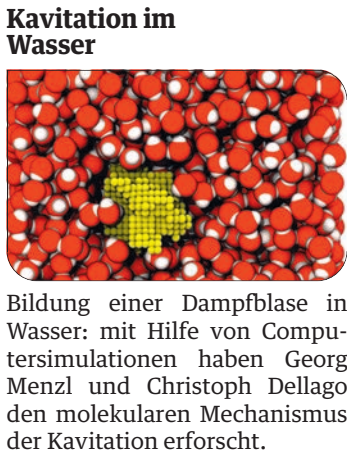


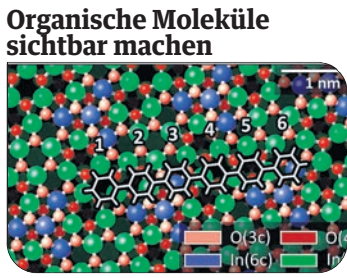
Grundlagenforschung in Österreich
Beispiele für FWF-geförderte Spitzenforschung



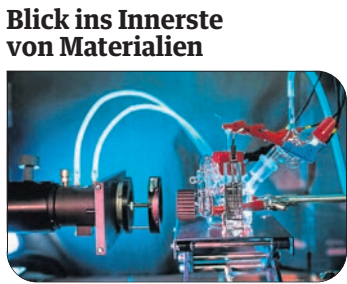
Kavitation im Wasser
Bildung einer Dampfblase in Wasser: mit Hilfe von Computersimulationen haben Georg Menzl und Christoph Dellago den molekularen Mechanismus der Kavitation erforscht.



Nanostruktur von Organik im Tonsteinen und Kohlen
Doris Gross nimmt Erdölmuttergestein aus 4.000 Metern Tiefe im Rasterelektronenmikroskop unter die Lupe. Dies liefert neue Erkenntnisse darüber, wie die Mikrostruktur der Organik in Tonsteinen und Kohlen das Erdölpotenzial beeinflusst.



Organische Moleküle sichtbar machen
Mit Unterstützung durch das Hertha-Firnberg-Programm erforscht Margareta Wagner im Rasterelektronenmikroskop kleinste Strukturen unterschiedlicher Oberflächen. Das Bild zeigt das Molekül Sexiphenyl (C₃₆H₂₆) auf In₂O₃(111).



Blick ins Innerste von Materialien
Die Materialchemikerin Nicola Hüsing untersucht platinfreie und platinarme Katalysatormaterialien. Gemeinsam mit ihrem Team entwickelt sie neue Materialien für die Reduktion von molekularem Sauerstoff, die als Basis für neue Energiespeichertechnologien dienen.

Einzelne Atome sehen und bewegen

Materialforschung. Mit High-tech-Geräten lassen sich kleinste Strukturen und sogar chemische Reaktionen sichtbar machen.

Die Idee, dass die Materie aus einzelnen Atomen aufgebaut ist, steht ganz am Anfang der Naturwissenschaft: „Nur scheinbar hat ein Ding eine Farbe, nur scheinbar ist es süß oder bitter; in Wirklichkeit gibt es nur Atome und leeren Raum“, formulierte im fünften Jahrhundert v. Chr. der griechische Philosoph Demokrit, der die Idee von seinem Lehrer Leukippos übernommen hatte. Wie man seit gut 100 Jahren weiß, ist der Name „Atom“ eigentlich falsch gewählt – das altgriechische Wort atomos bedeutet ja „unteilbar“. Heute ist klar, dass Atome aus noch kleineren Teilchen bestehen: Um einen Atomkern aus Protonen und Neutronen (die ihrerseits aus noch fundamentalen Teilchen zusammengesetzt sind) schwirren Elektronen, die einem Atom erst seine effektive Größe und Eigenschaften verleihen.

Die Existenz von Atomen war lange Zeit höchst umstritten – denn mit ihrer Größe von weniger als einem Nanometer (millionstel Millimeter) kann man sie nicht sehen. Oder besser gesagt: Man konnte sie die längste Zeit nicht sehen. Denn so unglaublich es auch klingen mag: Heute ist man in der Lage, einzelne Atome sichtbar zu machen. Und mehr noch: Man kann einzelne Atome sogar gezielt bewegen – und dabei auch noch zuschauen.

Die Faszination, die von diesen Möglichkeiten der modernen Naturwissenschaft ausgeht, wird sofort spürbar, wenn man mit Ulrike Diebold, Professorin für Oberflächenphysik am Institut für Angewandte Physik der TU Wien, spricht. Etwa wenn sie davon erzählt, wie man nicht nur einzelne Atome, die in einer Kristall-

struktur angeordnet sind, sichtbar machen kann, sondern auch chemische Reaktionen wie die Zersetzung eines Wassermoleküls direkt beobachten kann.

Das wird möglich durch eine trickreiche Erfindung namens „Rastertunnelmikroskopie“, international abgekürzt als STM. Dabei wird ein Metalldraht, der sich zu einer extrem feinen Spitze verjüngt, ganz knapp (einen halben Nanometer) und hochpräzise über eine Oberfläche geführt. An die Spitze wird ein Strom angelegt, so kann gemessen werden, wie groß der Abstand zur Oberfläche ist. „Unter idealen Bedingungen können individuelle Atome auf einer Oberfläche abgebildet werden“, so Diebold. Um ideale Bedingungen zu erzeugen, werden die Beobachtungen z. B. in einem Ultrahochvakuum durchgeführt, da selbst wenige Luftteilchen die Abbildung massiv stören würden. Bei manchen Experimenten wird die Probe auch extrem stark abgekühlt, um die Schwingungen der Atome zu dämpfen.

Damit aber nicht genug: Wenn man die Spitze noch näher zum Material bringt, kann man das System stören. Man kann dann quasi ein einzelnes Atom nehmen und an eine gewünschte Stelle bugsieren. Noch tiefere Einblicke in die atomare Struktur ermöglichen Rasterelektronenmikroskopie (AFM), die nach einem ähnlichen Prinzip arbeiten. Mit ihnen kann man sogar chemische Reaktionen sichtbar machen und bis ins Detail untersuchen. Diebold treibt in ihrem Wittgenstein-Preis-Projekt „Surface Science“ die Entwicklung noch besserer Methoden stetig voran.

Um mit solchen hochspezialisierten wissenschaftlichen Geräten

chemische Reaktionen sichtbar machen und bis ins Detail untersuchen. Diebold treibt in ihrem Wittgenstein-Preis-Projekt „Surface Science“ die Entwicklung noch besserer Methoden stetig voran.

Um mit solchen hochspezialisierten wissenschaftlichen Geräten

im Nanometerbereich arbeiten zu können, ist extrem viel Know-how notwendig. Bisweilen müssen auch banal erscheinende Hürden übersprungen werden. So werden z. B. die Mikroskope in Diebolds Labor im fünften Stock des Freizeithauses der TU Wien von den Straßenbahnen, die davor vorbeirumpeln, regelmäßig in Schwingungen versetzt. Um sich dadurch die Messgenauigkeit nicht ruinieren zu lassen, haben die Forscherinnen und Forscher kürzlich ein System entwickelt, bei dem die Geräte an Seilen aufgehängt werden – eine Methode, die man sogar zum Patent angemeldet hat.

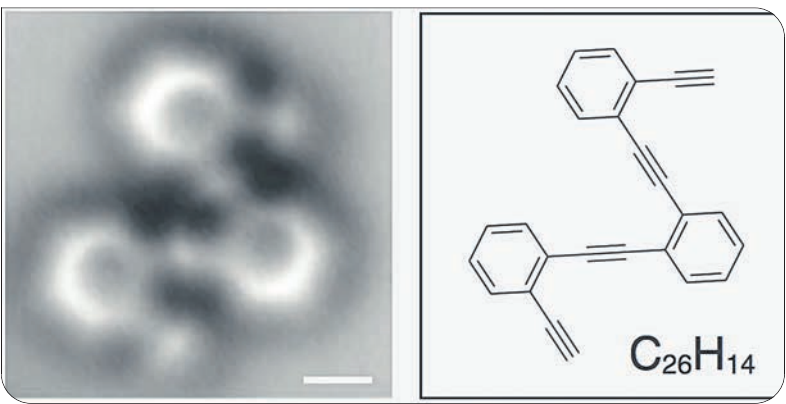
Erforschung von Oberflächen

Diebold nutzt die Geräte für die Erforschung von Vorgängen auf Oberflächen von Materialien: Praktisch alle Wechselwirkungen mit der umgebenden Welt spielen sich in den obersten paar Atomlagen eines Materials ab, erklärt sie: Dort reagiert eine Substanz z. B. mit Luftsauerstoff – Eisen rostet außen –, an der Oberfläche von Katalysatoren finden die gewünschten chemischen Reaktionen statt, und auch bei biologischen Materialien laufen dort viele wesentliche biochemischen Vorgänge ab.

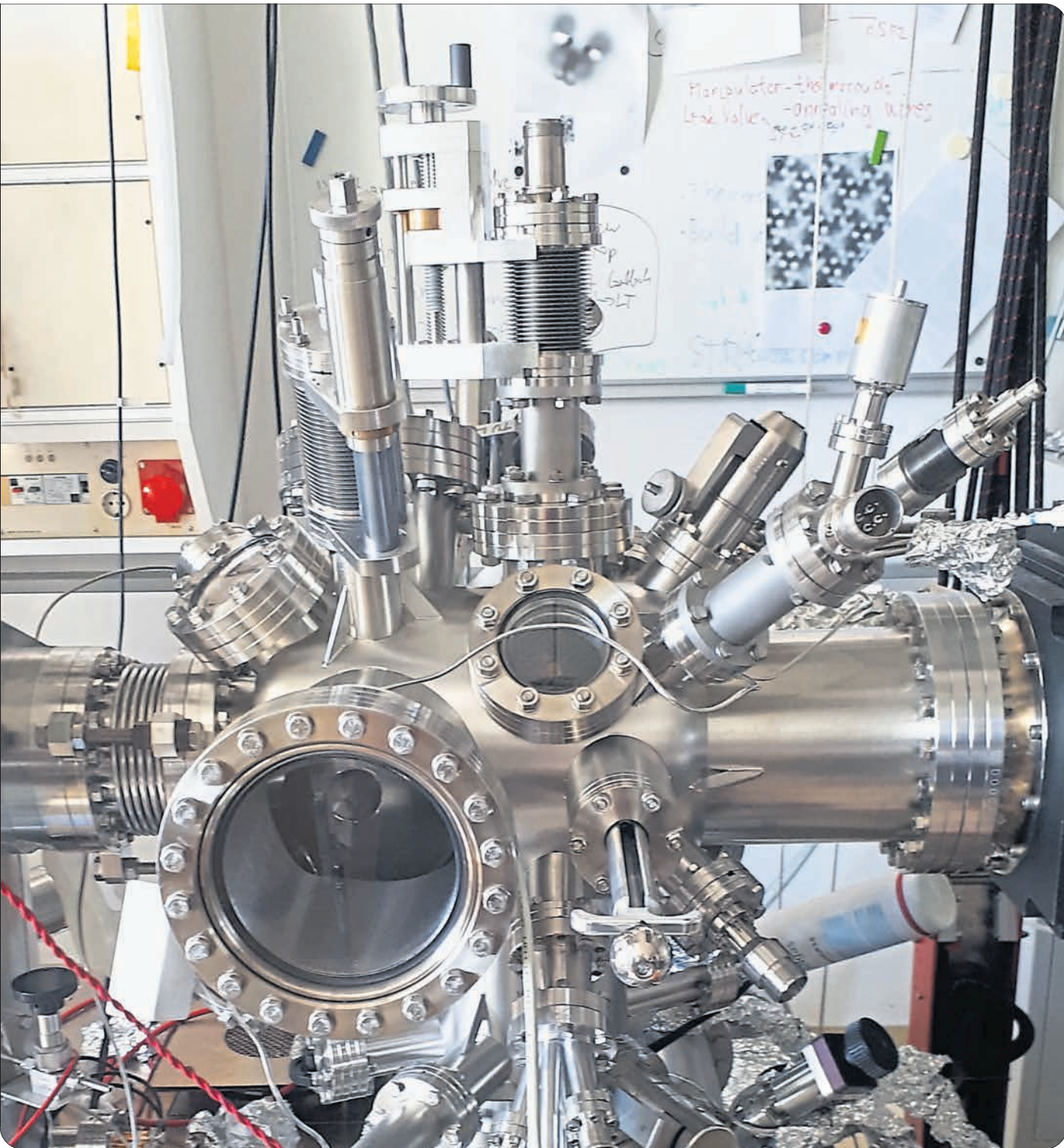
Das Spezialgebiet der Oberflächenphysikerinnen sind oxidierte Materialien, bei denen sie schon vor Jahren als erste zeigen konnte, dass man mittels Rastertunnelmikroskopie Materialdefekte auf einzelatomarer Ebene sichtbar machen kann – und dass chemische Reaktionen, die durch solche Fehler ausgelöst werden, Molekül für Molekül beobachtbar sind. Diese Forschung ist vor allem Grundlagenforschung. Sie bringt völlig neue Phänomene ans Licht, die bisher nicht beobachtet werden konnten. So zeigt sich beispielsweise, wie sich Atomgitter selbstständig zu neuen Nanostrukturen organisieren, wenn die Oberfläche gestört wird – etwa wenn ein Kristall zerbrochen wird. Kürzlich sind Forscherinnen und Forscher aus Diebolds Arbeitsgruppe auf eine Labyrinth-artige Struktur gestoßen, deren Wände exakt fünf Atome dick waren. „Eine sehr schöne Struktur“, merkt sie lächelnd an.

Theorie und Experiment

Zur Interpretation der Beobachtungen arbeiten die Experimentalphysiker sehr eng mit Theoretikern zusammen – unter anderem mit der Arbeitsgruppe „Computational Materials Physics“ von Georg Kresse an der Universität Wien, die zu den weltweit führenden Institutionen in diesem Bereich zählt (siehe Artikel unten). „Wir modellieren Sachen experimentell: Wir fabricieren zum Beispiel einen Defekt an einer Oberfläche und schauen,



Das Molekül sieht im AFM-Bild aus wie aus dem Lehrbuch.



Diese Apparatur sieht zwar auf den ersten Blick nicht aus wie ein Mikroskop – sie kann aber sogar Atome sichtbar machen.

was passiert“, erläutert Diebold. „Das gleiche machen die Kollegen im Computer: Sie berechnen, was sich dabei abspielt.“ Im Endeffekt handeln sich die beiden Seiten gegenseitig immer weiter, bis die beobachteten Phänomene durch die Modelle so gut erklärt werden können, dass Prognosen über bisher unbekannte Materialien möglich werden. „Wir versuchen das, im Experiment nachzubauen, und schauen, ob es wirklich funktioniert.“

Anwendung ist stets nahe

Trotz der Grundlagenorientierung dieser Forschungsarbeit ist es nie weit zu möglichen Anwendungen: Denn Reaktionen an Oberflächen sind auch für viele technisch wichtige Vorgänge grundlegend. Das beginnt bei Katalysatoren, mit deren Hilfe chemische Synthesen durchgeführt oder Abgase gereinigt werden, und reicht über Isolierstoffe und Supraleiter bis hin zu Brennstoffzellen und neuen Materialien für die Mikroelektronik.

Die Vision sei es, ein Material mit gewünschten Eigenschaften im Computer zu designen – z. B. ein besseres Material für eine Solarzelle – und dann zu überle-

gen, wie man die Atome zusammensetzen müsste, um dieses ideale Material zu realisieren, erklärt Diebold. „Auf diese Art will man vom Trial and Error, der in der Vergangenheit in der Materialforschung dominierte, ein bisschen wegkommen in Richtung einer rationaleren Materialwissenschaft“, so Diebold. Ihre Forschungsgruppe

ist in zahlreiche Kooperationen mit vielen verschiedenen Fachbereichen eingebunden.

So werden im Spezialforschungsbereich „Funktionelle Oxidoberflächen und Oxidgrenzflächen“ (FOXSI) unter der Leitung von Günther Rupprecht (Institut für Materialchemie der TU Wien) etwa bessere Materialien für Fest-

körper-Brennstoffzellen (SOFC) gesucht – diesen Energiewandlern wird eine große Zukunft bei der künftigen Energieversorgung zugesprochen. Dominik Eder ist an ebendiesem Institut auf der Suche nach besseren Fotokatalysatoren, die Wasser unter Lichteinfluss in Sauerstoff und Wasserstoff spalten – was eine sehr umweltfreundliche Art der Energiegewinnung wäre, die durch metallische Nanoteilchen möglich werden könnte.

Peter Weinberger ist am Institut für Angewandte Synthesechemie der TU Wien auf der Suche nach „schaltbaren Materialien“ – konkret: Eisenverbindungen, die unter dem Einfluss bestimmter Stickstoffverbindungen bei Raumtemperatur zwischen zwei verschiedenen Spin-Zuständen umschalten können und dadurch ihre magnetischen Eigenschaften verändern. Phänomene bei der Korrosion von Materialien hat Markus Valtiner, der im Vorjahr als Professor am Institut für Angewandte Physik der TU Wien berufen wurde, im Auge: Er untersucht die Vorgänge an der Grenzfläche zwischen Flüssigkeiten und festen oder weichen Oberflächen, wo unterschiedliche Moleküle miteinander reagieren. An neuen hochauflösenden Mikroskopietechniken zum Sichtbarmachen von molekularen Vorgängen sind auch die Biowissenschaften sehr interessiert. So erforscht z. B. der Biophysiker Gerhard Schütz die genaue Anordnung von Proteinen an Immunzellen, wenn diese körperfremde Proteine entdecken.

Rennen mit Molekülen

Ein faszinierendes Forschungsgebiet sind auch atomare und molekulare Motoren, also einzelne Moleküle, die dazu gebracht werden können, sich zu bewegen. Die Fortschritte in diesem Bereich – der 2016 mit einem Nobelpreis bedacht wurde – wurden im Vorjahr auch bei einem denkwürdigen Wettbewerb demonstriert: Bei der ersten Nanocar-Weltmeisterschaft traten sieben Forschergruppen an, um ein organisches Molekül auf einer Silberunterlage 300 Nanometer weit zu bewegen. Einen überlegenen Sieg erringen konnte eine Forschergruppe um Leonhard Grill vom Institut für Physikalische Chemie der Universität Graz, die sich für diese Art der „Nanomanipulation“ eines modernen Rastertunnelmikroskops bediente.

Wie trickreich die Natur Oberflächen gestaltet

Vorbild Natur. Durch spezielle Strukturen an Oberflächen werden Pflanzen wasserabweisend, in Gelenken gibt es weniger Reibung und Schmetterlingsflügel werden bunt. Langsam aber sicher kommt man dem Erfindungsreichtum der Natur auf die Spur.

Oberfläche spielen auch in der belebten Natur eine Schlüsselrolle: Bei allen Interaktionen zwischen Organismen, Geweben oder Zellen spielen Prozesse an der Kontaktfläche zur Umgebung eine Schlüsselrolle. Im Lauf der Evolution hat die Natur unzählige großartige Lösungen entwickelt, wie durch eine gezielte Strukturierung der Oberflächen gewisse Probleme gelöst werden. Und davon kann der Mensch viel lernen.

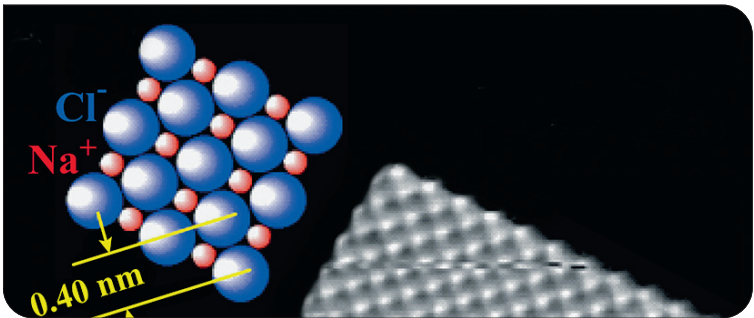
Diesem Leitgedanken folgend hat sich Ilie Gebeshuber in die Natur begeben – unter anderem sieben Jahre in den malaysischen Regenwald. Dort wurde sie in reichem Maße fündig. Das reicht von selbstreinigenden Flächen über Anhaftungsprozesse bis hin zu Biomaterialien mit ungeahnten Eigenschaften. Einer ihrer aktuellen Arbeitsschwerpunkte am Institut für Angewandte Physik der TU Wien sind sogenannte „Strukturfarben“: Die Natur nutzt zur Farbgebung nicht nur – wie der Mensch – Pigmente, sondern auch das Prinzip von „Strukturfarben“. Dabei wird



Ulrike Diebold

Pavillon kuratiert von *Pavillon curated by*
Ulrike Diebold
Ulrike Diebold ist Professorin für Oberflächenphysik am Institut für Angewandte Physik der Technischen Universität Wien. 2013 wurde sie vom Wissenschaftsfonds

(FWF) mit dem Wittgenstein-Preis ausgezeichnet. 2012 erhielt sie einen vom Europäischen Forschungsrat finanzierten ERC Advanced Grant.



Salzkristall als schematische Zeichnung und unter dem Mikroskop.

Reaktionen an Atomen

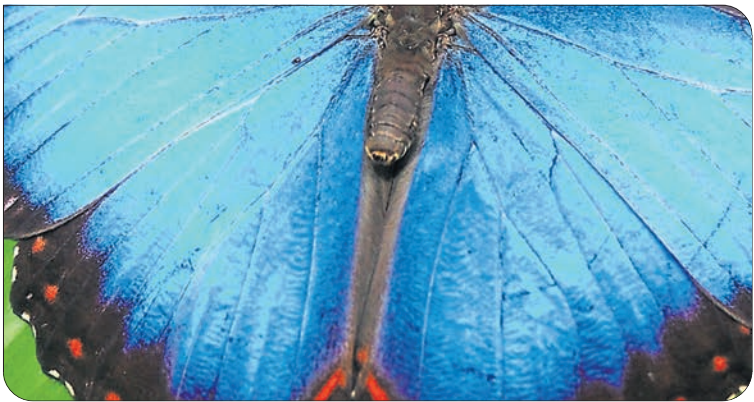
Katalysatoren sollen noch selektiver werden und weniger Nebenprodukte zulassen.

Katalysatoren sind das wichtigste Werkzeug der organischen Chemie: Rund 80 Prozent aller Chemikalien werden mit Hilfe von Katalysatoren hergestellt – von Treibstoffen über Medikamente bis hin zu Kunststoffen. Diese Substanzen ermöglichen, dass chemische Reaktionen leichter und schneller ablaufen können. Dabei treten die Reaktionspartner in Wechselwirkung mit Atomclustern, die sich an der Oberfläche der Katalysatoren befinden.

Im Normalfall sind Katalysatoren heterogen: Die reaktiven Zentren sind höchst unterschiedlich gestaltet, sodass sich an ihnen viele verschiedene chemische Reaktionen abspielen können. Schon seit langem wird versucht, die Oberfläche so zu strukturieren, dass alle Reaktionszentren gleich aussehen und der Katalysator dadurch sehr selektiv wirkt (und es kaum Nebenprodukte der chemischen Reaktion

gibt). Am homogensten wäre ein Katalysator, wenn die reaktiven Zentren von einzelnen Atomen gebildet würden. Das wäre überdies sehr materialsparend – Platin und andere häufig verwendete Materialien sind ziemlich teuer.

An solchen „Einzelatomkatalysatoren“ wird bereits gearbeitet. Etwa von Gareth Parkinson am Institut für Angewandte Physik der TU Wien. In seinem START-Preis-Projekt untersucht er ein Modellsystem, bei dem Kohlenmonoxid (CO) an einzelnen Platinatomen auf einer Eisenoxid-Schicht oxidiert wird. Dieser Katalysator kann relativ einfach verändert und an unterschiedliche Anforderungen angepasst werden. Durch Experimente und Modellrechnungen sollen maßgeschneiderte Einzelatomkatalysatoren für verschiedene chemische Reaktionen erstellt werden. Das Interesse der chemischen Industrie dafür ist sehr groß.



Schmetterlinge schillern in Strukturfarben.

flügeln in einer Art Matratze abgedrückt, deren Feinstruktur dann auf ein anderes Material übertragen wird – das dann dieselben optischen Eigenschaften bekommt wie das Vorbild aus der Natur.

Effekte ohne Chemie

Die Natur zeigt auch in vielen anderen Bereichen vor, was mit einer gezielten Strukturierung von Oberflächen alles möglich ist. Zum Beispiel bei den Reibungs- und Haftungseigenschaften von Oberflächen – ein Teilbereich, der unter dem Schlagwort „Biotribologie“ zusammengefasst wird. Auch hier finden

sich auf mehreren Größenordnungen (bis hinab in den Nanomaßstab) hochinteressante Oberflächenstrukturen, die – je nach Anforderung und Ziel – die Adhäsion erhöhen (etwa bei den Füßen von Geckos), die Reibung verringern (etwa in Gelenken), die Oberflächen schmutzabweisend machen oder verhindern, dass sich krankmachende Bakterien ansiedeln können. Es wurden sogar schon Strukturen, gefunden, die zwischen verschiedenen Reibungskoeffizienten hin- und herschalten können. Und das alles ohne Chemie.

Mit Beiträgen von *With contributions from*
Leonhard Grill
Peter Weinberger, Dominik Eder, Ilie Gebeshuber, Gerhard Schütz, Markus Valtiner