Axel Groß: Das virtuelle Chemielabor an Oberflächen

Ob erwünscht oder nicht: Enorme Bedeutung der Reaktionen

Reaktionen an Oberflächen habe eine enorme technologische Bedeutung. Einerseits laufen viele gewünschte Prozesse an Oberflächen ab. So werden die meisten Produkte in der chemischen Industrie mit Hilfe von Katalysatoren hergestellt, auf denen Reaktionsraten drastisch erhöht werden. Andere Prozesse an Oberflächen würden wir dagegen gerne vermeiden, wie zum Beispiel die Korrosion oder das Rosten. Ein verbessertes Verständnis der Wechselwirkung von Molekülen mit Oberflächen ist daher aus ökonomischen Gründen sehr wünschenswert, trägt aber auch zu fundamentalen Einsichten bei Prozessen auf atomarer Skala bei.

Im Mittelpunkt der Vormittagsveranstaltung beim 38. Jahrestag standen die Antrittsvorlesungen der Professoren Axel Groß und Paul Dietl (2. und 3. von rechts). Die Einführungen hatten die Dekane Professor Klaus-Dieter Spindler (Naturwissenschaften/rechts) und Professor Klaus-Michael Debatin (Medizin/links) übernommen. Zu Beginn verabschiedete Rektor Professor Karl Joachim Ebeling (2. von links) die bisherige Kanzlerin Dr. Katrin Vernau (Mitte). *Foto: Nusser/KIZ*

Vom theoretischen Standpunkt aus handelt es sich dabei um die Beschreibung der Wechselwirkung zwischen einem ausgedehnten System, der Oberfläche, mit einem beschränkten endlichen System, dem Molekül (siehe Abbildung). Dies erschwert die theoretischen Behandlung solcher Systeme beträchtlich.

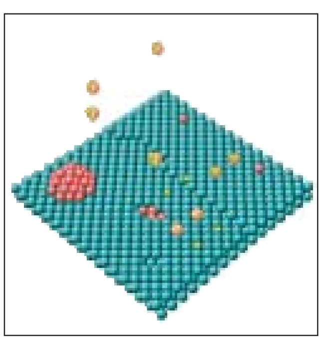
Dennoch hat es in den letzten Jahren enorme Fortschritte in der Berechnung der Wechselwirkung zwischen Molekülen und Oberflächen gegeben.

Dies ist zum großen Teil der Verbesserung der Computerleistung zuzuschreiben, aber auch die Entwicklung von effizienten Algorithmen zur Berechnung der Elektronenstruktur und Gesamtenergie hat einen beträchtlichen Teil dazu beigetragen.

Es ist heutzutage möglich geworden, komplexe Prozesse an Oberflächen aus ersten Prinzipien, das heißt ohne empirische Parameter, zu simulieren.

Dadurch haben die Ergebnisse der Rechnungen Vorhersagekraft, das heißt sie liefern vertrauenswürdige Ergebnisse, ohne an bestehende Experimente angepasst werden zu müssen. Dadurch ergibt sich die Möglichkeit einer engen, gleichberechtigten Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment.

Illustration typischer Strukturen und Prozesse an Oberflächen.



Die Simulationen stellen eine Art Experiment im Computer dar, womit sie als ein virtuelles Chemielabor dienen können. In diesem Vortrag wird an einigen Beispielen demonstriert, welche Einblicke in atomare Prozesse Computersimulationen von Reaktionen an Oberflächen erlauben.

Dynamiksimulationen der Adsorption von Wasserstoff und Sauerstoff werden vorgestellt, die unter anderem relevant sind für das Verständnis von Reaktionen in der Brennstoffzelle oder dem Abgaskatalysator.

Dabei wird demonstriert, welche Bedeutung dynamische Effekte wie der Lenkungseffekt oder das dynamische Einfangen der Moleküle für die Reaktionswahrscheinlichkeiten haben.

Aber auch komplexere Prozesse wie die Methanoloxidation, die Adsorption an nanostrukturierten Oberflächen oder die Elektronen-Austrittsarbeitsänderung durch Beschichtung von Wolfram-Elektroden werden besprochen. Sogar selbstorganisierte Schichten aus organischen Molekülen und biologisch relevante Systeme können mit rechnergestützten Elektronenstrukturmethoden behandelt werden.

Anhand dieser Beispiele wird illustriert, dass Computersimulationen eine viel tieferes Verständnis der mikroskopischen Reaktionsschritte als das Experiment erlauben, da sie die Analyse und Visualisierung des gesamten Reaktionsverlaufes ermöglichen. Zudem können an Modellsystemen einzelne Prozesse exemplarisch untersucht werden.

Computersimulationen werden sicher nicht das Experiment ersetzen, denn nur durch eine enge Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment kann die Natur enträtselt werden. Allerdings kann durch Computersimulationen die Anzahl der nötigen Experimente beträchtlich eingeschränkt werden.

Insgesamt läßt sich vorhersagen, dass das Feld der computergestützten theoretischen Chemie in Zukunft weiter wachsen und viele neue Einsichten und Erkenntnisse bringen wird.

Prof. Dr. Axel Groß

Professor Dr. Axel Groß

Der gebürtige Lüneburger, Jahrgang 1961, studierte nach Abitur und Bundeswehr Physik an der Universität Göttingen und an der University of California at Santa Barbara. Dem Diplom 1990 an der Universität Göttingen folgte 1993 die Promotion am Physik-Department der TU München.

Anschließend war er bis 1998 als Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin tätig. Sein Arbeitsgebiet: Dynamik der Molekül-Oberflächenwechselwirkung. Zwischendurch absolvierte Axel Groß einen sechswöchigen Forschungsaufenthalt am Naval Research Lab in Washington D.C.

Bis zu seinem Ruf nach Ulm wirkte er als Professor für Theoretische Physik/Oberflächenphysik am Physik-Department der TU München. Habilitiert hatte er sich 1999 an der TU Berlin.

Ein einmonatiger Forschungsaufenthalt führte ihn in diesem Jahr an die University of California at Santa Barbara zurück.