

Ceroxid-Nanopartikel: Auf die Oberfläche kommt es an

Neue Erkenntnisse zur Struktur ermöglichen gezielte Weiterentwicklung von Katalysatoren und Photokatalysatoren – Drei Veröffentlichungen in der Zeitschrift Angewandte Chemie



Mit den Felsformationen des Monument Valley vergleichbar ist die Oberfläche stabförmiger Ceroxid-Nanopartikel – sie weist zahlreiche Ecken, Kanten und Facetten auf. (Abbildung: Alessandro Trovarelli/Universität Udine).

Abgasreinigung in Kraftfahrzeugen, Stromerzeugung aus Sonnenlicht oder Spaltung von Wasser: Diese und weitere Anwendungen können künftig von neuen Erkenntnissen zu Ceroxiden profitieren: Am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) haben Wissenschaftler Ceroxid-Nanopartikel mithilfe von Sondenmolekülen sowie einer komplexen Ultrahochvakuum-Infrarot-Messapparatur untersucht und teils überraschende neue Einsichten in Oberflächenstruktur und chemische Aktivität gewonnen. Drei Beiträge in der Zeitschrift Angewandte Chemie stellen die Arbeiten vor.

Ceroxide, Verbindungen des Seltenerdmetalls Cer mit Sauerstoff, gehören zu den wichtigsten Oxiden für technische Anwendungen. Eingesetzt werden Ceroxide vor allem in der heterogenen Katalyse, beispielsweise in Abgaskatalysatoren für Kraftfahrzeuge, sowie in der Photokatalyse, etwa für Solarzellen, zur Spaltung von Wasser oder zur Zersetzung von Schadstoffen. Das Ceroxid, wie es in Katalysato-

Monika Landgraf
Pressesprecherin,
Leiterin Gesamtkommunikation

Kaiserstraße 12
76131 Karlsruhe
Tel.: +49 721 608-47414
Fax: +49 721 608-43658
E-Mail: presse@kit.edu

ren verwendet wird, liegt als Pulver vor; dieses besteht aus nanoskaligen Partikeln (ein Nanometer ist ein milliardstel Meter) mit hochkomplexer Struktur. Dabei bestimmt die spezielle Anordnung der Metall- und Sauerstoffatome an der Oberfläche die physikalischen und chemischen Eigenschaften des Ceroxids. Bisher ließen sich die an der Oberfläche der Nanopartikel ablaufenden Umordnungs- und Rekonstruktionsprozesse allerdings nicht genau analysieren.

Am KIT haben Wissenschaftler des Instituts für Funktionelle Grenzflächen (IFG) unter Leitung von Professor Christof Wöll in den vergangenen Jahren ein neues Verfahren zur Untersuchung der chemischen Eigenschaften von Oxid-Oberflächen etabliert: Sie setzen kleine Moleküle, wie Kohlenmonoxid (CO), molekularen Sauerstoff (O₂) oder Distickstoffmonoxid (N₂O), als Sondenmoleküle ein. Diese lagern sich an der Oberfläche der Oxid-Nanopartikel an. Anschließend bestimmen die Forscher die Schwingungsfrequenzen der Sondenmoleküle. „Dieser Zugang hat nun auch entscheidende Fortschritte beim Verständnis der Oberflächeneigenschaften von Ceroxid-Nanopartikeln ermöglicht“, berichtet Christof Wöll.

Die Forscher des IFG untersuchten gemeinsam mit Wissenschaftlern des Instituts für Katalysatorforschung und -technologie (IKFT) des KIT sowie der Humboldt-Universität zu Berlin, der Universität Udine/Italien und der Polytechnischen Universität von Katalonien in Barcelona/Spain verschiedene Aspekte der Oberflächenstruktur und der chemischen Aktivität von Ceroxid-Nanopartikeln. Ihre Ergebnisse präsentieren sie in drei jeweils einzeln veröffentlichten Beiträgen in der Zeitschrift Angewandte Chemie.

Wesentlich für die erzielten Fortschritte ist, dass es den Forschern gelang, die an den Pulvern gemessenen Schwingungsfrequenzen über Messungen an genau definierten Modellsubstanzen zu überprüfen. Sie bauten dazu eine komplexe Ultrahochvakuum-Infrarot-Apparatur auf, die weltweit einzigartige Messmöglichkeiten bietet. Zudem nutzten sie die Ergebnisse quantenmechanischer Rechnungen, um die zuvor unbekanntenen Schwingungsbanden an den Oxid-Partikeln zuzuordnen. Dies ermöglichte eine ganze Reihe neuer, zum Teil unerwarteter Einsichten in die Oberflächenchemie der Ceroxid-Nanopartikel.

So wiesen die Wissenschaftler nach, dass die Oberfläche stabförmiger Ceroxid-Nanopartikel verschiedene Fehlstellen wie sägezahnähnliche Nanofacetten, Sauerstoff-Leerstellen, Ecken und Kanten aufweist. Diese Irregularitäten führen vermutlich zu der hohen katalytischen Aktivität solcher Nanopartikel. Weiter stellten die Forscher fest, dass sich die Photoreaktivität von Cerdioxid durch das Erzeugen

von Sauerstoff-Leerstellen, das heißt unbesetzten Sauerstoffplätzen, deutlich steigern lässt. Eine weitere Studie lieferte grundlegende Erkenntnisse zur Lage von Sauerstoff-Leerstellen auf verschiedenen Ceroxid-Oberflächen und ihrer Bedeutung für die Sauerstoffaktivierung. „Die Ergebnisse dieser Arbeiten ermöglichen nun, nanoskalige Ceroxid-Katalysatoren und -Photokatalysatoren systematisch weiterzuentwickeln und zu optimieren“, sagt Professor Wöll.

Chengwu Yang, Xiaojuan Yu, Stefan Heißler, Alexei Nefedov, Sara Colussi, Jordi Llorca, Alessandro Trovarelli, Yuemin Wang, and Christof Wöll: Surface Faceting and Reconstruction of Ceria Nanoparticles. *Angewandte Chemie. International Edition*. DOI: 10.1002/anie.201609179 (Deutsche Ausgabe. DOI: 10.1002/ange.201609179)

Chengwu Yang, Xiaojuan Yu, Philipp N. Pleßow, Stefan Heißler, Peter G. Weidler, Alexei Nefedov, Felix Studt, Yuemin Wang, and Christof Wöll: Rendering Photoreactivity to Ceria: The Role of Defects. *Angewandte Chemie. International Edition*. DOI: 10.1002/anie.201707965 (Deutsche Ausgabe. DOI: 10.1002/ange.201707965)

Chengwu Yang, Xiaojuan Yu, Stefan Heißler, Peter G. Weidler, Alexei Nefedov, Yuemin Wang, Christof Wöll, Thomas Kropp, Joachim Paier, and Joachim Sauer: O₂ Activation on Ceria Catalysts – The Importance of Substrate Crystallographic Orientation. *Angewandte Chemie. International Edition*. DOI: 10.1002/anie.201709199 (Deutsche Ausgabe. DOI: 10.1002/ange.201709199)

Als „Die Forschungsuniversität in der Helmholtz-Gemeinschaft“ schafft und vermittelt das KIT Wissen für Gesellschaft und Umwelt. Ziel ist es, zu den globalen Herausforderungen maßgebliche Beiträge in den Feldern Energie, Mobilität und Information zu leisten. Dazu arbeiten rund 9 300 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter auf einer breiten disziplinären Basis in Natur-, Ingenieur-, Wirtschafts- sowie Geistes- und Sozialwissenschaften zusammen. Seine 26 000 Studierenden bereitet das KIT durch ein forschungsorientiertes universitäres Studium auf verantwortungsvolle Aufgaben in Gesellschaft, Wirtschaft und Wissenschaft vor. Die Innovationstätigkeit am KIT schlägt die Brücke zwischen Erkenntnis und Anwendung zum gesellschaftlichen Nutzen, wirtschaftlichen Wohlstand und Erhalt unserer natürlichen Lebensgrundlagen.

Das KIT ist seit 2010 als familiengerechte Hochschule zertifiziert.

Diese Presseinformation ist im Internet abrufbar unter:
www.sek.kit.edu/presse.php

Das Foto steht in der höchsten uns vorliegenden Qualität auf www.kit.edu zum Download bereit und kann angefordert werden unter: presse@kit.edu oder +49 721 608-47414. Die Verwendung des Bildes ist ausschließlich in dem oben genannten Zusammenhang gestattet.