

Ultrakurze Laserpulse: wie sie helfen die Geheimnisse heterogener Katalyse zu entschlüsseln

R. Scholz, G. Floß, G. Fuchsel, I. Loncaric, J. I. Juaristi, P. Saalfrank

Die Bedeutung von heterogener Katalyse kann kaum überschätzt werden. Nicht nur in der chemischen Industrie ist sie allgegenwärtig, auch in der Umwelttechnik spielt sie eine zentrale Rolle.

Trotzdem sind viele katalytische Systeme auf mikroskopischer Ebene nicht im Detail verstanden. Ein solches tieferes Verständnis wäre äußerst hilfreich für die gezielte Verbesserung und Neuentwicklung von Katalysatoren.

Viele Rätsel birgt insbesondere die Bindung von Adsorbaten an Metalloberflächen, wo der Einfluss der sogenannten “elektronischen Reibung” immer mehr Beachtung in der Forschung findet. Bei diesem Phänomen handelt es sich um Wechselwirkungen der Adsorbate mit dem quasi-freien Elektronengas des Metalls.

Durch Laserpulse im Femtosekundenbereich ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) kann dieses Phänomen experimentell untersucht werden.

Trifft ein solcher Laserpuls eine Metalloberfläche, wird diese in einen Zustand mit zwei verschiedenen Temperaturen versetzt: das Elektronengas ist dann für kurze Zeit (ca. 1 ps) sehr viel heißer (mehrere 1000 K) als das Ionengitter des Metalls. Infolge der elektronischen Reibung, wird ein Teil der Energie an die adsorbierten Moleküle bzw. Atome abgegeben, so dass diese zum Beispiel desorbieren oder Reaktionen eingehen. Entscheidend dabei ist: die Adsorbate verhalten sich anders als bei konventionellem Erhitzen der Metalloberfläche.

Simulationen ermöglichen tiefgehende Einblicke in diese lasergetriebene Dynamik und helfen die Adsorbat-Metall-Bindung genauer zu verstehen. In diesem Vortrag wird dies an einem Beispiel erläutert (Kohlenmonoxid adsorbiert auf Ruthenium).

