

Erfolge und Perspektiven der Untersuchung katalytischer Prozesse unter realen Bedingungen an Einkristalloberflächen von Eisenoxiden

W. Weiss, M. Ritter, D. Zscherpel, R. Schlögl

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin

Die chemische Technologie verlangt heute mehr denn je nach energie- und stoffoptimierten Prozessen. Dafür sind optimierte heterogene Katalysatoren eine Grundvoraussetzung, ohne die reaktionstechnische Verbesserungen unvollständig bleiben müssen. Der empirische Weg der Katalysatorentwicklung war bisher der einzig gangbare, obwohl die Oberflächenwissenschaften enorme Fortschritte verzeichnen konnten. Es existiert auch heute noch eine Lücke zwischen Katalysatorentwicklung und Katalysatorforschung, die von prinzipiellen wie von praktischen Problemen bestimmt ist.

Am Beispiel der Dehydrogenierung von Ethylbenzol über Eisenoxiden wird aufgezeigt, welche Möglichkeiten wir heute zur konkreten Überwindung der Wissenslücke haben. Dabei wird allein auf experimentelle Methoden abgestellt, da eine rigorose theoretische Behandlung gegenwärtig nicht möglich scheint.

Zunächst wird am realen technischen System die Frage nach der optimalen Modellsubstanz behandelt. Dann folgt die Darstellung einer mechanistischen Arbeitshypothese, die sich rein auf makroskopische Beobachtungen stützt. Danach folgt eine Beschreibung der präparativen Möglichkeiten zur Erzeugung strukturell und chemisch wohldefinierter Einkristallfilme von Eisenoxiden. Wir sind in der Lage, alle drei bekannten Phasen binärer Eisenoxide in einer Kristallorientierung als stabile Unterlage für Reaktionsexperimente darzustellen.

Schließlich wird über den Stand der Reaktionsexperimente berichtet. Neben Chemisorptionsexperimenten, die verschiedene energetisch stark unterschiedliche Adsorptionsplätze ausweisen, werden auch Reaktionsexperimente behandelt. Eine besondere Aufmerksamkeit wird der Rolle der Gitterbaufehler, die mit atomarer Auflösung erkannt werden können, geschenkt werden. Es kann davon ausgegangen werden, daß die Gitterbaufehler der Oberfläche die reaktiven Zentren des Katalysators darstellen. Offen bleibt, ob diese Zentren die selektive Dehydrogenierung bewirken, oder ob sie die Folgereaktionen zu Ruß bevorzugt katalysieren.