

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 der Universität Ulm
2008-2009	Studiendekan des Faches Chemie
2009-2012	Dekan der Fakultät für Naturwissenschaften
2012-	Sprecher der Fachverbandes Oberflächenphysik der Deutschen Physikalischen Gesellschaft
2012-	Vizepräsident für Forschung der Universität Ulm

2. Aktuelle wissenschaftliche Forschungsgebiete

A *Dynamik der Molekül-Oberflächenwechselwirkung*

- *Ab initio* Molekulardynamiksimulationen zur Adsorption auf reinen und Adsorbat-vorbedeckten Metalloberflächen: $\text{H}_2/\text{Pd}(111)$, $\text{H}_2/\text{Pd}(100)$, $\text{H}_2/\text{S}(2\times 2)/\text{Pd}(100)$, $\text{O}_2/\text{Pt}(111)$, $\text{C}_2\text{H}_2/\text{Ag}(210)$
- Gemischt quantenmechanisch-klassische Simulationen von Reaktionen an Oberflächen: Spinübergänge bei der Adsorption von O_2 auf $\text{Al}(111)$

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 Kupfer-oberflächen, Adsorption und Desorption von $\text{O}_2/\text{Pt}(111)$
- Adsorbat-induzierte Austrittsarbeitsänderung von Metalloberflächen
- Metall-Halbleiter-Grenzflächen
Schottky-Barrieren und Metall-induzierte Bandlückenzustände
- Organische selbstorganisierte Nanostrukturen
Aminosäuren und Farbstoffmoleküle auf Graphit, Mercaptopyridin auf $\text{Au}(111)$, Gast-Wirt-Systeme

D *Elektrochemische Grenzflächen*

- Struktur elektrochemischer Elektroden/Elektrolyt-Grenzflächen unter Berücksichtigung des Elektrodenpotentials
- Elementarschritte elektrokatalytischer Prozesse
- Struktur von Kathoden in Li-Ionen-Batterien
- Mögliche Elektrolyte in Fluor-basierten Batterien

3. 10 Relevante Veröffentlichungen aus den vergangenen fünf Jahren

1. Axel Groß and Arezoo Dianat, *Hydrogen dissociation dynamics on precovered Pd surfaces: Langmuir is still right*, Phys. Rev. Lett. **98**, 206107 (2007).
2. 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).
3. C. Carbogno, J. Behler, A. Groß, and K. Reuter, *Fingerprints for spin-selection rules in the interaction dynamics of O₂ at Al(111)*, Phys. Rev. Lett. **101**, 096104 (2008).
4. P. Jakob, K. Anhut, S. Schnur, and A. Groß, *Monodisperse microisland formation on Ni/Ru(0001) monolayers*, Phys. Rev. Lett. **101**, 206101 (2008).
5. 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).
6. S. Schnur and A. Groß, *Properties of metal-water interfaces studied from first principles*, New J. Phys. **11**, 125003 (2009).
7. Felix Eberle, Marc Saitner, Hans-Gerd Boyen, Jan Kucera, Axel Groß, Andriy Romanyuk, Peter Oelhafen, Marc D'Olieslaeger, Mila Manolova and Dieter M. Kolb, *A molecular "double decker" - extending the limits of current metal-molecule hybrid structures*, Angew. Chem. Int. Ed. **49**, 341-345 (2010).
8. K. Tonigold and A. Groß, *Adsorption of small aromatic molecules on the (111) surfaces of noble metals: a DFT study with semi-empirical corrections for dispersion effects*, J. Chem. Phys. **132**, 224701 (2010).
9. J.C. Meyer, S. Kurasch, H.J. Park, V. Skakalova, D. Künzel, A. Groß, A. Chuvilin, G. Algara-Siller, S. Roth, T. Iwasaki, U. Starke, J. Smet and U. Kaiser, *Experimental analysis of charge redistribution due to chemical bonding by High-Resolution Transmission Electron Microscopy*, Nature Materials **10**, 209-215 (2011).
10. M. Roos, D. Künzel, B. Uhl, H. Huang, O.B. Alves, H.E. Hoster, Axel Groß, R.J. Behm, *Hierarchical Interactions and their Influence upon the Adsorption of Organic Molecules on a Graphene Film*, J. Am. Chem. Soc. **133**, 9208-9211 (2011).