

Pressemitteilung

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft

Dr. Jelena Tomovic

12.09.2024

<http://idw-online.de/de/news839600>

Forschungs- / Wissenstransfer, Forschungsergebnisse
Chemie, Energie, Physik / Astronomie
überregional



Studie enthüllt entscheidende Schritte zur Umwandlung von CO₂ in wertvolle Chemikalien

Eine bahnbrechende Studie der Abteilung Interface Science am Fritz-Haber-Institut und des Institute of Chemical Research of Catalonia wurde in der renommierten Zeitschrift *Nature Energy* veröffentlicht. Das Papier mit dem Titel „Key intermediates and Cu active sites for CO₂ electroreduction to ethylene and ethanol“ nutzt fortschrittliche spektroskopische Methoden und theoretische Berechnungen, um die komplexen Prozesse bei der Umwandlung von Kohlendioxid (CO₂) in wertvolle Chemikalien wie Ethylen und Ethanol zu beleuchten. Diese Forschung verspricht bedeutende Fortschritte im Verständnis, um eine nachhaltige Produktion in der chemischen Industrie zu ermöglichen.

CO₂-Reduktion: Ein Weg zu wertvollen Chemikalien

Die elektrochemische Reduktion von CO₂ (CO₂RR) ist eine vielversprechende Technologie, die erneuerbare Elektrizität nutzt, um CO₂ in hochwertige Chemikalien umzuwandeln und so den Kohlenstoffkreislauf effektiv zu schließen. Ethylen und Ethanol, die im Fokus dieser Studie stehen, sind entscheidend für die Herstellung umweltfreundlicher Kunststoffe und Kraftstoffe. Die genauen Mechanismen und Zwischenschritte dieser Umwandlung blieben jedoch bisher unklar. Das mechanistische Verständnis ist entscheidend, um die aktiven Zentren der Katalysatoren rational herstellen zu können. Diese sind nämlich nicht nur im synthetisierten Vorkatalysator vorhanden, sondern bilden und entwickeln sich auch im Verlauf der Reaktion durch die Interaktion mit Reaktanten und Reaktionsintermediaten.

Wichtige Erkenntnisse: Spektroskopische Einblicke und theoretische Unterstützung

Das Forschungsteam unter der Leitung von Gruppenleiter Dr. Arno Bergmann, Prof. Dr. Beatriz Roldán Cuenya und Prof. Dr. Núria López nutzte in-situ oberflächenverstärkte Raman-Spektroskopie (SERS) und Dichtefunktionaltheorie (DFT), um die molekularen Spezies auf Kupfer (Cu)-Elektrokatalysatoren zu untersuchen und so Einblicke in den Reaktionsmechanismus zu gewinnen. Ihre Ergebnisse zeigen, dass die Bildung von Ethylen erfolgt, wenn spezifische Intermediate, bekannt als *OC-CO(H)-Dimere, an unterkoordinierten Cu-Stellen entstehen. Im Gegensatz dazu erfordert die Produktion von Ethanol eine stark komprimierte und verzerrte Koordinationsumgebung der Cu-Stellen, mit dem Schlüsselintermediat *OCHCH₂.

Verständnis der Rolle der Oberflächenmorphologie

Eine der entscheidenden Entdeckungen ist die Rolle der Oberflächenmorphologie im Reaktionsprozess. Das Team fand heraus, dass die unterkoordinierten Cu-Stellen die Bindung von CO, einem entscheidenden Schritt im Reduktionsprozess, verstärken. Diese Cu-Stellen, die durch atomare Unregelmäßigkeiten gekennzeichnet sind, entstehen wahrscheinlich unter Reaktionsbedingungen und machen die katalytische Oberfläche effektiver, was zu einer besseren Performance bei der Produktion von Ethylen und Ethanol führt.

Auswirkungen auf die chemische Industrie

Diese Erkenntnisse können bedeutende Auswirkungen auf die chemische Industrie haben, insbesondere bei der Herstellung von Kunststoffen und Kraftstoffen. Durch das Verständnis der spezifischen Bedingungen und Intermediate, die für die selektive Produktion von Ethylen und Ethanol erforderlich sind, können Forscher effizientere und nachhaltigere Katalysatoren entwickeln. Dies könnte zu effektiveren Wegen zur Nutzung von CO₂ führen und den CO₂-Fußabdruck chemischer Herstellungsprozesse reduzieren.

Gemeinsame Anstrengung

Die Studie war eine gemeinsame Anstrengung mit theoretischer Unterstützung einer Forschungsgruppe in Spanien. Diese Partnerschaft ermöglichte eine umfassende Untersuchung, die experimentelle und theoretische Ansätze kombinierte, um ein detailliertes Verständnis des CO₂-Reduktionsprozesses zu bieten.

Fazit

Die Forschung der Abteilung Interface Science am Fritz-Haber-Institut und des Institute of Chemical Research of Catalonia stellt einen bedeutenden Fortschritt im Bereich der CO₂-Reduktion dar. Durch die Enthüllung von Schlüsselintermediaten und aktiven Zentren bei der Produktion von Ethylen und Ethanol bietet diese Studie eine Grundlage für die Entwicklung effizienterer und nachhaltigerer katalytischer Prozesse. Die Ergebnisse fördern nicht nur das wissenschaftliche Wissen, sondern ermöglichen in Zukunft auch praktische Lösungen zur Reduzierung von CO₂-Emissionen und zur Förderung einer nachhaltigen chemischen Produktion.

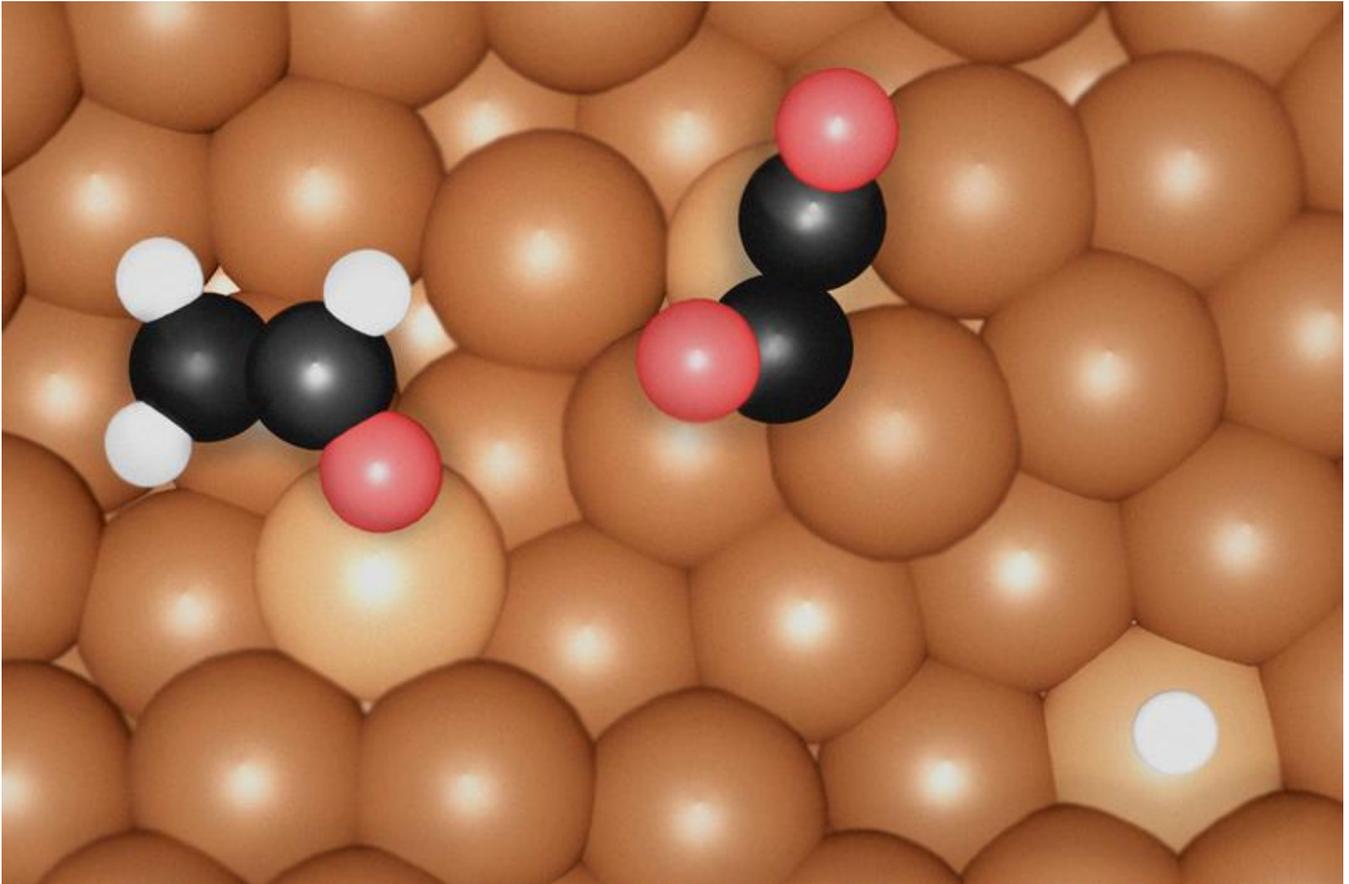
wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Dr. Beatriz Roldán Cuenya
roldan@fhi-berlin.m

Originalpublikation:

<https://www.nature.com/articles/s41560-024-01633-4>

URL zur Pressemitteilung: <https://www.fhi.mpg.de/1609957/2024-09-11-Turning-CO2-into-Valuable-Chemicals>



Umwandlung von CO₂ in wertvolle Chemikalien

© FHI

© FHI