

## Forschungsprofil

**Prof. Dr. Axel Groß**

Institut für 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 des Institutes für Theoretische Chemie an der Universität Ulm
2005	Einmonatiger Forschungsaufenthalt am Chemistry Department der University of California at Santa Barbara, USA.
2006-2008	Prodekan der Fakultät für Naturwissenschaften
2008-2009	Studiendekan des Faches Chemie
2009-	Dekan der Fakultät für Naturwissenschaften

## 2. Aktuelle wissenschaftliche Forschungsgebiete

### A *Dynamik der Molekül-Oberflächenwechselwirkung*

- Quantendynamik der H<sub>2</sub> Adsorption  
H<sub>2</sub>/Rh(111), H<sub>2</sub>/Pd(110)
- *Ab initio* Molekulardynamiksimulationen zur Adsorption auf reinen und Adsorbat-vorbedeckten Metalloberflächen: H<sub>2</sub>/Pd(111), H<sub>2</sub>/Pd(100), H<sub>2</sub>/S(2x2)/Pd(100), O<sub>2</sub>/Pt(111), C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>/Ag(210)
- 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 I<sub>2</sub>/Diamant, Spinübergänge bei der Adsorption von O<sub>2</sub> auf Al(111)

### B *Ab initio Untersuchungen der katalytischen Aktivität metallischer Oberflächen*

- Pseudomorphe bimetallische Schichtsysteme  
Reaktivität von Pd/Au, Pd/Cu, Pt/Ru, Pt/Au, Au/Pt
- 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 Kupferoberflächen, Adsorption und Desorption von O<sub>2</sub>/Pt(111)
- Adsorbat-induzierte Austrittsarbeitsänderung von Wolfram
- Metall-Halbleiter-Grenzflächen  
Schottky-Barrieren und Metall-induzierte Bandlückenzustände
- Organische selbstorganisierte Nanostrukturen  
Aminosäuren und Farbstoffmoleküle auf Graphit, Mercaptopyridin auf Au(111), Gast-Wirt-Systeme

### 3. 10 Relevante Veröffentlichungen aus den vergangenen fünf Jahren

1. A. Roudgar and A. Groß, *Local reactivity of supported metal clusters: Pd<sub>n</sub> on Au(111)*, *Surf. Sci.* **559**, L180-L186 (2004).
2. Sung Sakong and Axel Groß, *Density functional theory study of the partial oxidation of methanol on copper surfaces*, *J. Catal.* **231**, 420 (2005).
3. Axel Groß, *Reactivity of bimetallic systems studied from first principles*, *Topics Catal.* **37**, 29 (2006).
4. Axel Groß and Arezoo Dianat, *Hydrogen dissociation dynamics on precovered Pd surfaces: Langmuir is still right*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206107 (2007).
5. Sung Sakong, Christian Mosch, and Axel Groß, *CO adsorption on Cu-Pd alloy surfaces: ligand versus ensemble effects*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 2216-2225 (2007).
6. Christoph Meier, Katharina Landfester, Daniela Künzel, Thomas Markert, Axel Groß, Ulrich Ziener, *Hierarchically self-assembled host-guest network at the solid/liquid-interface for single molecule manipulation*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 3821 (2008).
7. C. Carbogno, J. Behler, A. Groß, and K. Reuter, *Fingerprints for spin-selection rules in the interaction dynamics of O<sub>2</sub> at Al(111)*, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 096104 (2008).
8. Y. Gohda, S. Watanabe, and Axel Groß, *Quantum electron transport through ultrathin Si films: effects of the interface passivation on Fermi-level pinning*, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 166801 (2008).
9. P. Jakob, K. Anhut, S. Schnur, and A. Groß, *Monodisperse microisland formation on Ni/Ru(0001) monolayers*, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 206101 (2008).
10. Mila Manolova, Hans-Gerd Boyen, Jan Kucera, Axel Groß, Andriy Romanyuk, Peter Oelhafen, Valentina Ivanova, and Dieter M. Kolb, *Chemical interactions at metal/molecule interfaces in molecular junctions - a pathway towards molecular recognition*, *Adv. Mater.* **21**, 320 (2009).