



TU Chemnitz

FGLA

Deutsche
Forschungsgemeinschaft

DFG

TP 1



FSU Jena

Molekulardynamik-Simulation von Struktur, Bildung und Reaktivität von Molekülen und Clustern

Gotthard Seifert, Technische Universität Dresden
Reinhard Scholz, Technische Universität München

In den Teilprojekt 1 der Forschergruppe haben wir Tieftemperaturprozesse zur Bildung von Kohlenstoffclustern und Kohlenwasserstoffen untersucht. Kohlenwasserstoffe als auch polyaromatische Kohlenwasserstoffe, lassen sich spektroskopisch im interstellaren Medium nachweisen und spielen eine wichtige Rolle bei physikalischen und chemischen Prozessen des interstellaren Mediums, z.B. Energiebilanz oder Kohlenstoffstaub-Bildung. Die Präkursoren für die Wachstumsprozesse von Kohlenwasserstoffen wurden anhand ihrer bekannten Häufigkeit im interstellaren Medium und ihrer Reaktivität ausgewählt.

Um die Wachstumsprozesse zu verstehen, wurden systematisch prozessrelevante chemische Reaktionen untersucht. Hierzu dienten Molekulardynamik-Simulationen auf der Basis einer approximativen Dichte-Funktional-Theorie-Methode. Die Ergebnisse solcher Molekulardynamik-Simulationen wurden in Form von Trajektorien bezüglich der auftretenden Mechanismen analysiert. Die Präzisierung der Mechanismen im Hinblick auf Energetik und Struktur geschah durch post-Hartree-Fock-Methoden.

Im Rahmen dieses Teilprojektes konnten so Ion-Molekül-Reaktionen von Präkursoren mit Kohlenwasserstoffen unterschiedlicher Größe (die Anzahl der Kohlenstoffe lag zwischen 5 und 24) eingehend hinsichtlich der Bildungsmechanismen aber auch der Reaktionsdynamiken untersucht werden. Von besonderem Interesse waren hier die Mechanismen zum Aufbau aromatischer Ringstrukturen. Es konnte gezeigt werden, dass eine Vielzahl von Präkursoren den Aufbau von Kohlenwasserstoffen als auch Aromaten bei Temperaturen unter 50 K ermöglichen. Die errechneten Reaktionsquerschnitte und –raten dieser Reaktionen können für die Modellierung interstellarer chemischer Reaktionsnetzwerke von großem Nutzen sein.

Im Hinblick auf astrophysikalische Fragestellungen könnte z.B. die Untersuchung zur Bildung von hydrierten amorphen Kohlenstoff oder Fullerenen ein zukünftiges Ziel sein. Die im Projekt entwickelte Methodik zur Analyse von unbekanntem chemischen Reaktionen bietet hierfür einen geeigneten Ansatz.