

Pressemeldung

23. Februar 2018

Atomares Design mit Wasser

Wissenschaftler am Max-Planck-Institut für Eisenforschung zeigen, wie sich mit Wasser geometrische Strukturen auf Oberflächen mit atomarer Präzision bilden lassen

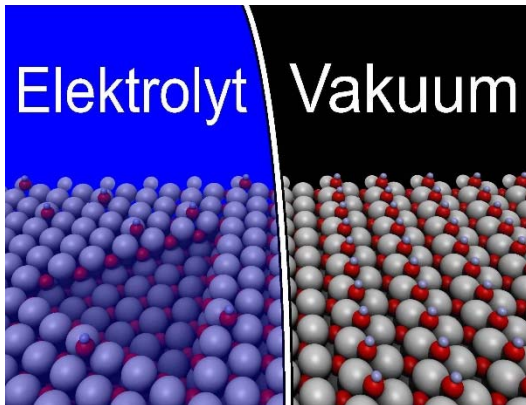
Ein zentrales Element bei so verschiedenen technologischen Fragestellungen wie dem Korrosionsschutz, Batteriematerialien, oder der Herstellung von Wasserstoff mittels Elektrolyse oder Brennstoffzellen ist die Kontaktstelle zwischen leitfähigen Elementen - dem Elektrolyt und der festen Elektrode an der eine Spannung angelegt wird.

Trotz ihrer Bedeutung für eine Vielzahl von Schlüsseltechnologien, weiß man bisher kaum etwas über den atomaren Aufbau der Grenzfläche zwischen Elektrode und Elektrolyten. Insbesondere die atomare Struktur der festen Elektrode hat entscheidenden Einfluss auf die chemischen Reaktionen, die an der Grenzfläche stattfinden. Wenn es gelingt die Struktur der Oberfläche gezielt auf der Skala einzelner Atome zu modifizieren, würde sich ein völlig neuer Ansatz eröffnen, um die zentralen chemischen Reaktionen gezielt zu beeinflussen.

Wissenschaftler in der Abteilung Computergestütztes Materialdesign am Max-Planck-Institut für Eisenforschung sind diesem Ziel ein großes Stück näher gekommen. Im Rahmen des Exzellenzclusters *RESOLV*, einer gemeinsamen Forschungsinitiative von sieben Forschungsinstituten im Ruhrgebiet, wurde mit Hilfe hochgenauer quantenmechanischer Methoden und mit leistungsfähigen Supercomputern ein unerwartetes Phänomen gefunden. Bisherige Untersuchungen von metallischen Oberflächen zeigten immer wieder, dass sich die Struktur einer Oberfläche beim Kontakt mit einem flüssigen Elektrolyten kaum verändert. Umso erstaunter waren die Wissenschaftler, als sie auf dem Computer eine Halbleiteroberfläche in Kontakt mit dem Elektrolyten brachten. „Wir waren völlig überrascht als sich Strukturen bildeten, die ohne den Kontakt mit Wasser instabil sind und auch nicht beobachtet werden“, berichtet Dr. Mira Todorova, Leiterin der Gruppe Elektrochemie und Korrosion. Auch Prof. Jörg Neugebauer, Leiter der Abteilung, zeigt sich begeistert: „Mit unseren Simulationsmethoden fanden wir nicht nur ein völlig neuartiges und unerwartetes Phänomen, wir konnten auch den zugrundeliegenden Mechanismus identifizieren. Dies eröffnet völlig neue Möglichkeiten Oberflächen mit atomarer Präzision zu gestalten und einzustellen.“

Die Untersuchungen liefern nicht nur neue Einblicke in Zukunftstechnologien, sondern bringen auch eine völlig neue Sichtweise auf eine in der Geologie intensiv diskutierte Frage: Die Ursache der erhöhten Rissbildung in Mineralien, wenn sie einer feuchten Umgebung ausgesetzt sind.

Die Arbeit wurde in der Fachzeitschrift *Physical Review Letters* veröffentlicht.



Die Abbildung zeigt wie Wasser die im Vakuum völlig glatte Oberfläche gestaltet. Durch die Einwirkung von Wasser bilden sich geometrische Strukturen aus, wie das auf der linken Seite gezeigte Dreieck. Graue Kugeln repräsentieren Zinkatome, rote Sauerstoffatome und blaue Wasserstoffatome. Bild: Suhyun Yoo, Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

Originalpublikation:

S. Yoo, M. Todorova and J. Neugebauer

Selective solvent-induced stabilization of polar oxide surfaces in an electrochemical environment

Physical Review Letters **120**, 066101 (2018)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.066101

(Editors suggestion)

Autoren der Pressemeldung: M. Todorova, J. Neugebauer

Die Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH (MPIE) betreibt Grundlagenforschung an Hochleistungsmaterialien, insbesondere metallischen Legierungen und verwandten Werkstoffen. Das Ziel ist einen Fortschritt in den Gebieten Mobilität, Energie, Infrastruktur, Medizin und Sicherheit zu erreichen. Das MPIE wird von der Max-Planck-Gesellschaft und dem Stahlinstitut VDEh finanziert. Auf diese Weise verbinden sich erkenntnisorientierte Grundlagenforschung mit innovativen, anwendungsrelevanten Entwicklungen und Prozesstechnologien.

Kontakt:

Yasmin Ahmed Salem, M.A.

Referentin für Presse- und Öffentlichkeitsarbeit

E-Mail: y.ahmedsalem@mpie.de

Tel.: +49 (0) 211 6792 722

www.mpie.de

