

Press release

Technische Universität Wien

Dr. Florian Aigner

11/24/2020

<https://idw-online.de/en/news758551>

Research results, Scientific Publications
Chemistry, Energy, Environment / ecology, Physics / astronomy
transregional, national



Stabile Katalysatoren für die Energiewende

Neue Messungen zeigen: Bei Katalysatoren für Wasserstoffproduktion oder CO₂-Recycling kommt es nicht nur auf das Material an, sondern auch auf seine atomare Oberflächenstruktur.

Auf dem Weg zu einer CO₂-neutralen Wirtschaft müssen wir eine ganze Reihe von Technologien perfektionieren – dazu zählt die elektrochemische Gewinnung von Wasserstoff aus Wasser, die Brennstoffzelle oder auch die Rückführung von Kohlendioxid aus der Atmosphäre in den Kohlenstoffkreislauf. All diese Technologien haben eines gemeinsam: Sie funktionieren nur, wenn man passende Katalysatoren verwendet. Seit vielen Jahren wird daher untersucht, welche Materialien dafür am besten geeignet sind.

An der TU Wien und am Comet Zentrum für Elektrochemie und Oberflächentechnologie CEST in Wiener Neustadt steht für solche Fragen eine weltweit einzigartige Kombination an Untersuchungsmethoden zur Verfügung. Gemeinsam konnte man nun zeigen: Entscheidend ist nicht nur das Material, sondern auch seine Orientierung. Je nachdem in welcher Richtung man einen Kristall schneidet und welche seiner Atome er somit an seiner Oberfläche der Außenwelt präsentiert, kann er ganz unterschiedliches Verhalten zeigen.

Effizienz oder Stabilität

„Für viele wichtige Prozesse in der Elektrochemie verwendet man oft teure Edelmetalle als Katalysatoren, etwa Iridiumoxid- oder Platinpartikel“, sagt Prof. Markus Valtiner vom Institut für Angewandte Physik der TU Wien (IAP). Tatsächlich sind das in vielen Fällen Katalysatoren mit besonders hoher Effizienz. Allerdings gibt es daneben auch noch weitere wichtige Punkte zu beachten, etwa die Stabilität eines Katalysators oder auch die Verfügbarkeit und Recyclingfähigkeit der Materialien. Das effizienteste Katalysatormaterial bringt wenig, wenn es ein seltenes Metall ist, sich bereits nach kurzer Zeit auflöst, sich chemisch verändert oder aus anderen Gründen unbrauchbar wird.

Aus diesem Grund sind andere, nachhaltigere Katalysatoren interessant, auch wenn sie weniger wirksam sind – Zinkoxid beispielsweise. Durch Kombination verschiedener Messmethoden kann man nun zeigen: Die Effektivität und auch die Stabilität solcher Katalysatoren lässt sich deutlich verbessern, wenn man darauf achtet, wie die Oberfläche der Katalysator-Kristalle auf atomarer Skala strukturiert ist.

Auf die Richtung kommt es an

Kristalle können unterschiedliche Oberflächen haben: „Stellen wir uns einen würfelförmigen Kristall vor, den wir in zwei Teile schneiden“, sagt Markus Valtiner. „Wir können den Würfel gerade in der Mitte durchschneiden, sodass zwei Quader entstehen. Oder wir schneiden ihn genau diagonal, im 45-Grad-Winkel. Die Schnittflächen, die wir in diesen beiden Fällen erhalten, sind unterschiedlich: An der Schnittfläche sitzen unterschiedliche Atome in unterschiedlichen Abständen voneinander. Daher können sich diese Oberflächen auch bei chemischen Prozessen sehr unterschiedlich verhalten.“

Zinkoxidkristalle sind nicht würfelförmig, sondern bilden wabenartige Sechsecke aus – aber auch dort gilt dasselbe: Auf die Anordnung der Atome an der Oberfläche kommt es an. „Wenn man genau den richtigen Oberflächenwinkel wählt, dann bilden sich dort mikroskopisch kleine dreieckige Vertiefungen aus, mit einem Durchmesser von nur wenigen Atomen“, berichtet Markus Valtiner. „Dort können sich dann wiederum Wasserstoffatome anlagern, es kommt zu Prozessen, die die Spaltung von Wasser in Wasserstoff unterstützen, dabei aber das Material gleichzeitig stabilisieren.“

Diese Stabilisierung konnte das Forschungsteam nun erstmals genau nachweisen: „Am Katalysator wird Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff aufgespalten. Während dieser Prozess im Gange ist, können wir Flüssigkeitsproben entnehmen und untersuchen, ob sie Spuren des Katalysators enthalten“, erklärt Markus Valtiner. „Dafür muss die Flüssigkeit zuerst in einem Plasma stark erhitzt und in einzelne Atome aufgebrochen werden. Dann trennen wir sie in einem Massenspektrometer auf, sie werden Element für Element sortiert. Wenn der Katalysator stabil ist, sollte man kaum Atome aus dem Katalysatormaterial finden. Bei der Herstellung von Wasserstoff an den atomaren Dreiecksstrukturen konnten wir keinerlei Zersetzung des Materials feststellen.“ Dieser Stabilisierungseffekt ist erstaunlich stark – nun arbeitet das Team daran, Zinkoxid noch effizienter zu machen und das physikalische Prinzip dieser Stabilisierung auf andere Materialien zu übertragen.

Einzigartige Forschungsmöglichkeiten für die Energiewende

An der TU Wien werden atomare Oberflächenstrukturen schon seit vielen Jahren untersucht. „An unserem Institut wurden diese Dreiecksstrukturen vor Jahren erstmals nachgewiesen und auch theoretisch erklärt, und wir sind jetzt die ersten, die ihre Bedeutung für die Elektrochemie demonstrieren konnten“, sagt Markus Valtiner. „Das liegt daran, dass wir hier in der einzigartigen Situation sind, alle nötigen Forschungsschritte unter einem Dach vereinen zu können – von der Probenpräparation bis zur Simulation an Supercomputern, von der Mikroskopie im Ultrahochvakuum bis zum Praxistests in realistischen Umgebungen.“

„Diese Zusammenarbeit unterschiedlicher Spezialrichtungen unter einem Dach ist einzigartig, und unser großer Vorteil, um auf diesem Gebiet weltweit in Forschung und Lehre führend sein zu können“, sagt Carina Brunnhofer, Studentin am IAP.

„In den nächsten zehn Jahren werden wir auf Basis der methodischen Entwicklungen und dem fundamentalen Verständnis der Oberflächenchemie und -physik stabile und kommerziell tragfähige Systeme zur Wasserspaltung und CO₂-Reduktion entwickeln“, sagt Dominik Dworschak, der Erstautor der gerade erschienenen Studie. „Mindestens eine nachhaltige Verdopplung der derzeitigen Stromleistung muss parallel aber auch erreicht werden“, merkt Markus Valtiner an. „Wir befinden uns also auf einem spannenden Weg, auf dem wir nur durch konsequente, branchenübergreifende Forschung und Entwicklung unsere Klimaziele erreichen werden.“

contact for scientific information:

Prof. Markus Valtiner
Institut für Angewandte Physik
Technische Universität Wien
+43 1 58801 134 40
markus.valtiner@tuwien.ac.at

Original publication:

D. Dworschak, C. Brunnhofer, M. Valtiner; Photocorrosion of ZnO Single Crystals during Electrochemical Water Splitting, ACS Appl. Mater. Interfaces 2020, 12, 46, 51530. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsami.0c15508>