

Press release**Technische Universität München****Dr. Ulrich Marsch**

07/03/2019

<http://idw-online.de/en/news718623>Research results, Scientific Publications
Chemistry, Energy, Materials sciences, Physics / astronomy, Traffic / transport
transregional, national**Modellierung zeigt optimale Größe für Platin-Katalysatorpartikel Aktivität von Brennstoffzellen-Katalysatoren verdoppelt**

Einem interdisziplinären Forschungsteam der Technischen Universität München (TUM) ist es gelungen, die Größe von Platin-Nanopartikeln für die Katalyse in Brennstoffzellen so zu optimieren, dass die neuen Katalysatoren doppelt so gut sind, wie die derzeit besten kommerziell verfügbaren Verfahren.

Statt aus Batterien könnten auch Brennstoffzellen den Strom für Elektroautos liefern. Sie verbrennen Wasserstoff – ein Gas, das beispielsweise aus überschüssigem Strom von Windkraftwerken erzeugt werden könnte. Allerdings ist das in Brennstoffzellen verwendete Platin selten und extrem teuer, was die Einsatzmöglichkeiten bislang stark einschränkte.

Ein Forschungsteam der TU München um Roland Fischer, Professor für Anorganische und Metallorganische Chemie, Aliaksandr Bandarenka, Professor für Physik der Energiewandlung und -speicherung und Alessio Gagliardi, Professor für Simulation von Nanosystemen zur Energieumwandlung, hat nun die Größe der Platin-Partikel so optimiert, dass sie doppelt so leistungsfähig sind wie die besten derzeit kommerziell verfügbaren Verfahren.

Ideal: Ein Platin-Ei von einem Nanometer Größe

In Brennstoffzellen reagiert Wasserstoff mit Sauerstoff zu Wasser, dabei wird Elektrizität gewonnen. Um diesen Prozess optimal zu gestalten, braucht es raffinierte Katalysatoren auf den Elektroden. Platin spielt dabei für die Sauerstoff-Reduktions-Reaktion eine zentrale Rolle.

Um die ideale Lösung zu finden, modellierte das Team das Gesamtsystem am Computer. Die zentrale Frage: Wie klein kann ein Häuflein Platin-Atome werden, um noch katalytisch hochaktiv sein zu können. „Es zeigte sich, dass es bestimmte optimale Platin-Haufengrößen geben könnte“, erklärt Fischer, Professor für Anorganische und Metallorganische Chemie an der TU München.

Ideal sind danach etwa einen Nanometer große Partikel, die rund 40 Platinatome enthalten. „Platinkatalysatoren dieser Größe haben ein kleines Volumen, aber eine große Zahl an stark aktiven Stellen, was zu einer hohen Massenaktivität führt“, sagt Bandarenka.

Interdisziplinäre Zusammenarbeit

Einen wichtigen Anteil am Erfolg der Forschenden hat die interdisziplinäre Zusammenarbeit am Zentrum für Katalyseforschung (CRC). Theoretische Fähigkeiten bei der Modellierung, gemeinsame Diskussionen sowie physikalisches und chemisches Wissen aus Experimenten führen letztlich zu einem Modell, wie sich Katalysatoren idealerweise in Form, Größe und Größenverteilung der beteiligten Komponenten designen lassen.

Zudem gibt es am CRC auch das Knowhow, um die berechneten Platin-Nanokatalysatoren auch herzustellen und experimentell zu testen. „Dahinter steckt viel anorganische Synthesekunst“, sagt Kathrin Kratzl, neben Batyr Garlyyev Erstautorin der Studie.

Doppelt so gut wie der beste handelsübliche Katalysator

Das Experiment bestätigte die theoretischen Vorhersagen exakt. „Unser Katalysator ist doppelt so gut wie der beste handelsübliche Katalysator“, sagt Garlyyev. Noch reiche das nicht für kommerzielle Anwendungen aus, hier sei eine Reduzierung der Platinmenge von jetzt 50 auf bis zu 80 Prozent notwendig.

Neben sphärischen Nanopartikeln erhoffen sich die Forschenden von weitaus komplexeren Formen eine höhere katalytische Aktivität. Genau für solche Modellierungen sind die jetzt etablierten Rechenmodelle ideal. „Allerdings erfordern komplexere Formen noch komplexere Synthesemethoden“, sagt Bandarenka. Gemeinsame rechnerische und experimentelle Studien werden dabei in Zukunft immer wichtiger.

Weitere Informationen:

Die Arbeiten wurden unterstützt durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen der International Graduate School of Science and Engineering der Technischen Universität München, das Ministerium für Jugend, Bildung und Sport der Tschechischen Republik und das Central European Institute of Technology (CEITEC) in Brno (Tschechien).

contact for scientific information:

Prof. Dr. Roland A. Fischer
Direktor des Zentrums für Katalyseforschung (CRC)
Lehrstuhl für Anorganische und Metallorganische Chemie
Technische Universität München
Ernst-Otto-Fischer-Straße 1, 85748 Garching,
Tel.: +49 89 289 13080 – E-mail: roland.fischer@tum.de
Web: <https://www.department.ch.tum.de/amc/home/>

Prof. Dr. Aliaksandr S. Bandarenka
Physik der Energiewandlung und -speicherung
Technische Universität München
James-Franck-Straße 1, 85748 Garching
Tel.: +49 89 289 12531 – E-mail: bandarenka@ph.tum.de
Web: <https://www.groups.ph.tum.de/energy/ecs/>

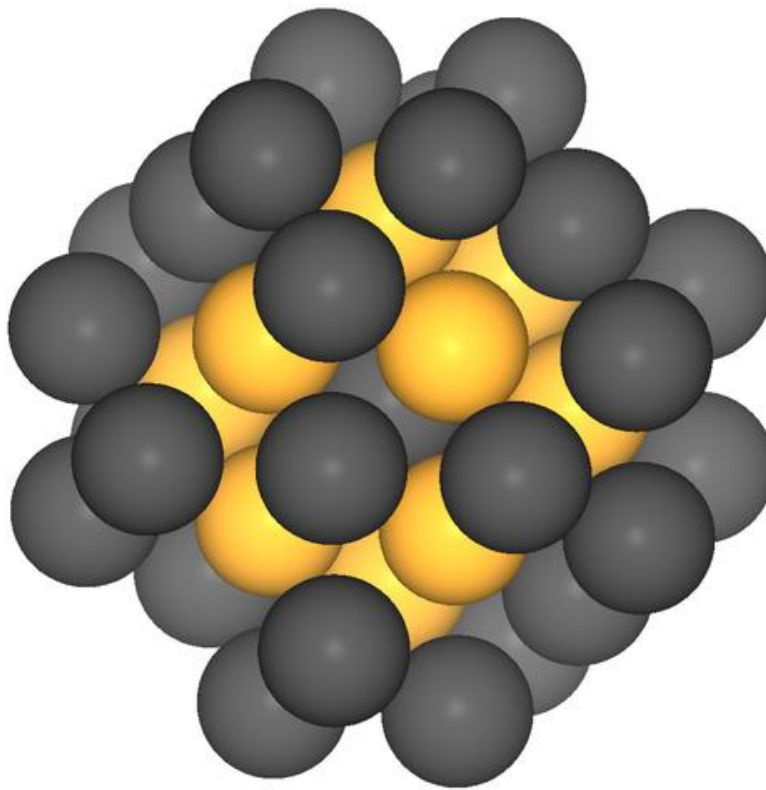
Original publication:

Optimierung der Größe von Platin-Nanopartikeln für eine erhöhte Massenaktivität der elektrochemischen Sauerstoffreduktion
Batyr Garlyyev, Kathrin Kratzl, Marlon Rück, Jan Michalicka, Johannes Fichtner, Jan M. Macak, Tim Kratky, Sebastian Günther, Mirza Cokoja, Aliaksandr S. Bandarenka, Alessio Gagliardi und Roland A. Fischer
Angewandte Chemie 3. Mai 2019 – DOI: 10.1002/ange.201904492
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ange.201904492>

URL for press release: <https://www.tum.de/nc/die-tum/aktuelles/pressemitteilungen/details/35554/> Link zur Pressemitteilung



Die Erstautoren des Projekts in ihrem Labor im Catalysis Research Center (CRC) der Technischen Universität München (TUM): Dr. Batyr Garlyyev, Kathrin Kratzl und Marlon Rück(v.l.n.r.)
Bild: A. Eckert / TUM



Platin-Nanopartikel mit 40 Atomen sollten in Brennstoffzellen die optimale Katalysatorwirkung entfalten. Messungen im Katalysatorforschungszentrum der TUM bestätigten die Prognose.
Bild: Batyr Garlyyev / TUM