idw - Informationsdienst Wissenschaft
Nachrichten, Termine, Experten

Pressemitteilung

Technische Universität Wien
Sarah Link

19.07.2023
http://idw-online.de/de/news818049

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Chemie, Energie, Werkstoffwissenschaften
überregional

Neue Katalysatoren für die solare Wasserstoffproduktion

Forschende der TU Wien entwickeln einen geschichteten Fotokatalysator, mit dem sich Wasserstoff sehr effizient aus Wasser herstellen lässt.

Die Suche nach nachhaltigen und sauberen Brennstoffen ist angesichts der globalen Energie- und Klimakrise von zentraler Bedeutung. Ein vielversprechender und zunehmend an Relevanz gewinnender Kandidat ist Wasserstoff. Die heutige industrielle Wasserstoffproduktion hat jedoch immer noch einen beträchtlichen CO_2-Fußabdruck, insbesondere bei Verfahren wie der Dampfreformierung oder der nicht nachhaltigen Elektrolyse.

Ein Team um Prof. Dominik Eder vom Institut für Materialchemie (TU Wien) konzentriert sich daher auf die Entwicklung umweltfreundlicher Verfahren zur Gewinnung von Wasserstoff, beispielsweise durch Fotokatalyse. Dieser Prozess ermöglicht es, Wassermoleküle allein mit Hilfe von Licht und einem Katalysator in Wasserstoff umzuwandeln. Durch diesen Prozess kann die reichlich vorhandene und saubere Energie der Sonne in grünem Wasserstoff gespeichert werden. Die Ergebnisse wurden kürzlich in der Fachzeitschrift "Advanced Energy Materials" veröffentlicht.

Neuartige Fotokatalysatoren

Bei der Herstellung von grünem Wasserstoff durch Fotokatalyse spielt der Katalysator eine entscheidende Rolle. Im Gegensatz zu industriellen Katalysatoren nutzt der Fotokatalysator die Energie des Lichts, um die Aufspaltung von Wasser bei Raumtemperatur und Umgebungsdruck zu erleichtern. Zu den vielversprechendsten Kandidaten gehören metallorganische Gerüste, sogenannte MOFs. Sie bestehen aus molekularen anorganischen Bausteinen, die durch organische Verbindungsmoleküle zusammengehalten werden. Gemeinsam bilden sie hochporöse 3D-Netzwerke, die eine außergewöhnlich große Oberfläche und hervorragende Ladungstrennungseigenschaften aufweisen.

Die meisten MOFs sind jedoch nur unter Einfluss von UV-Licht aktiv, weshalb Forschende die organischen Komponenten so verändern, dass sie sichtbares Licht absorbieren können. Diese Anpassungen haben jedoch einen negativen Einfluss auf die Mobilität der Elektronen. Eine weitere Einschränkung betrifft die Ladungsextraktion, bei der die Elektronen aus dem Material gelöst werden: "MOFs sind zwar sehr gut geeignet, um Ladungsträger an den organisch-anorganischen Grenzflächen zu trennen, aber ihre effiziente Extraktion für katalytische Anwendungen bleibt eine Herausforderung", erklärt Dominik Eder.

In jüngster Zeit haben MOFs mit Schichtstrukturen für den Einsatz in optoelektronischen Anwendungen viel Aufmerksamkeit erregt, da sie eine deutlich verbesserte Ladungsextraktion aufweisen. "Man kann sich diese Schichtstrukturen wie eine Manner-Schnitte vorstellen, bei der die Waffel der anorganische Teil und die Schokolade der organische Ligand ist, der sie zusammenhält", zieht Pablo Ayala, Erstautor der Studie, einen Vergleich. "Man muss den Waffelteil nur leitfähig machen."

Herausforderung Wasserspaltung

Im Gegensatz zu dreidimensionalen MOFs ist ein geschichtetes MOF in der Regel nicht porös, was die katalytisch aktive Fläche auf die äußere Oberfläche der Partikel reduziert. "Daher mussten wir einen Weg finden, um diese Partikel so klein wie möglich zu machen", erklärt Eder. Ändert man die Struktur eines Materials auf atomarer Ebene, schleichen sich jedoch häufig strukturelle Defekte ein. Diese können als Ladungsfallen wirken und die Extraktion von Ladungen verlangsamen. "Niemand mag eine Manner-Schnitte ohne Schokolade“, setzt Ayala seinen Vergleich fort. „Auch im Fall der Fotokatalyse brauchen wir das bestmögliche, herstellbare Material."

Das Team um Dominik Eder entwickelte daher einen neuen Syntheseweg, bei dem auch die kleinsten kristallinen Strukturen frei von Defekten hergestellt werden können. Gelungen ist dies in Zusammenarbeit mit lokalen und internationalen Universitäten. Die neuartigen, geschichteten MOFs basieren auf Titan und haben eine kubische Form von nur wenigen Nanometern Größe. Das Material konnte bereits Rekordwerte bei der fotokatalytischen Wasserstoffproduktion unter Einwirken von sichtbarem Licht erzielen.

Mit Hilfe von Computersimulationen, die am Technion in Israel durchgeführt wurden, konnte das Team den zugrundeliegenden Reaktionsmechanismus entschlüsseln und zwei Dinge nachweisen: Erstens, dass die schichtartige Beschaffenheit eines MOF in der Tat der Schlüssel zu einer effizienten Ladungstrennung und -extraktion ist. Zweitens, dass Missing-Ligand-Defekte als unerwünschte Ladungsfallen fungieren, die soweit möglich vermieden werden müssen, um die fotokatalytische Leistung des Materials zu verbessern.

Die Forschungsgruppe entwickelt derzeit weitere, neue geschichtete MOFs und erforscht sie für verschiedene Energieanwendungen.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Dominik Eder
TU Wien
Institut für Materialchemie
+43 1 58801 165400
dominik.eder@tuwien.ac.at

Dipl.-Ing. Pablo Ayala
TU Wien
Institut für Materialchemie
+43 1 58801 165214
pablo.ayala@tuwien.ac.at

Originalpublikation:

Ayala, P., Naghdi, S., Nandan, S. P., Myakala, S. N., Rath, J., Saito, H., ... & Eder, D. (2023). The Emergence of 2D Building Units in Metal□Organic Frameworks for Photocatalytic Hydrogen Evolution: A Case Study with COK□47. Advanced Energy Materials, 2300961. https://doi.org/10.1002/aenm.202300961

Gruppenleiter Prof. Dominik Eder (links) und Erstautor der Studie Pablo Ayala (rechts).
TU Wien