

"Good vibrations" im Nanobereich: Die Nachwuchsgruppe Theorie wird für drei weitere Jahre von der DFG finanziert

Die Nachwuchsgruppe Theorie des SFB 569 „Hierarchische Strukturbildung und Funktion Organisch-Anorganischer Nanosysteme“ erhält für weitere drei Jahre Finanzmittel der DFG. Unter der Führung von Dr. David M. Benoit entwickelt die Nachwuchsgruppe neue theoretische Methoden um die Vibrationsdynamik von Molekülen auf der Nanoskala zu beschreiben.

Die Art und Weise wie ein Molekül vibriert enthält wertvolle Informationen über die unterschiedlichen Bindungsstärken zwischen Atomen, und spiegelt damit den Aufbau des Moleküls wieder. In vielen Bereichen der Chemie und Physik wird die Schwingungsspektroskopie verwendet, um Einblicke in die Struktur von Molekülen zu gewinnen. Beispielsweise können seit neuestem Schwingungsspektren von Einzelmolekülen mit einem Tieftemperatur-Rastertunnelmikroskop aufgenommen werden (STM-IETS). Diese Methode ermöglicht die eingehende Untersuchung von sogenannten self-assembly (selbstorganisierten) Monoschichten auf Metalloberflächen. Forschungsgruppen in Ulm und andernorts arbeiten daran, solche Vibrationspektren für oberflächenadsorbierte Moleküle zu messen. Darüberhinaus werden im europäischen Verbund Experimente in den Biowissenschaften unternommen, um Modell-Proteine zu untersuchen, mit dem Ziel die schwache intermolekulare Wechselwirkung zwischen Aminosäuren zu verstehen, die für den Aufbau von biologischen Strukturen im Nanoskalenbereich verantwortlich ist. Die Interpretation solcher Experimente ist aufgrund der großen Zahl und Dichte an Linien im Vibrationspektrum schwierig, daher benötigen diese Untersuchungen Unterstützung durch theoretische Methoden zur Berechnung der Vibrationsdynamik.

Die neuen Modelle, die in der Nachwuchsgruppe Theorie entwickelt werden, nutzen leistungsstarke Supercomputer wie den vor kurzem installierten bwGRiD Computercluster des Kommunikations- und Informationszentrums (kiz) in Ulm. Mit Hilfe dieser Rechnungen können genaue und verlässliche Vorhersagen über die Vibrationsübergänge von Nanostrukturen getroffen werden. Derzeit ist dies

die einzige Methode, die in großem Umfang und in einer angemessenen Rechenzeit ermöglicht, Systeme von experimentell relevanter Größenordnung zu untersuchen. Momentan wird die Vorgehensweise verwendet, um das Vibrationsspektrum von auf einer Goldoberfläche adsorbiertem Mercaptopyridin vorherzusagen (s. Grafik). Dieses Projekt ist Teil einer Zusammenarbeit mit der Gruppe von Professor Paul Ziemann und Berndt Koslowski vom Institut für Festkörperphysik, wo STM-IET Spektren von selbstorganisierten Monoschichten gemessen werden und der Arbeitsgruppe von Professor Axel Groß vom Institut für Theoretische Chemie, wo die bevorzugten Adsorptionsstellen von organischen Molekülen auf Au(111) Oberflächen mit Hilfe von Dichtefunktionaltheorie bestimmt werden.

In der kommenden Finanzierungsperiode wird sich die Forschung auf die Entwicklung besserer und mit kürzerer Rechenzeit verbundener theoretischer Modelle zur Berechnung der Schwingungskorrelation konzentrieren, um verbleibende rechentechnische Engpässe zu überwinden, die bei der Behandlung großer Systeme auftreten. Diese Fortschritte, zusammen mit neuen Grid-basierten Berechnungsmethoden für Potentialhyperflächen, werden neue Einblicke in das dynamische Verhalten von großen Molekülen ermöglichen. Die ideale Kombination aus neuen Rechenmethoden und den modernsten Hochgeschwindigkeitsrechnern hier in Ulm wird ohne Zweifel zu neuen Erkenntnissen in dem Feld der Quantenvibrationsdynamik von Nanostrukturen führen.

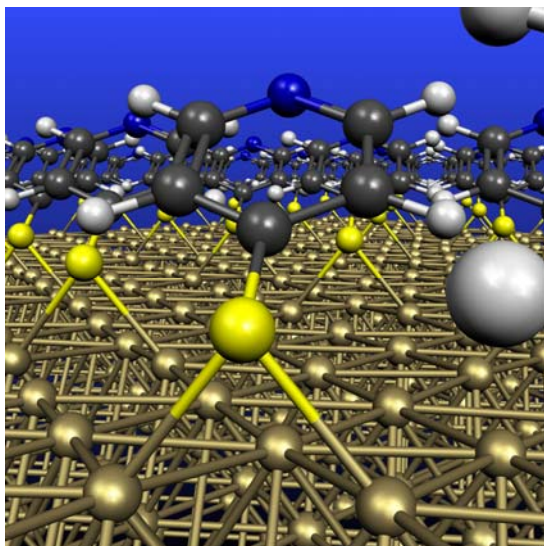


Abbildung: Mercaptopyridin-Moleküle adsorbiert auf einer Goldoberfläche