

## Preis der Stadt Bayreuth für die Physikerin Dr. Linn Leppert

Das Verständnis katalytischer Prozesse auf atomarer Ebene beschäftigt Physiker und Chemiker seit langem. Es ist von entscheidender Bedeutung für die Entwicklung neuer, effizienterer Katalysatoren, mit denen chemische Reaktionen unter umweltverträglicheren Bedingungen als bisher durchgeführt werden können. Als vielversprechende Kandidaten für die Katalyse einer Reihe von industriell relevanten Reaktionen haben sich Nanopartikel erwiesen, die aus Platin oder Palladium und einem weiteren Übergangsmetall, z.B. Gold oder Nickel bestehen. Solche Strukturen werden in Bayreuth im Rahmen des von Physik und Chemie getragenen Sonderforschungsbereichs 840 „Von partikulären Nanosystemen zur Mesotechnologie“ erforscht.



Dr. Linn Leppert haben während ihrer Promotion vor allem Gold-Platin Nanopartikel fasziniert. Durch die Nutzung von Gold-Platin Nanopartikeln als Katalysatoren können Reaktionen bei Raumtemperatur und mit milden Lösungsmitteln effizient ablaufen, d.h. ressourcenschonender als bisher. Experimentell wurde außerdem festgestellt, dass die mit Gold-Platin Partikeln erreichten katalytischen Aktivitäten deutlich über denen von reinen Platin- oder reinen Gold-Nanopartikeln liegen. Nicht nur dieser Effekt, sondern sogar die bloße Existenz von Gold-Platin Nanopartikeln ist aus physikalischer Sicht erstaunlich, da Gold und Platin auf makroskopischer Skala nur sehr schwer mischbar sind.

Mit Hilfe von Methoden der quantenmechanischen Dichtefunktionaltheorie konnte Frau Dr. Leppert am Lehrstuhl für Theoretische Physik IV zum Verständnis des Mischungsverhaltens von Gold und Platin auf der Nanoskala beitragen. Sie zeigte, dass die Bildung echter Gold-Platin Nanolegierungen auf Temperatur- und Umgebungseffekte zurückzuführen sein muss, da Gold- und Platinatome ohne die Berücksichtigung dieser Effekte auch auf der Nanoskala eine gewisse räumliche Trennung energetisch bevorzugen. Computersimulationen zeigten, dass Gold-Platin Nanopartikel universelle elektronische und strukturelle Eigenschaften besitzen, die sich günstig auf ihre katalytische Aktivität auswirken können: Die für die Katalyse relevante elektronische Struktur ist eng an den Anteil und die Position der Platinatome geknüpft. Dagegen nimmt die „strukturelle Anpassungsfähigkeit“ der Nanopartikel mit steigendem Goldanteil zu. Bei einem bestimmten Mischungsverhältnis von Gold und Platin wird auf diese Weise eine optimale Kombination von elektronischer Struktur und struktureller Anpassungsfähigkeit möglich. Die in Frau Dr. Lepperts Arbeit gewonnen Erkenntnisse liefern nicht nur einen Beitrag zum Verständnis der Eigenschaften von Gold-Platin Nanopartikeln, sondern dienen auch als Ausgangspunkt für die Erforschung anderer bimetallischer, nanoskaliger Teilchen.

**Die Preise der Stadt Bayreuth werden im Rahmen der öffentlichen Akademischen Jahresfeier vergeben, die am Donnerstag, 21. November 2013 um 14:00 Uhr im Audimax beginnt.**