bandlücke, Polarisierbarkeit)
2. Berechnung Wechselwirkung und Adsorptionsenergie der Moleküle aus 1. und 2D Materialien (Graphen, reduziertes Graphenoxid, Stickstoff-dotiertes Graphen)

Betreuer: Prof. Dr. Gianauelio Cuniberti
Ausgehändigt am: 01.04.2022
Einzureichen am: 01.09.2022

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

Studiengangskoordinator
Prof. Dr.-Ing. Michael Beckmann



Betreuender Hochschullehrer
Prof. Dr. Gianauelio Cuniberti