Dansk overfladefysik

Jens Kehlet Nørskov, Laboratoriet for Teknisk Fysik, DTH og Ib Alstrup, Haldor Topsøe A/S

Overfladefysik beskæftiger sig med det, der foregår i de yderste atomlag af et fast stof. Det har gennem de sidste tyve år været den hurtigst voksende del af fysikken, og interessen er fortsat stigende. Hvorfor, kan man spørge. Svaret afhænger meget af hvem, der svarer. Mange opfatter overfladen som en defekt ved det perfekte faste (eller flydende) stof, og er interesseret i, hvordan overfladen påvirker resten af materialet. For andre er overfladen et sted, hvor man kan studere fysik i to dimensioner. Men for de fleste er overfladen interessant, fordi der her er en række nye fænomener, der ikke har paralleller i det faste stof eller i gasfasen uden for overfladen. Man kan sige at overfladen danner grænselaget mellem faststoffysikken og kemien, og af samme grund er der både fysikere og kemikere, der arbejder inden for området. Overfladen er således hjemsted for en række meget komplekse fænomener og er derfor en udfordring til vores atomistiske beskrivelse.

Det hører med til den betydning, overfladefysikken har i dag, at den omfatter en lang række teknisk vigtige fænomener. Heterogen katalyse er basis for størstedelen af den kemiske industri og tillige et af de vigtigste midler til forureningsbekæmpelse (bilkatalysatorer med videre). Heterogen katalyse består i, at en kemisk reaktion, der kun foregår langsomt af sig selv, kan få en voldsomt øget hastighed ved at reaktanterne bindes til en overflade og så reagerer der. Inden for halvlederteknologien spiller overfladerne en stor rolle. Jo mindre de elektroniske komponenter bliver, jo større effekt får overfladen på dens egenskaber. Overfladen spiller også en afgørende rolle inden for materialeteknologien. Det er ved overfladen, at et materiale gror eller korroderes, og overfladens egenskaber er selvsagt medbestemmende for et materiales friktions- og slidegenskaber.

I Danmark er en væsentlig del af overfladefysikforskningen samlet indenfor et *Center* under det *Materialeteknologiske Udviklingsprogram*. I centeret forsøger vi at dække hele spektret fra grundforskning til tekniske anvendelser. Centeret har deltagere fra Københavns, Odense og Aarhus Universitet, Danmarks Tekniske Højskole, Risø og fra Haldor Topsøe A/S. På grundforskningssiden går forskningsindsatsen fra bestemmelsen af den geometriske struktur af rene overflader og af overflader med adsorberede fremmede atomer og molekyler, over studier af hvordan atomer og molekyler bevæger sig ved overfladen, til studier af hvordan kemiske reaktioner foregår på en overflade. På den tekniske side er det foreløbig primært anvendelserne inden for heterogen katalyse, der forskes i inden for centeret. Studierne inkluderer bestemmelser af katalysatorernes struktur samt studier af kemiske reaktioner på katalysatorerne.

Den bærende ide inden for centeret er, at hvis vi i detaljer forstår, hvordan en kemisk reaktion forløber på en given overflade, og specielt hvad det er for parametre (overfladestruktur, elektronstruktur med videre), der bestemmer reaktiviteten, er chancen for at pege på nye katalytiske materialer øget væsentligt. For at opnå en sådan forståelse er det vigtigt at vide, hvordan tekniske katalysatorer egentligt ser ud på det atomare niveau, og specielt hvilken del af overfladen det er, der er katalytisk aktiv. Når vi ved det, kan vi lave en modelkatalysator, hvilket vil sige en overflade, typisk en énkrystaloverflade, der er velkarakteriseret med hensyn til struktur og de atomer og molekyler, der sidder bundet til den. Vi kan så begynde at studere simple dele af de kemiske reaktioner vi er interesserede i på modelkatalysatoren. Det involverer bestemmelse af, hvad der sidder på overfladen (reaktanter, produkter og intermediære forbindelser), og af hvor det sidder, men selvfølgelig også studier af reaktionernes dynamikken, eller tidsudviklingen af forskellige processer på overfladen. Efter i mange år at have været centreret primært omkring de *statiske* forhold på overfladerne, er de fleste nye udviklinger inden for overfladefysikken netop inden for studier af *dynamiske* forhold. Det involverer blandt andet en detaljeret forståelse af vekselvirkningerne i disse systemer, da det er disse, der bestemmer hvor et givet atom bevæger sig hen og hvilke barrierer, det møder på sin vej. Men det involverer også en forståelse af hvordan atomer, der bevæger sig uden for et fast stof kobler til vibrationerne og de elektroniske eksitationer i materialet. For at kunne opbygge de fysiske modeller, der er nødvendige for at besvare det centrale spørgsmål om hvilke overfladeegenskaber, der er bestemmende for reaktiviteten overfor en bestemt kemisk reaktion, er det afgørende, at studierne foregår i et tæt samspil mellem eksperimenter og teori.

Når der er opbygget et billede af hvordan en givet kemisk proces forgår, skal det sammenlignes med målinger på tekniske systemer. Det kræver en model der sammenkæder det *mikroskopiske billede* med den *makroskopiske virkelighed*. Dette intermediære trin er en såkaldt kinetisk model, der sammenkæder bindingsenergier, aktiveringsenergier og så videre med den kemiske reaktionshastighed. Inden for centeret er vi allerede ved at have studeret den første reaktion over hele det spektrum af stadier, der er beskrevet ovenfor, og flere er undervejs.

En atomistisk beskrivelse af teknisk vigtige områder, hvor overfladen spiller en væsentlig rolle, er ikke i princippet begrænset til heterogen katalyse. Når eksempelvis et materiale glider i tæt kontakt hen over et andet, må der hele tiden brydes og dannes kemiske bindinger i kontaktzonen. På det atomare niveau er det processer, der ikke er principielt forskellige fra det der sker, når en kemisk reaktion foregår på overfladen. Det samme er tilfældet når atomer diffunderer hen over en overflade i forbindelse med, at et materiale *sintres*, det vil sige bringes til at hænge sammen, uden at det varmes op til smeltepunktet. Man kan finde en

lang række af andre eksempler. Der er således håb om at også andre tekniske forskningsområder end den heterogene katalyse med tiden kan drage nytte af udviklingen inden for overfladefysikken.

Dette nummer af KVANT rummer en række artikler der handler om overfladefysik i Danmark. Flemming Besenbacher, Erik Lægsgaard og Ivan Stensgaard beskriver Scanning Tunneling Mikroskopet, der gør det muligt at iagttage enkelte atomer på overflader. Robert Feidenhans'l beskriver overfladen og nogle teknikker til at undersøge dem. Ib Chorkendorff og Per Stoltze beskriver hvorledes man kan studere de kemiske reaktioner på overflader, og Per Stoltze behandler en smeltende overflade. Endelig beretter Bjerne Steffen Clausen om den industrielle katalyse.