

Die Hybridgrenzfläche zwischen Metallocyd und Polymer ist bedeutsam für Fügetechnik, Schutzbeschichtungen und Hybridmaterialien. Chemisches Verständnis von Grenzflächeneigenschaften und -chemie sind Voraussetzung für technologischen Fortschritt. Computersimulationen sind geeigneter für deren Verständnis als experimentelle Beobachtung. Existierende quantenmechanische Methoden können die notwendigen Modellgrößen nicht behandeln. Techniken zur Kopplung verschiedener Simulationsmethoden zur Reduktion des Rechenaufwands sind in der Biophysik verbreitet, können aber so nicht auf polare Festkörper angewandt werden. Mit Dichtefunktionalbasiertem Tight-Binding als QM-Methode, wurden bestehende QM/MM Schemata an polare Festkörper angepasst. Behandlungen der QM/MM-Grenze wurden aus der Biophysik angepasst und neue Methoden zur Behandlung von Ladungsartefakten in polaren Medien entwickelt. Der QM/MM Ansatz spart >90% an Rechenzeit. Adhäsion von Polymeren auf Aluminiumoxyd ist entscheidend in Automobil- und Luftfahrtindustrie. Chemisorptionsenergien- und Barrieren in einem Modellklebstoff wurden berechnet. Die Resultate stimmen mit experimentellen Ergebnissen überein und erklären die Wirkung des Haftvermittlers: ihm stehen mehr Adsorptionsplätze als den anderen Komponenten zur Verfügung, was die Dichte an kovalenten Bindungen zum Substrat erhöht. Die neuen Möglichkeiten der QM/MM Simulation erlauben, Umgebungseffekte zu berücksichtigen. Erste Ergebnisse zeigen dass Wasser einen großen Einfluß ausübt.