

# Ultrakurze Laserpulse:

wie sie helfen die Geheimnisse heterogener Katalyse zu  
entschlüsseln

Robert Scholz

AG Saalfrank  
Institut für Chemie  
Universität Potsdam

19. April 2017

# Motivation: Die Bedeutung heterogener Katalyse

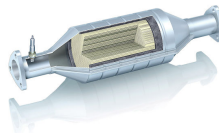
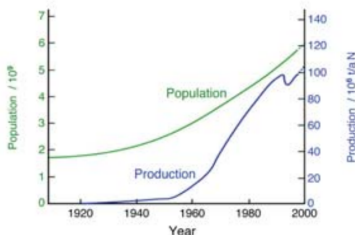
## Chemische Industrie

- Düngemittel
  - Haber-Bosch-Verfahren ( $\text{NH}_3$ )
  - Ostwald-Verfahren ( $\text{HNO}_3$ )
- Monomere
  - Ethylenoxid, Acrylsäure, Styrol

## Umwelttechnik

- Luftreinhaltung
  - Abgaskatalysatoren
  - Rauchgasentstickung
- Biokraftstoffe
  - Fischer-Tropsch-Synthese

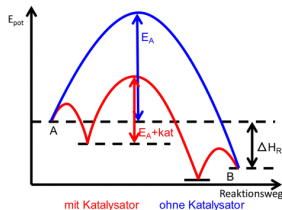
World population and ammonia production



# Heterogene Katalyse: Begriffsklärung

## Katalyse

- Aktivierungsenergie kleiner  
⇒ Reaktionen schneller
- auch wichtig: Selektivität  
(z.B. keine Durchoxidation)



## Heterogen

- verschiedene Phasen, meist:
  - Katalysator fest
  - Reaktanden gasförmig / flüssig

# Prinzipieller Mechanismus heterogener Katalyse

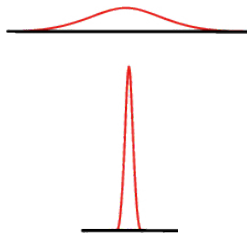
# Besonderheiten von Metall-Adsorbat-Systemen

# elektronische Reibung

# Ultrakurze Laserpulse

## Einteilung

- Pikosekundenlaser
  - $1 \text{ ps} = 10^{-12} \text{ s}$
  - ab  $\approx 1 \text{ ps}$  Pulsdauer
- Femtosekundenlaser
  - $1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$
  - typische Pulsdauer: 50 - 200 fs
- beide: Spitzenleistung  $\gg$  cw-Laser



## Erforschung elektronischer Reibung

- Warum reichen ps-Laser nicht?
- Was macht fs-Laser besonders?

?

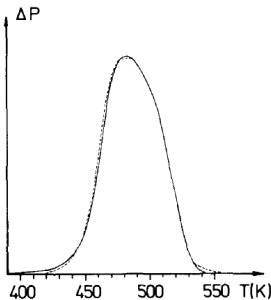
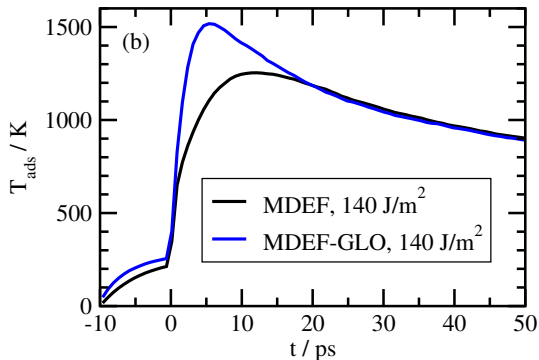
# Wirkung von fs-Lasern auf Metalle



# Wirkung hoher Elektronentemperatur auf Adsorbate

# Beispiel CO auf Ru - Diffusion nach Laseranregung

# Beispiel CO auf Ru - Adsorbattemperatur



## simulierte Adsorbattemperatur $T_{\text{ads}}$

- über je 20000 Trajektorien gemittelt
- Vorsicht: keine "richtige" Temperatur (Verteilung der Energie evtl. anders)

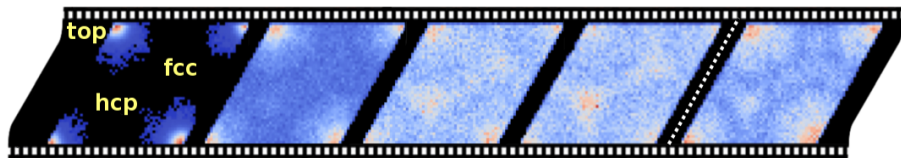
## TPD-Spektrum

- Desorption bereits ab 450K erwartet

# Beispiel CO auf Ru - Lasergetriebene Desorption

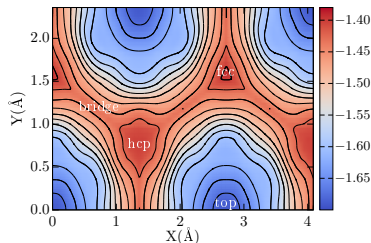


# Beispiel CO auf Ru - “dynamischer Fallen-Effekt”



## Überraschende Muster in XY-Ebene

- vor Laser: alle Moleküle auf **top**
- nach 5 ps: **hcp**-Stelle bevorzugt obwohl lokales Maximum!  
⇒ “dynamical trapping”
- 30 ps: wieder abgekühlt  
⇒ **top**-Stelle wieder favorisiert



# Zusammenfassung und Ausblick

# Danksagung