

**Press release****Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH****Dr. Antonia Rötger**

02/17/2023

<http://idw-online.de/en/news809530>Research results  
Chemistry, Energy, Physics / astronomy  
transregional, national**Elektrokatalyse - Chemie und Struktur von Eisen- Kobalt-Oxyhydroxiden vermessen**

Ein Team um Dr. Prashanth W. Menezes (HZB/TU-Berlin) hat Kobalt-Eisen-Oxyhydroxide an BESSY II untersucht. Diese Materialklasse zählt zu den besten Anoden-Katalysatoren, um elektrolytisch Wasser aufzuspalten und grünen Wasserstoff zu gewinnen. Insbesondere gelang es, die Oxidationsstufen der aktiven Elemente in verschiedenen Konfigurationen zu bestimmen. Die Ergebnisse könnten zur wissensbasierten Entwicklung neuer hocheffizienter und kostengünstiger katalytisch aktiver Materialien beitragen.

Sobald wie möglich müssen wir ohne fossile Brennstoffe auskommen, nicht nur im Energiesektor, sondern auch in der Industrie. Die aber ist auf Kohlenwasserstoffe und andere chemische Grundstoffe angewiesen, die bisher aus fossilen Ressourcen gewonnen werden. Solche Grundstoffe können im Prinzip mit Hilfe elektrokatalytisch aktiver Materialien und erneuerbar erzeugter Energie auch aus Wasser und Kohlendioxid hergestellt werden. Derzeit bestehen diese Katalysatormaterialien jedoch entweder aus teuren und seltenen Materialien oder sind nicht effizient genug.

Ein Team um Dr. Prashanth W. Menezes (HZB/TU-Berlin) hat nun Einblicke in die Chemie eines der aktivsten Katalysatoren für die anodische Sauerstoffentwicklungsreaktion (OER) gewonnen. Dies ist eine Schlüsselreaktion bei der Wasserspaltung, die Elektronen für die Wasserstoffentwicklungsreaktion (HER) bereit stellt. Der Wasserstoff kann dann zum Beispiel zu Kohlenwasserstoffen weiter verarbeitet werden. Darüber hinaus spielt die OER auch bei der direkten elektrokatalytischen Reduktion von Kohlendioxid zu Alkoholen oder Kohlenwasserstoffen eine zentrale Rolle.

Eine vielversprechende Klasse von Elektrokatalysatoren für OER sind Kobalt-Eisen-Oxyhydroxide. Das Forschungsteam analysierte eine Reihe von helikalen  $\text{LiFe}_{1-x}\text{Co}_x$ -Borophosphaten an BESSY II, die sich während der OER zu aktiven Kobalt-Eisen-Oxyhydroxiden umstrukturieren. Mit verschiedenen in situ Spektroskopietechniken gelang es, die Oxidationsstufen der Element Eisen (Fe) und Kobalt (Co) zu bestimmen.

„Eisen spielt eine wichtige Rolle in OER-Katalysatoren auf Kobalt-Basis. Der genaue Grund dafür ist jedoch umstritten. Die meisten Studien gehen davon aus, dass Eisen in niedrigeren Oxidationsstufen (+3) Teil der aktiven Struktur ist. In unserem Fall konnten wir jedoch Eisen in Oxidationsstufen größer als 4 nachweisen, und außerdem zeigen, dass sich Bindungsabstände deutlich verkürzt haben. Damit können wir das katalytisch aktive Zentrum deutlich genauer verstehen“, so Menezes.

Elektrokatalysatoren ermöglichen den Ladungstransfer vom Substrat (hier Wasser) zu den Elektroden, was meist mit einer Änderung der Oxidationsstufen der Übergangsmetalle einhergeht. Diese Veränderungen des Oxidationszustands sind jedoch manchmal zu schnell, um erkannt zu werden. Dies macht es schwierig, das Funktionsprinzip des Katalysators zu verstehen, insbesondere wenn er zwei potenziell aktive Elemente wie Eisen und Kobalt enthält. „Wir hoffen, dass die detaillierte elektronische und strukturelle Beschreibung wesentlich zur Verbesserung von

OER-Katalysatoren beitragen kann", sagt Menezes.

Anmerkung: An dem Team waren Wissenschaftler des CatLab am Helmholtz-Zentrum Berlin, der Technischen Universität Berlin und der Freien Universität Berlin beteiligt. Die Röntgenabsorptionsspektroskopie wurde an der Beamline KMC-3 bei BESSY II durchgeführt.

contact for scientific information:

prashant.menezes@helmholtz-berlin.de

Original publication:

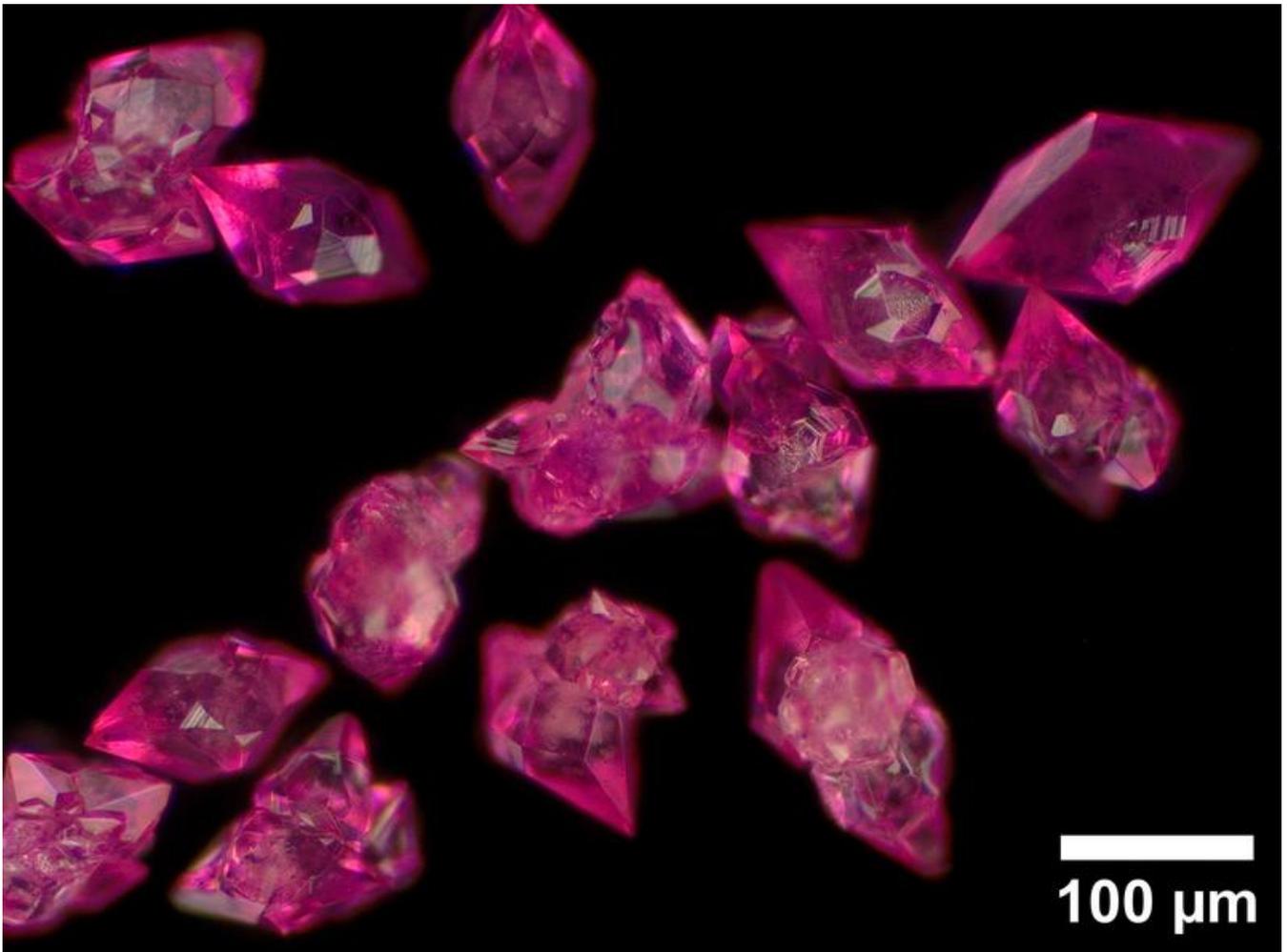
Advanced Energy Materials (2023):

In Situ Detection of Iron in Oxidation States  $\geq$  IV in Cobalt-Iron Oxyhydroxide Reconstructed during Oxygen Evolution Reaction

Lukas Reith, Jan Niklas Hausmann, Stefan Mebs, Indranil Mondal, Holger Dau, Matthias Driess, Prashanth W. Menezes

DOI: 10.1002/aenm.202203886

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/aenm.202203886>



LiFex-1Cox Borophosphate könnten als preiswerte Anoden für die Erzeugung von grünem Wasserstoff eingesetzt werden. Nun hat ein Team an BESSY II untersucht, was an den katalytisch aktiven Molekülzentren passiert.  
P. Menezes / HZB / TU Berlin