



MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT



DPG-Frühjahrstagung 04.-09.03.2005, Berlin

Abstract (angenommen 10.11.2004)

## DFT-Rechnungen zur Adsorption und Dissoziation von Wasser auf $\text{Fe}_3\text{O}_4(111)$

Wolfgang Ranke<sup>a,\*</sup>, Maria E. Grillo<sup>b</sup>, Carsten Menke<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Fritz-Haber-Institut der MPG, Faradayweg 4-6, D-14195 Berlin, Germany

<sup>b</sup>Accelrys GmbH, Inselkammerstr. 1, D-82008 Unterhaching, Germany

Die  $\text{Fe}_3\text{O}_4(111)$ -Oberfläche ist regulär mit  $\frac{1}{4}$  ML Eisen über einer vollen Sauerstofflage terminiert. Die anfängliche Adsorption von Wasser verläuft ungewöhnlich, nämlich dissoziativ [1,2] und ohne Aktivierungsschwelle [1]. DFT-Rechnungen zeigen, dass die Dissoziation über einen molekular auf Fe gebundenen Zwischenzustand erfolgt. Die OH-Gruppe bleibt auf diesem Platz während das abgespaltene H-Atom über zwei konkurrierende Wege zum übernächsten O-Platz gelangt, wo es eine strukturell unterschiedliche zweite OH-Gruppe bildet, in voller Übereinstimmung mit IRAS-Messungen [2]. Nach Sättigung dieser gamma-Spezies adsorbiert weiteres Wasser (beta-Spezies) molekular über Wasserstoffbrücken zu den beiden OH-Gruppen. Deren Bindungen zum Substrat bleiben erhalten sodass die gebildeten Aggregate nicht einem konventionellen Wasser-Dimer entsprechen. Die mögliche Rolle einer solchen Anordnung für die Aktivierung von Wasser in katalytischen Prozessen wird diskutiert.

[1] Y. Joseph et. al., J. Phys. Chem. B 104 (2000) 3224.

[2] U. Leist et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 5 (2003) 2435.

\* Corresponding author: e-mail [ranke@fhi-berlin.mpg.de](mailto:ranke@fhi-berlin.mpg.de), phone +49 30 8413 4523, fax +49 30 8413 4401