

Makroskopisches Problem - Mikroskopische Lösung

Waste water pollutant adsorption on amorphous TiO_2 surfaces

M. von Einem, S. Köppen, Hybrid Materials Interfaces Group, Universität Bremen

Kurzgefasst

- Wir wollen Impulse setzen um den Abbauprozess von Wasserverunreinigungen auf TiO_2 zu optimieren.
- Welche Wasserverunreinigungen kann TiO_2 zersetzen?
- Welche Umgebungsbedingungen werden dafür gebraucht?

Die Menschheit verschmutzt die Umwelt auf vielfältige Arten und Weisen. Deutlich sichtbar ist das an den Plastikinseln im Meer, an den verschmutzten Stränden und in den endlosen Müllhalden dieser Welt.

Unscheinbarer hingegen sind Verschmutzungen des Abwasser, die nicht mit bloßem Auge erkannt werden können. So sind in unseren Flüssen Spuren von Pestiziden, Medikamenten und alltäglichen Chemikalien von beispielsweise Kosmetika nachweisbar [1]. Viele von diesen Verbindungen können nicht mit herkömmlichen Prozessen entfernt werden. Deshalb ist es umso wichtiger neue Wege zu finden, diese nanoskopisch kleinen Verunreinigungen aus dem Wasser zu entfernen.

Titandioxid, ein Metalloxid bekannt als Bestandteil von Sonnencremes, Wand- und Lebensmittelfarbe [2], könnte eine mögliche Lösung bieten. Wissenschaftliche Experimente haben gezeigt, dass Titandioxid dazu in der Lage ist unter UV Einwirkung, z.B. durch Sonnenstrahlen, Wasserverunreinigungen abzubauen. Dabei wirkt es wie ein Katalysator, wird also in der Reaktion nicht verbraucht. Jedoch ist noch nicht genau bekannt, warum und unter welchen Bedingungen Titandioxid diese Eigenschaften besitzt.

In diesem Projekt widmen wir uns der Erforschung der Frage, wie der Abbau bestimmter Wasserverunreinigungen auf Titandioxid stattfindet. Dafür simulieren wir tausende von Atomen und Molekülen, um deren Interaktion sichtbar und somit verständlich zu machen.

Der Rechenaufwand für eine solche Simulation ist enorm. Die Simulationen sind hochkomplex und benötigen immense Hardware-Kapazitäten. Darum ist es wichtig, dass wir unsere Rechnungen in einem

Hochleistungsrechenzentrum wie dem HLRN durchführen können. Dort stehen genug Ressourcen zur Verfügung.

Unsere Simulationzelle (Abb. 1) beinhaltet eine Titandioxidoberfläche auf die Wasser gefüllt wird, welches beispielsweise mit Ibuprofen oder Koffein verunreinigt ist. Wir möchten zuerst beobachten, ob sich die Verunreinigungen der Oberfläche nähern. Wenn sie sich an die Oberfläche setzen, schauen wir genauer hin. Die anschließende Frage ist, ob und in welche kleineren Moleküle die Verunreinigung gespalten werden kann.

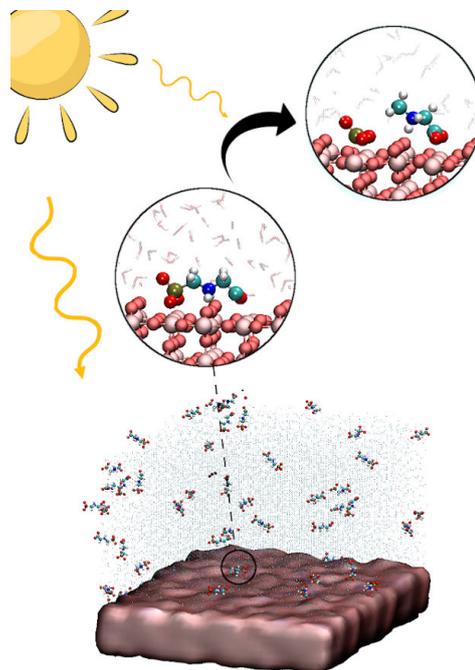


Abbildung 1: Spaltung einer Wasserverunreinigung auf einer Titandioxidoberfläche unter Einstrahlung der Sonne (UV-Licht).

Um zu schauen, wann Titandioxid am besten Wasserverunreinigungen abbauen kann, verändern wir die Umgebungsbedingungen, wie beispielsweise verschiedene pH Werte [3]. Finden wir nun Wasserverunreinigungen und wie sie abgebaut werden können, geben diese Ergebnisse Hinweise darauf, wie neue Verfahren ausgelegt werden müssen, um unser Abwasser mit Hilfe von Titandioxid noch besser reinigen zu können.

WWW

<https://rtg-qm3.de/research/p6>

Weitere Informationen

[1] Dsikowitzky, L., Schwarzbauer, J., Kronimus,

A., Littke, R. *Chemosphere* **57**, 10 (2004). doi:
doi.org/10.1016/j.chemosphere.2004.08.052

[2] National Center for Biotechnology Information (2022). PubChem Compound Summary for CID 26042, Titanium dioxide. Retrieved April 28, 2022 from <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Titanium-dioxide>.

[3] Jallouli, N. and Elghniji, K. and Tra-
belsi, H. and Ksibi, M. *Arabian Jour-
nal of Chemistry* **10** (2017). doi:htt-
ps://doi.org/10.1016/j.arabjc.2014.03.014

Projektpartner

Theoretische Chemie, Universität Bremen; Theoreti-
sche Chemie, Carl von Ossietzky Universität Olden-
burg; Statistical Physics of Complex Matter, Univer-
sität Barcelona

Förderung

DFG GRK 2247: Quantum Mechanical Materials
Modelling - QM³