

## Pressemitteilung

Technische Universität Dresden

Claudia Kallmeier

14.04.2022

<http://idw-online.de/de/news791989>

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen  
Chemie  
überregional



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
DRESDEN

## Flexibles Quantensieb made at TU Dresden filtert den Treibstoff von Raumschiff Enterprise

**Deuterium, der schwere Bruder von Wasserstoff, gilt als vielversprechender Stoff der Zukunft – denn sein Anwendungsspektrum ist vielfältig: ob in der Wissenschaft, zur Energiegewinnung oder bei der Arzneimittelherstellung. Doch die Gewinnung aus der natürlichen Isotopenmischung des Wasserstoffs ist bislang aufwendig und teuer. Mit einem porösen Material, das an der Technischen Universität Dresden entwickelt wurde, könnte das nun bald effizienter und kostengünstiger gehen. Die neue Methode wird aktuell im Fachjournal „Science Advances“ vorgestellt.**

Bereits Raumschiff Enterprise flog mit Deuterium als Treibstoff durch die Galaxis. Auch wenn es sich dabei um Science Fiction der 60er/70er Jahre handelt, an der realen Anwendung des Wasserstoffisotops für die Energieerzeugung wird heute noch geforscht. Die Herausforderung besteht dabei vor allem in der Gewinnung des Isotops. Deuterium (chem. Abk. D, „schwerer“ Wasserstoff) ist neben Protium (H, „normaler“ Wasserstoff) und Tritium (T, „superschwerer“ Wasserstoff) eines der drei natürlichen Isotope von Wasserstoff. Obwohl Deuterium ein Isotop ist, ist es nicht radioaktiv. Gewöhnliches Wasser und schweres Wasser aus Deuterium sind ähnlich stabil. Tritium (T) ist technisch gesehen äußerst vielversprechend, aber aufgrund seiner Radioaktivität sicherheitstechnisch nicht unproblematisch.

Deuterium wird aus schwerem, also deuteriumhaltigem Wasser gewonnen, das zu 0,15 Promille in den natürlichen Wasservorkommen unserer Erde enthalten ist. Dafür wird zunächst das schwere Wasser mittels chemischer und physikalischer Verfahren isoliert und anschließend Deuterium-Gas erzeugt. Diese Prozesse sind so aufwendig und energieintensiv, dass ein Gramm Deuterium teurer als Gold ist, obwohl sein natürliches Vorkommen um ein Vielfaches höher ist.

Doch die Nachfrage nach reinem Deuterium steigt unaufhörlich weiter, denn aufgrund seiner einzigartigen physikalischen Eigenschaften scheint sein Anwendungspotential noch lange nicht ausgeschöpft: Bei der Anwendung in Medikamenten wurde bereits nachgewiesen, dass Deuterium einen lebensverlängernden Effekt aufweist, wenn auch zunächst nur für den Wirkstoff selbst. Deuteriumhaltige Arzneimittel lassen sich niedriger dosieren, sodass sich auch ihre Nebenwirkungen verringern. In Kernreaktoren spielt Deuterium als Moderator eine wichtige Rolle. Außerdem soll in zukünftigen Fusionsreaktoren ein Gemisch aus Deuterium und Tritium oder  $^3\text{He}$  als Brennstoff verwendet werden. Weitere Anwendungsfelder finden sich in der Medizin, den Biowissenschaften, der Analyse sowie bei neuartigen TV-Displays.

In einer interdisziplinären Zusammenarbeit haben die Gruppen von Prof. Stefan Kaskel und Prof. Thomas Heine von der TU Dresden gemeinsam mit Dr. Michael Hirscher vom MPI für Intelligente Systeme Stuttgart nun einen neuartigen Trennungsmechanismus für die Wasserstoffisotope entwickelt, der auf dem an der TU Dresden entwickelten flexiblen metallorganischen Gerüst „DUT-8“ beruht. „Unser Material ermöglicht eine Trennung von gasförmigem Deuterium  $\text{D}_2$  von Wasserstoff  $\text{H}_2$ . DUT-8 ist hochflexibel und kann seine Porengröße dynamisch anpassen. Diese strukturelle Reaktion erweist sich jedoch als äußerst selektiv: Nur Deuterium kann die Poren öffnen, während Wasserstoff das Gerüst geschlossen lässt. Diese hochselektive Erkennung führt zu einer hohen Trennschärfe bei gleichzeitig hoher

Deuterium-Aufnahme“, erklärt Stefan Kaskel, Professor für Anorganische Chemie an der TU Dresden. Mit seiner Gruppe hat er sich auf neuartige nanostrukturierte und poröse Funktionsmaterialien für die Energiespeicherung und Konversion spezialisiert und bereits mehrere patentierte Materialien entwickelt.

Sein 2012 veröffentlichtes Material DUT-8 zeigte zunächst keine Wasserstoffaufnahme, weder bei hohem Druck noch bei sehr tiefen Temperaturen. „Bei unseren Messungen am MPI in Stuttgart konnten wir erstmals eine Öffnung der Struktur von DUT-8 unter Deuteriumatmosphäre bei sehr tiefen Temperaturen beobachten. Daraufhin gelang es uns auch, experimentell Wasserstoffisotopengemische zu trennen, wobei das Material als eine Art flexibles und daher äußerst effizientes „Quantensieb“ fungiert“, erklärt Dr. Michael Hirscher, der am MPI für Intelligente Systeme bereits seit mehreren Jahren an effizienten Trennungsmechanismen für Wasserstoffisotope forscht.

Erste Berechnungen in Verbindung mit statistischer Thermodynamik sagen die isotopenselektive Öffnung voraus, die durch ausgeprägte Kernquanteneffekte erklärt wird. Da es aber weitere sogenannte Isotopologe (Moleküle aus gleichen Elementen, jedoch unterschiedlichen Isotopen) des Wasserstoffs, nämlich HD, HT, DT und Tritium gibt, die nicht so stabil wie Deuterium sind, simulierte Thomas Heine an der Professur für Theoretische Chemie an der TU Dresden weitere mögliche Anwendungen für DUT-8. „Es ist uns in dieser gemeinsamen Arbeit gelungen, sicherheitstechnisch problematische Experimente mit radioaktivem Material durch validierte Computersimulationen zu ersetzen und dadurch Voraussagen für potenzielle Anwendungsgebiete dieses Isotopen-abhängigen Öffnungseffekts des DUT-8 treffen zu können“, erläutert Professor Heine. Seine Simulationen zeigen, dass sich DUT-8 nur für Isotopologe ohne leichte H-Isotope öffnet. Für HD konnten diese Vorhersagen bereits durch Dr. Hirschers Gruppe experimentell bestätigt werden.

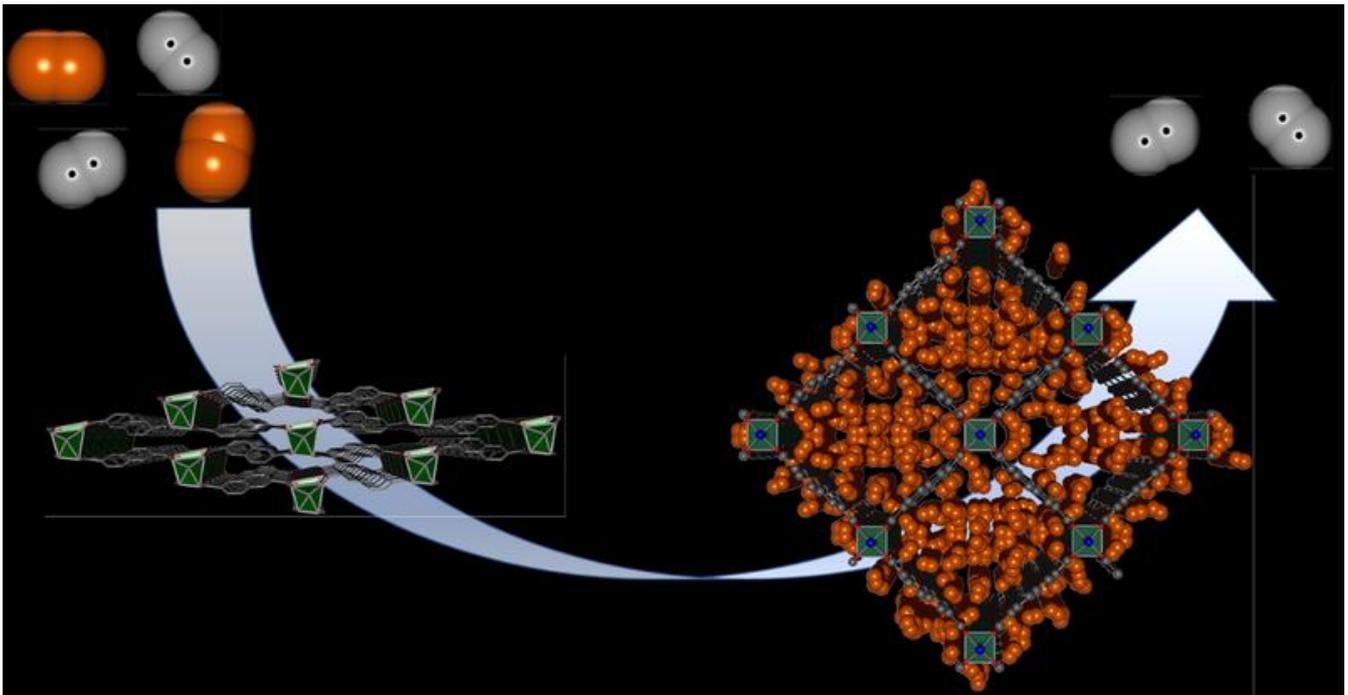
wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Thomas Heine  
Theoretische Chemie  
TU Dresden  
Email: [thomas.heine@tu-dresden.de](mailto:thomas.heine@tu-dresden.de)

Dr. Michael Hirscher  
MPI für Intelligente Systeme  
Stuttgart  
Email: [hirscher@is.mpg.de](mailto:hirscher@is.mpg.de)

Originalpublikation:

Linda Bondorf, Jhonatan Luiz Fiorio, Volodymyr Bon, Linda Zhang, Mariia Maliuta, Sebastian Ehrling, Irena Senkovska, Jack D. Evans, Jan-Ole Joswig, Stefan Kaskel, Thomas Heine, Michael Hirscher. Isotope-selective pore opening in a flexible metal-organic framework. *Science Advances*. DOI: [10.1126/sciadv.abn7035](https://doi.org/10.1126/sciadv.abn7035)



Nur Deuterium kann die Poren des metallorganischen Gerüsts „DUT-8“ öffnen, während Wasserstoff das Gerüst geschlossen lässt. Diese hochselektive Erkennung führt zu einer hohen Trennschärfe bei gleichzeitig hoher Deuterium-Aufnahme.

Dr. Volodymyr Bon