

Pressemitteilung**Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft****Dr. Jelena Tomovic**

09.12.2024

<http://idw-online.de/de/news844451>Forschungs- / Wissenstransfer, Forschungsergebnisse
Chemie, Energie, Physik / Astronomie, Umwelt / Ökologie, Werkstoffwissenschaften
überregional**Katalysatoraktivierung und -abbau während der Sauerstoffentwicklung in hydrierten Iridiumoxiden**

Die Wasserelektrolyse ist entscheidend für nachhaltige Energiesysteme und ermöglicht die Produktion von Wasserstoff als Brennstoff, der in der chemischen Industrie, der Stahlproduktion und der Stromerzeugung eingesetzt werden kann. Die Entwicklung effizienter Katalysatoren für die Sauerstoffentwicklung (OER) ist entscheidend für den Fortschritt der Protonenaustauschmembran (PEM)-Wasserelektrolyse, wobei Iridium-basierte OER-Katalysatoren trotz der Herausforderungen im Zusammenhang mit ihrer Auflösung vielversprechend sind.

Eine gemeinsame Forschung des Helmholtz-Zentrums Berlin für Materialien und Energie GmbH und des Fritz-Haber-Instituts der Max-Planck-Gesellschaft hat Einblicke in die Mechanismen der OER-Leistung und der Iridiumauflösung für amorphe hydrierte Iridiumoxide geliefert und das Verständnis dieses kritischen Prozesses vorangetrieben.

Die Wasserelektrolyse ist ein zentraler Bestandteil globaler nachhaltiger und erneuerbarer Energiesysteme und ermöglicht die Produktion von Wasserstoff als Brennstoff. Dieser saubere und vielseitige Energieträger kann in verschiedenen Anwendungen genutzt werden, wie etwa bei der chemischen CO₂-Umwandlung und der Stromerzeugung. Der Einsatz erneuerbarer Energiequellen wie Solar- und Windenergie zur Stromversorgung des Elektrolyseprozesses kann dazu beitragen, die Kohlenstoffemissionen zu reduzieren und den Übergang zu einer kohlenstoffarmen Wirtschaft zu fördern.

Die Entwicklung effizienter und stabiler Anodenmaterialien für die Sauerstoffentwicklung (Oxygen Evolution Reaction, OER) ist entscheidend für den Fortschritt der Protonenaustauschmembran (PEM)-Wasserelektrolyse-Technologie. Die OER ist eine zentrale elektrochemische Reaktion, die Sauerstoffgas (O₂) aus Wasser (H₂O) oder Hydroxidionen (OH⁻) während der Wasserspaltung erzeugt. Diese scheinbar einfache Reaktion ist in Energiewandlungstechnologien wie der Wasserelektrolyse von entscheidender Bedeutung, da sie schwer effizient zu realisieren ist und ein gleichzeitiger Prozess zur gewünschten Wasserstoffproduktion darstellt. Iridium (Ir)-basierte Materialien, insbesondere amorphe hydrierte Iridiumoxide (am-hydr-IrOx), stehen im Mittelpunkt dieser Forschung aufgrund ihrer hohen Aktivität. Ihre Anwendung wird jedoch durch hohe Auflösungsraten des kostbaren Iridiums begrenzt.

Eine gemeinsame Anstrengung von Wissenschaftler*innen der Abteilung Interface Design am Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH und der Theorieabteilung am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft hat nun grundlegende Einblicke in die miteinander verknüpften Mechanismen der OER und der Ir-Auflösung in amorphen, hydrierten Iridiumoxiden (am-hydr-IrOx) geliefert. Traditionell war das Verständnis dieser Prozesse durch die Abhängigkeit von kristallinen Iridiumoxidmodellen begrenzt. In dieser gemeinsamen Anstrengung wurden hydrierte Iridiumoxid-Dünnschichten (HIROFs) als Modellsystem untersucht, das eine einzigartige Iridiumsuboxid-Spezies mit hoher OER-Aktivität aufdeckte. In situ Röntgenphotoelektronen- und Röntgenabsorptionsspektroskopie an den Synchrotronen BESSY II und ALBA sowie die Dichtefunktionaltheorie (DFT) wurden eingesetzt, um die lokalen elektronischen und geometrischen Strukturen dieser Materialien unter

Betriebsbedingungen zu untersuchen, was zur Einführung eines neuartigen Oberflächenmodells mit H-terminierten Nanoschichten führte. Dieses Modell repräsentiert besser die kurzreichweitige Struktur von am-hydr-IrOx und zeigt verlängerte Ir-O-Bindungslängen im Vergleich zu traditionellen kristallinen Modellen.

Darüber hinaus wurde die Ir-Auflösung als spontaner, thermodynamisch getriebener Prozess identifiziert, der bereits bei Potenzialen unterhalb der OER-Aktivierung auftritt, während das vorherrschende mechanistische Bild davon ausgeht, dass der Abbau durch seltene Ereignisse während der OER getrieben wird. Diese Entdeckung erforderte die Entwicklung eines neuen mechanistischen Rahmens zur Beschreibung der Ir-Auflösung durch die Bildung von Ir-Defekten. Die Studie bot auch Einblicke in die Beziehung zwischen Aktivität und Stabilität von am-hydr-IrOx, indem systematisch die DFT-berechnete OER-Aktivität in verschiedenen Ir- und O-Chemieumgebungen analysiert wurde.

Insgesamt stellen die aktuellen Forschungsergebnisse konventionelle Wahrnehmungen der Iridiumauflösung und OER-Mechanismen in Frage und bieten einen alternativen dual-mechanistischen Rahmen. Durch die Untersuchung eines hochaktiven und porösen Katalysators mit einer einzigartigen hydroxilierten Ir-Suboxid-Spezies entwickelt die Studie ein nanoskaliges atomistisches Modell, das konventionelle kristallbasierte Modelle übertrifft.

Diese Forschung stellt nicht nur das traditionelle Verständnis in Frage, sondern bietet auch eine neue atomistische Perspektive auf die empfindliche Beziehung zwischen OER-Aktivität und Haltbarkeit von Edelmetalloxidkatalysatoren. Die Ergebnisse dürften breit anwendbar sein und möglicherweise die Entwicklung effizienterer und stabilerer Anodenmaterialien zur Förderung der PEM-Technologie leiten.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Dr. Christoph Scheurer scheurer@fhi.mpg.de

Originalpublikation:

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2024/ee/d4eeo2839b>

URL zur Pressemitteilung: <https://www.fhi.mpg.de/1654644/2024-12-09-Oxygen-Evolution-Reaction>