

Dynamik auf Katalysatoroberflächen am Beispiel von Wasserstoff auf Molybdändisulfidoberflächen

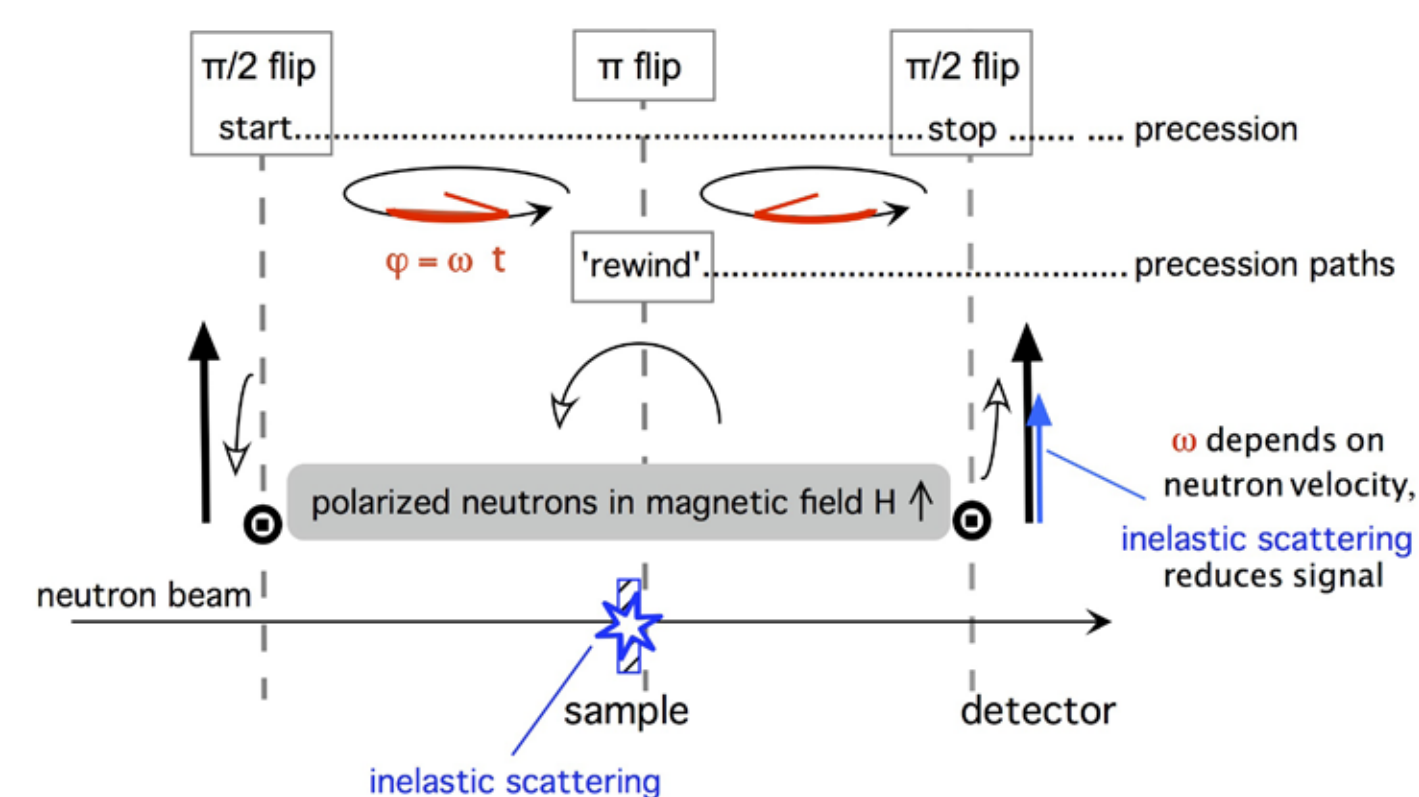
Autorin: Franziska Traeger

Wasserstoff ist ein Reaktionspartner bei vielen chemischen Reaktionen, beispielsweise bei der Wasserbildung oder -spaltung im Zusammenhang mit PEM-Brennstoffzellen oder bei Hydrierungsreaktionen organischer Verbindungen. Molybdändisulfid (MoS_2) ist als Katalysator in beiden Bereichen mindestens im Entwicklungsstadium. Das vorgestellte anlaufende Promotionsprojekt beschäftigt sich mit der Aufklärung des katalytischen Mechanismus und der Faktoren, die die Reaktivität beeinflussen.

Dazu werden spezialisierte Methoden eingesetzt, die direkt oder indirekt auf Wasserstoff empfindlich sind. Mit neutronenbasierten Methoden hat man vor allem Zugang zur Dynamik des Systems, sowohl den Schwingungen der Oberfläche und der Adsorbate als auch der Diffusionsbewegung von Wasserstoff.

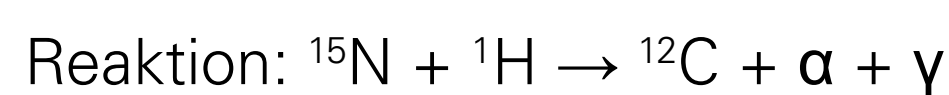
Methoden

Neutronen-Spinecho-Spektroskopie und andere neutronenbasierte Methoden am Institut Laue-Langevin, ILL, Grenoble; (Johannes Küchle, Peter Fouquet)



Schematische Darstellung des Spinecho-Prozesses

Kernreaktionanalyse am RUBION, Zentrale Einrichtung für Ionenstrahlen und Radionuklide Ruhr-Universität Bochum; (Hans-Werner Becker, Detlef Rogalla).

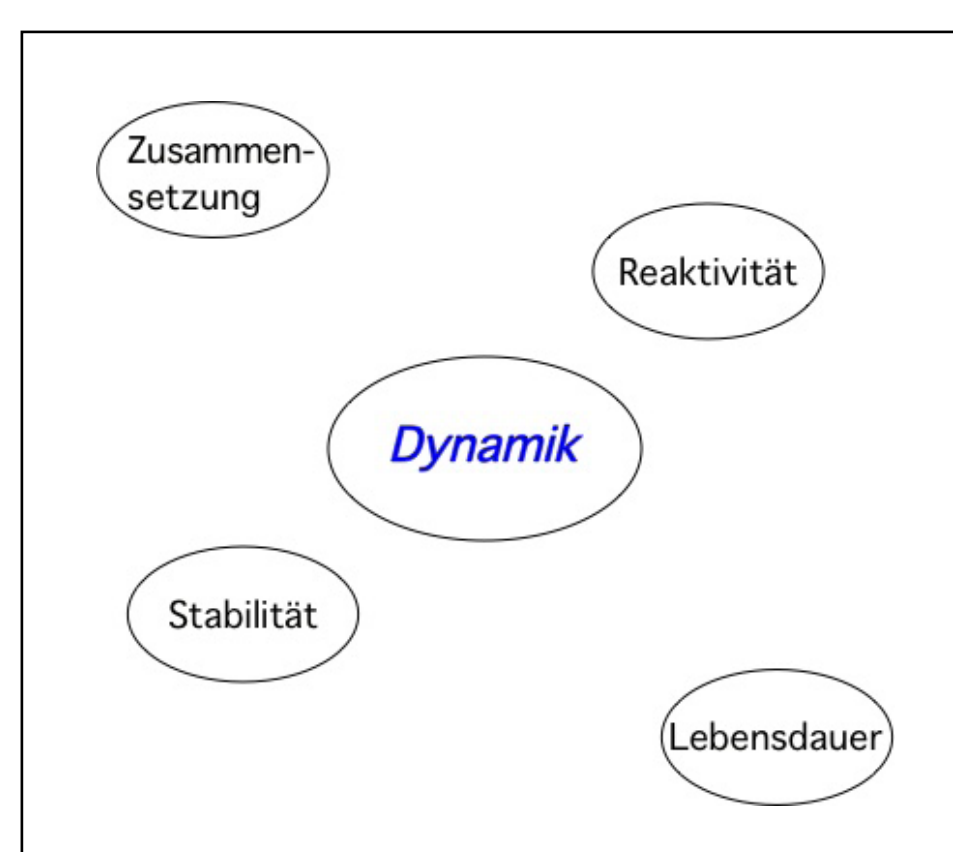


Röntgenphotoelektronenspektroskopie am Synchrotron BESSY II, HZB Berlin; (Thomas Strunskus, Eva Kovacevic).

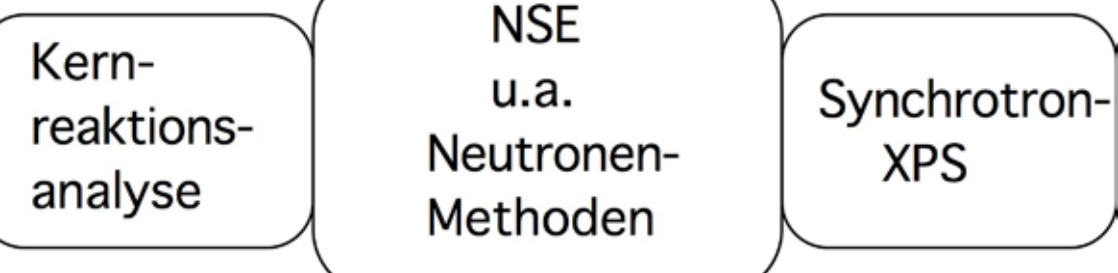
Methoden: XPS und NEXAFS

Probenvorbereitung und elektrochemische Charakterisierung an der Westfälischen Hochschule

Motivation für Studien dieser Art

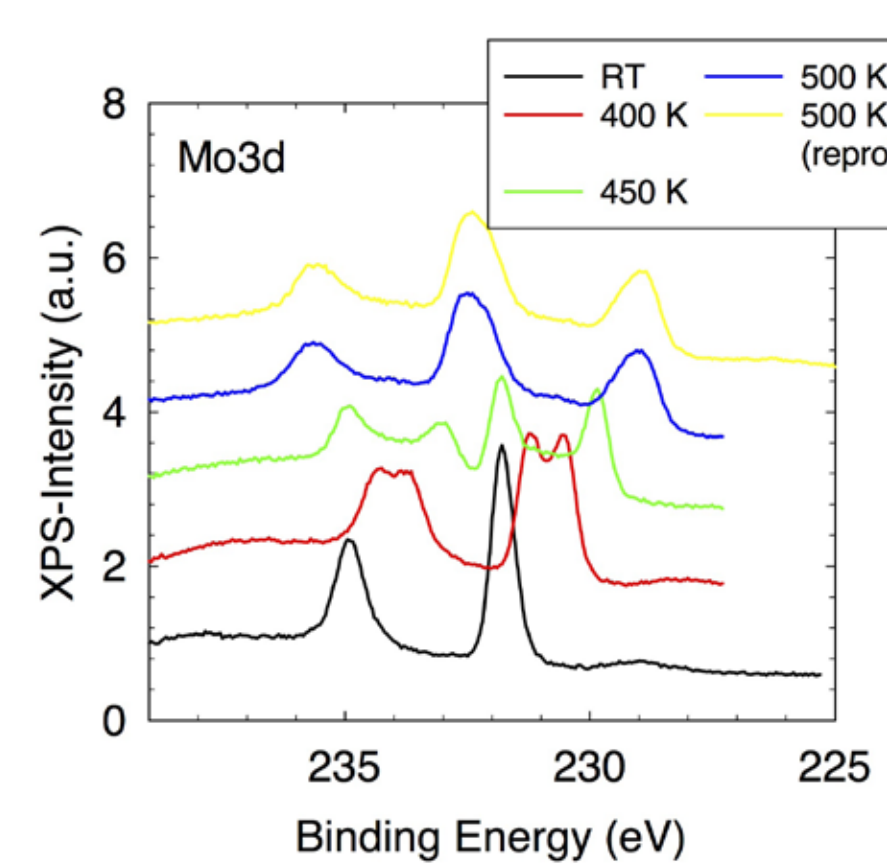


Dynamik als Schlüssel zur Reaktivität.

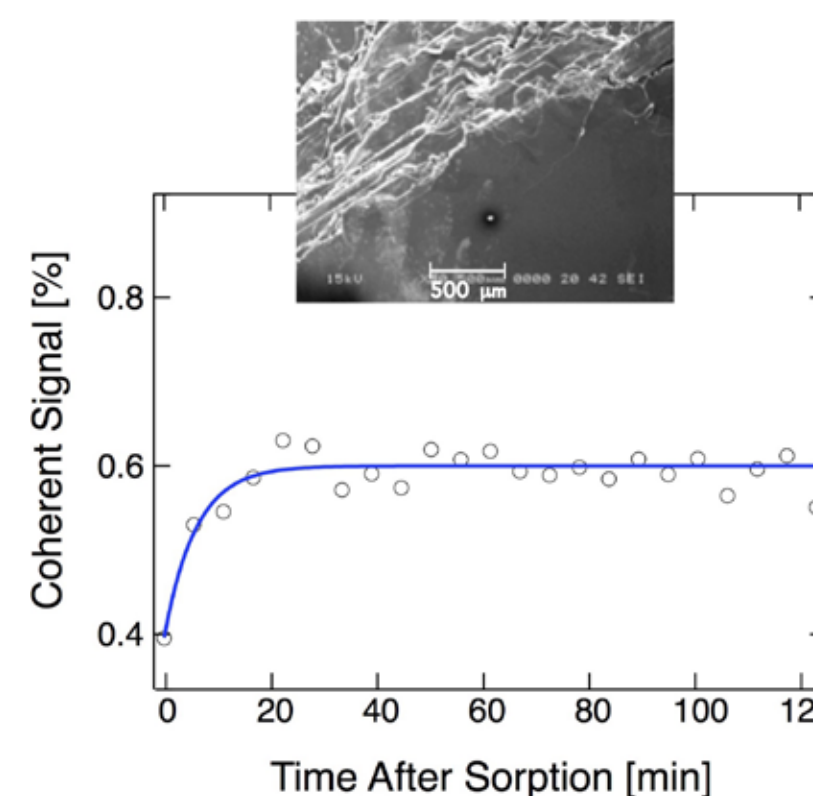


Nur wenige Methoden sind empfindlich auf Wasserstoff.

Ergebnisse (Beispiele)

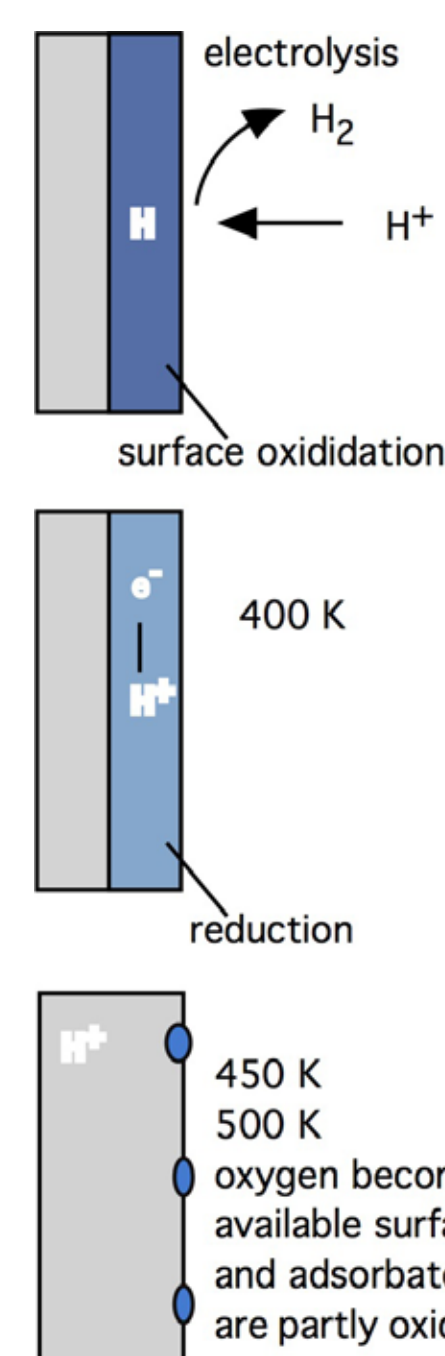


Photoelektronenspektroskopie bei verschiedenen Temperaturen zeigt, wie das Molybdän auf der Oberfläche an der Reaktion teilnimmt.



Neutronen sind auch empfindlich auf den Spinzustand eines H_2 -Moleküls. Die Konversion von ortho- zu para-Wasserstoff bei 20 K verläuft auf MoS_2 wesentlich schneller als auf Carbon-Aerogel.

Zusammenfassung



Bausteine für die Reaktivität

- Schnelle Diffusion entlang der Oberfläche.
- Schnelle ortho-para-Konversion bei 20 K.
- Sorption von Wasserstoff bei 500 K, langsame Diffusion großer Mengen Wasserstoff unter die Oberfläche auch bei Raumtemperatur.
- Temperaturabhängige Redoxreaktionen an der Oberfläche

Redoxreaktionen nach Beladung mit Wasserstoff sind stark temperaturabhängig.