

Kurzbeschreibung HLRN-Großprojektantrag:

Struktur und Dynamik von Wasser und Lösungsmittelgemischen im Confinement

Christoph Allolio und Daniel Sebastiani¹

25. Januar 2011

Fachbereich Physik, Freie Universität Berlin,
Arnimallee 14, 14195 Berlin

Das vorliegende Projekt entspricht im wesentlichen dem Arbeitsplan für das erste Jahr aus dem Teilprojekts TP8 des DFG-Forschergruppenvorantrags (FOR 1583), der im Oktober 2010 von der DFG zur Vollantragstellung ausdrücklich empfohlen wurde. Der Koordinator der Forschergruppe ist Michael Vogel (TU Darmstadt).

Im Projekt sollen strukturelle, dynamische und spektroskopische Eigenschaften von Wasser und Mischungen wasserstoffbrückenbildender Fluide in Confinements auf atomarer und molekularer Ebene untersucht werden. Hierbei sollen insbesondere ab-initio Molekulardynamik-Simulationen zum Einsatz kommen. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf dem Einfluss des geometrischen Confinements auf spektroskopische Observablen (speziell NMR chemische Verschiebungen, NMR Linienformen und Kernspinrelaxationszeiten). Dieses Confinement ist eine Methode, um komplexere Umgebungseffekte zu modellieren, wie sie z.B. in biologischen Zellen existieren. Dort hat die Präsenz einer Vielzahl von gelösten Ionen und Peptiden einen starken Effekt auf die Wasserstoffbrückenstruktur, der im vorliegenden Projekt mittels des Confinements zu einem gewissen Grad nachgebildet werden soll.

Aus dieser Fragestellung heraus sollen aus unseren Simulationen strukturelle und dynamische Phänomene mit Hilfe spektroskopischer Parameter (Strukturfaktoren, NMR chemische Verschiebungen, im weiteren Verlauf auch Kernspin-Relaxationszeiten sowie IR Schwingungsfrequenzen) berechnet werden. Diese werden zeitnah von experimentellen Projektpartnern im Rahmen der Forschergruppe in speziell hierfür entwickelten Proben untersucht werden.

¹ daniel.sebastiani@fu-berlin.de; HLRN-code: becsebas