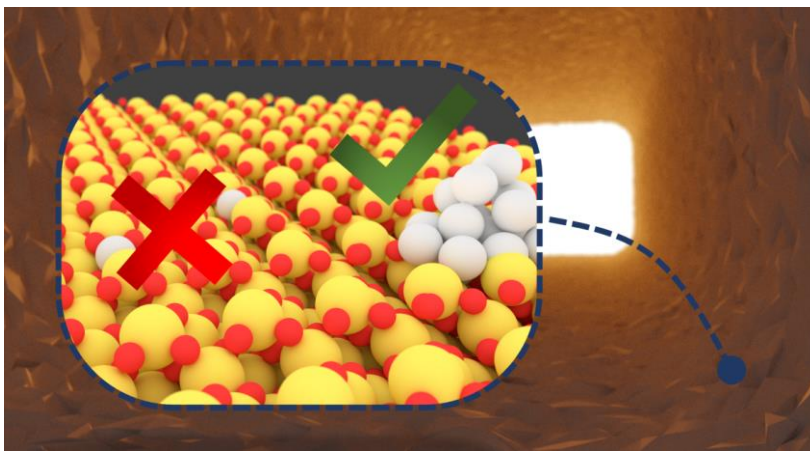


Edelmetallcluster können Katalysatoren leistungsfähig machen und Ressourcen schonen

Optimierte Verteilung von Atomen erlaubt kostengünstigere Produktion – Publikation in *Nature Catalytics*



Schematische Abbildung eines Edelmetallkatalysators mit inaktiven Einzelatomen (links) und aktiven Clustern (rechts; Edelmetall: weiß; Trägermetall: gelb; Sauerstoff: rot). (Grafik: Florian Maurer, KIT).

Katalysatoren aus Edelmetallen werden weltweit milliardenfach eingesetzt, etwa bei der Herstellung von Chemikalien, zur Energieerzeugung und zur Aufreinigung der Luft. Die dafür benötigten Rohstoffe sind jedoch teuer und ihre Vorkommen begrenzt. Sie optimal zu nutzen, ist das Ziel von Katalysatoren, die auf einzelnen Metallatomen basieren. Ein Forschungsteam des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) konnte nun zeigen, dass sich Edelmetallatome unter bestimmten Bedingungen zu Clustern zusammenschließen können, die reaktionsfreudiger sind als Einzelatome und so Abgase noch besser entfernen können. Über ihre Ergebnisse berichten sie in *Nature Catalysis* (DOI: 10.1038/s41929-020-00508-7).

Edelmetallkatalysatoren werden für ein breites Spektrum an Reaktionen eingesetzt. Unter anderem werden sie bei nahezu allen Verbrennungsprozessen genutzt, um Schadstoff-Emissionen zu reduzieren. Häufig bestehen sie aus ganz kleinen Partikeln der Aktivkomponente, beispielsweise eines Edelmetalls, die auf einem Trägermaterial auf-

Monika Landgraf
Leiterin Gesamtkommunikation
Pressesprecherin

Kaiserstraße 12
76131 Karlsruhe
Tel.: +49 721 608-41105
E-Mail: presse@kit.edu

Weiterer Pressekontakt:

Johannes Wagner
Redakteur/Pressereferent
Tel.: 0721 608-41175
johannes.wagner@kit.edu

Weitere Materialien:

Publikation in *Nature Catalysis*
<https://www.nature.com/articles/s41929-020-00508-7>

gebracht sind. Diese sogenannten Nanopartikel setzen sich wiederum aus mehreren tausend Metallatomen zusammen. „Da aber nur die außen liegenden Atome aktiv an der Reaktion teilnehmen können, bleibt ein Großteil völlig ungenutzt“, erläutert Professor Jan-Dierk Grunwaldt vom Institut für Technische Chemie und Polymerchemie (ITCP) des KIT. Durch Änderungen der Betriebsbedingungen könne sich die Struktur eines solchen Katalysators jedoch stark ändern und damit auch seine Aktivität. „Bei hohen Temperaturen im Abgasstrang eines Autos, die beispielsweise bei einer längeren Autobahnfahrt erreicht werden können, kann die Wechselwirkung zwischen Edelmetall und Träger zur Ausbildung von Einzelatomen führen – das heißt die Metallatome liegen einzeln und isoliert auf dem Träger vor“, so Grunwaldt. „Solche Einzelatomkatalysatoren versprechen eigentlich eine sehr gute Ausnutzung der Edelmetallkomponenten, da sämtliche Atome theoretisch an der Reaktion teilnehmen könnten.“ Entgegen dieser gegenwärtigen Erwartung konnte das Forschungsteam um Grunwaldt zusammen mit den Professoren Christof Wöll vom Institut für Funktionelle Grenzflächen des KIT und Felix Studt vom Institut für Katalysatorforschung und -technologie des KIT nun zeigen, dass diese Atome unter Reaktionsbedingungen erst Edelmetallcluster bilden müssen, um aktiv zu sein.

Dafür haben die Forscherinnen und Forscher die Ausbildung der Einzelatome zunächst gezielt herbeigeführt und deren Struktur während der Reaktion genau untersucht: Mittels hochspezialisierter Spektroskopie und theoretischer Berechnungen – erstmals an dieser Katalysatorklasse so eingesetzt – konnte das Team am Beispiel von Platinatomen erklären, warum diese häufig eine geringe Aktivität zeigen. „Damit sich Schadstoffe umwandeln lassen, müssen diese im Katalysator in der Regel mit Sauerstoff reagieren. Dafür müssen beide Komponenten zur selben Zeit am selben Ort vorliegen. Mit isolierten Platinatomen gelingt dies jedoch nicht, da der Sauerstoff für die erforderliche Reaktion zu stark an der Trägerkomponente – in unserem Fall Ceroxid – gebunden ist“, sagt Florian Maurer vom ITCP, einer der maßgeblichen Autoren der Studie. „Nach dem Aufbrechen der Platin-Ceroxid-Bindungen können sich Platinatome über die Trägeroberfläche bewegen. Diese Platinatome formen dann in einem weiteren Schritt kleine Platincluster, an welchen die Reaktion viel schneller abläuft als an Einzelatomen.“

Cluster bieten optimale Struktur für hohe Aktivität

Mit seinen Untersuchungen konnte das Team zeigen, dass weder Nanopartikel noch isolierte Atome die höchste Aktivität aufweisen. „Das Optimum liegt dazwischen – bei kleinen Edelmetallclustern“, so Grunwaldt. „Diese nun zu stabilisieren, könnte der Schlüssel sein, um zu-

künftig substanziell Edelmetalle bei der Herstellung von Katalysatoren einzusparen. Jahrelang war die immer feinere Verteilung der Edelmetallkomponente eine der Hauptstrategien bei dem Design neuer Katalysatoren. Mit unseren Experimenten konnten wir nun deutlich zeigen, wo die Grenzen im atomaren Bereich liegen.“ Die Ergebnisse der Studie sollen nun zum wissensbasierten Design und zur Entwicklung stabilerer und langzeitaktiverer Katalysatoren beitragen. Damit wird sich nun insbesondere das Abgaszentrum Karlsruhe des KIT beschäftigen, dessen wissenschaftliche Leiterin, Dr. Maria Casapu, ebenfalls Co-Autorin der Studie ist.

Originalpublikation:

Florian Maurer, Jelena Jelic, Junjun Wang, Andreas Gänzler, Paolo Dolcet, Christof Wöll, Yuemin Wang, Felix Studt, Maria Casapu, Jan-Dierk Grunwaldt: Tracking the formation, fate and consequence for catalytic activity of Pt single sites on CeO₂, Nature Catalysis, 2020, DOI: 10.1038/s41929-020-00508-7).

<https://www.nature.com/articles/s41929-020-00508-7>

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 24 400 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 eine der deutschen Exzellenzuniversitäten.

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 +49 721 608-41105. Die Verwendung des

Bildes ist ausschließlich in dem oben genannten Zusammenhang gestattet.