

Press release

Universität Duisburg-Essen

Birte Vierjahn

03/27/2023

<http://idw-online.de/en/news811519>

Research results, Scientific Publications
Chemistry, Energy, Materials sciences
transregional, national



Offen im Denken

Wasserstoffherzeugung durch Elektrolyse: Modellvorstellung widerlegt

Wasserstoff nur aus Wasser und Sonnenenergie herstellen – an diesem nachhaltigen Weg arbeiten Forschende weltweit. Theoretiker:innen unterstützen die Entwicklung, indem sie vielversprechende Materialien und Methoden aufzeigen. Prof. Kai S. Exner aus der Theoretischen Anorganischen Chemie der Universität Duisburg-Essen (UDE) konnte nun nachweisen, dass bisherige Modellierungen von zu einfachen Mechanismen ausgegangen sind und daher keine verlässlichen Ergebnisse liefern. Seine Analyse veröffentlichte er im Fachmagazin *Materials Horizons*.

Die Elektrolyse findet zwischen zwei Polen statt: Der gewünschte Wasserstoff (H₂) entsteht an der Kathode, parallel wird an der Anode Sauerstoff (O₂) freigesetzt. Beide Seiten sind voneinander abhängig, daher steht die Forschung unter anderem vor folgender Herausforderung: Die Bildung von H₂ funktioniert bereits recht effizient, doch die Sauerstoffgasentwicklung auf der anderen Seite benötigt die sechs- bis siebenfache Überspannung, sodass dieser Teil des Prozesses die Energieeffizienz bestimmt.

Daher konzentriert sich die Forschung derzeit auf die Anode. Ziel ist es, hierfür bessere Materialien zu entwickeln, die auch bei einer niedrigeren Überspannung hinreichend aktiv und stabil sind. Begleitet wird diese Entwicklungsarbeit von theoretischen Modellierungen, die mit Näherungen und Annahmen arbeiten.

Eines der vermeintlichen Paradigmen war bisher die Annahme, dass der Prozess der Sauerstoffgasentwicklung auf einem einzigen Mechanismus beruht, der drei definierte Zwischenprodukte enthält. Prof. Kai S. Exner, Theoretischer Elektrochemiker an der UDE, hat diese Annahme erstmals in Frage gestellt: „In der Literatur habe ich Hinweise auf andere beteiligte Mechanismen gefunden – insgesamt sechs verschiedene.“

Er konstruierte daraufhin Vulkankurven für alle sechs Mechanismen – ein Konzept aus der Katalysatorforschung – um Aktivitätstrends zu erfassen. Sein Ergebnis: Nur inaktive Katalysatoren lassen sich mit dem bisherigen Modell eines einzigen Mechanismus modellieren. Bei den entscheidenden hochaktiven Katalysatoren hingegen gehen die Mechanismen mit zunehmender Überspannung ineinander über.

„Die bisherige Vereinfachung ist daher nicht gerechtfertigt“, schließt Exner. „Stattdessen müssen wir eine hinreichende Anzahl von Mechanismen in unsere Modellierungen einbeziehen, um präzise Vorhersagen treffen zu können.“

Seine Erkenntnisse fließen unter anderem ein in die Arbeit des Sonderforschungsbereichs/Transregio Heterogene Oxidationskatalyse in der Flüssigphase, an dem Forschende der UDE maßgeblich beteiligt sind. Dieser entwickelt katalytische Materialien und Prozesse, um Chemikalien nachhaltig und effizient herzustellen.

Redaktion: Birte Vierjahn, Tel. 0203/37 9-2427, birte.vierjahn@uni-due.de

contact for scientific information:

Prof. Dr. Kai S. Exner, Theoretische Anorganische Chemie, Tel. 0201/18 3-2992, kai.exner@uni-due.de

Original publication:

<https://doi.org/10.1039/D3MH00047H>

