

Forschungsprofil

Prof. Dr. Axel Groß

Abteilung Theoretische Chemie
Universität Ulm

1. Tabellarischer Lebenslauf

30.12.1961	geboren in Lüneburg, Niedersachsen
1981	Abitur
1981 - 1983	Bundeswehr
1983 - 1990	Physikstudium an der Universität Göttingen
1986 - 1987	Auslandsstudium an der University of California at Santa Barbara
1990	Diplom an der Universität Göttingen, Thema der Diplomarbeit: „Ortsraumformalismus zur Gesamtenergieberechnung in Halbleitern“, durchgeführt bei Prof. Dr. H. Teichler.
1993	Promotion „Vibrationsanregung zweiatomiger Moleküle bei Streuung an Oberflächen“ betreut von Prof. Dr. W. Brenig, durchgeführt am Physik-Department der Technischen Universität München
1993 – 1998	Wissenschaftlicher Angestellter in der Abteilung Theorie des Fritz-Haber-Instituts der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin Arbeitsgebiet: Dynamik der Molekül-Oberflächenwechselwirkung
1996	Sechswöchiger Forschungsaufenthalt am Naval Research Lab, Washington, D.C., USA, Complex Systems Theory Branch Arbeitsgebiet: Tight-Binding Simulationen
1998 – 2004	C3-Professor für Theoretische Physik/Oberflächenphysik am Physik-Department der Technischen Universität München
1999	Habilitation Technische Universität Berlin „ <i>Ab initio</i> Dynamikberechnungen von Reaktionen an Oberflächen“, Lehrbefähigung für das Fach Theoretische Physik
2004	C4-Professor und Leiter der Abteilung Theoretische Chemie an der Universität Ulm
2005	Einmonatiger Forschungsaufenthalt am Chemistry Department der University of California at Santa Barbara, USA.

2. Aktuelle wissenschaftliche Forschungsgebiete

A *Dynamik der Molekül-Oberflächenwechselwirkung*

- Quantendynamik der H₂ Adsorption
H₂/Rh(111), H₂/Pd(110)
- *Ab initio* Molekulardynamiksimulationen zur Adsorption auf reinen und Adsorbat-vorbedeckten Metalloberflächen
H₂/Pd(111), H₂/Pd(100), O₂/Pt(111)
- Gemischt quantenmechanisch-klassische Simulationen von Reaktionen an Oberflächen
Laser-induzierte Desorption von NO/NiO(100) und K/KI(100) und Ladungstransfer bei der Streuung von I₂/Diamant

B *Ab initio Untersuchungen der katalytischen Aktivität metallischer Oberflächen*

- Pseudomorphe bimetallische Schichtsysteme
Reaktivität von Pd/Au(111) und Pt/Ru(0001)
- Nanostrukturierte Oberflächen
gestufte Oberflächen, deponierte Metallcluster, Koadsorbatsysteme
- Wasserfilme auf bimetallischen Oberflächen
Koadsorption und elektrische Feldeffekte

C *Strukturen und Reaktionen an Ober- und Grenzflächen*

- Energetik und kinetische Monte Carlo Simulationen
Partialoxidation von Methanol auf sauberen und Sauerstoff-bedeckten Kupfer-oberflächen, Adsorption und Desorption von O₂/Pt(111)
- Adsorbat-induzierte Austrittsarbeitsänderung von Wolfram
- Metall-Halbleiter-Grenzflächen
Schottky-Barrieren und Metall-induzierte Bandlückenzustände
- Organische selbstorganisierte Nanostrukturen auf Graphit
Aminosäuren und Farbstoffmoleküle

3. Relevante Veröffentlichungen aus den vergangenen fünf Jahren

1. *Semiclassical treatment of charge transfer in molecule-surface scattering*, C. Bach and A. Groß, J. Chem. Phys. **114**, 6396-6403 (2001).
2. *Coexistence of atomic and molecular chemisorption states: H₂/Pd(210)*, P.K. Schmidt, K. Christmann, G. Kresse, J. Hafner, M. Lischka and A. Groß, Phys. Rev. Lett. **87**, 096103 (2001).
3. *Hydrogen adsorption on an open metal surface: H₂/Pd(210)*, M. Lischka and A. Groß, Phys. Rev. B **65**, 075420 (2002).
4. *Theoretical Surface Science -- A microscopic perspective*, Axel Groß, Springer, Berlin, 2002, X, 275 Seiten, 105 Abbildungen, 11 Tabellen, gebunden.
5. *Surface strain versus substrate interaction in heteroepitaxial metal layers: Pt on Ru(0001)*, A. Schlapka, M. Lischka, A. Groß, U. Käsberger, and P. Jakob, Phys. Rev. Lett. **91**, 016101 (2003).
6. *Local reactivity of thin Pd overlayers on Au single crystals*, A. Roudgar and A. Groß, J. Electroanal. Chem. **548**, 121 - 130 (2003).
7. *Unified picture of the molecular adsorption process: O₂/Pt(111)*, A. Groß, A. Eichler, J. Hafner, M.J. Mehl, and D.A. Papaconstantopoulos, Surf. Sci. Lett. **539**, L542-L548 (2003).
8. *Simulation of laser induced desorption of NO from NiO(100)*, C. Bach, T. Klüner, and A. Groß, Chem. Phys. Lett. **376**, 424-431 (2003).
9. *High-dimensional quantum dynamical study of the dissociation of H₂ on Pd(110)*, A. Dianat and A. Groß, J. Chem. Phys. **120**, 5339-5346 (2004).
10. *Local reactivity of supported metal clusters: Pd_n on Au(111)*, A. Roudgar and A. Groß, Surf. Sci. Lett. **559**, L180-L186 (2004).
11. *Density functional theory study of the partial oxidation of methanol on copper surfaces*, Sung Sakong and Axel Groß, J. Catal. **231**, 420 (2005).