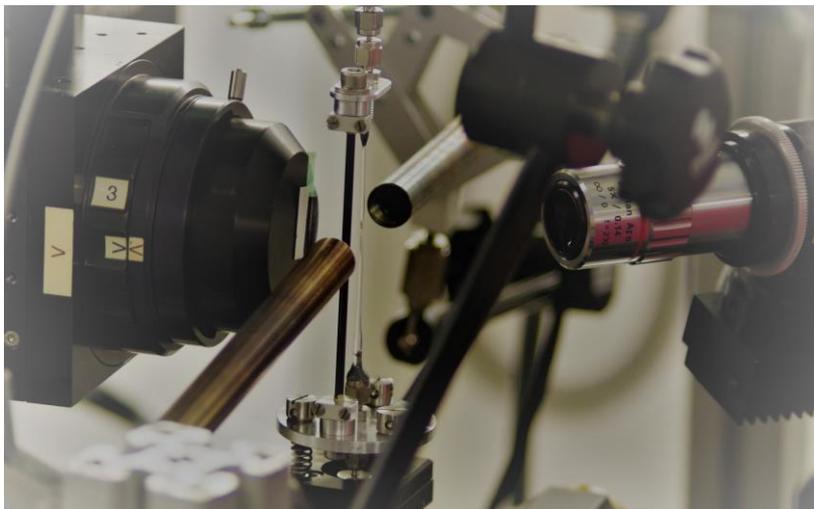


Dreidimensionaler Blick in aktive Katalysatoren

Am KIT eingesetzte operando-Röntgenspektroskopie eröffnet neue Möglichkeiten für die Material- und Reaktionsdiagnostik – Forscher berichten in *Nature Catalysis*



Die operando-Röntgenspektroskopie zeigt, was in jedem einzelnen Teil eines funktionierenden Katalysators geschieht. (Foto: Dr. Dmitry Doronkin, KIT)

Struktur und Funktion von Katalysatoren in Aktion zu verstehen – das ermöglicht ein von Forschenden des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) mit Kolleginnen und Kollegen an der Synchrotron Lichtquelle Schweiz SLS des Paul Scherrer Instituts PSI in der Schweiz und an der European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Frankreich eingesetztes innovatives Diagnoseinstrument: Die operando-Röntgenspektroskopie visualisiert Struktur und Gradienten komplexer technischer Katalysatoren in 3D und erlaubt einen Blick ins Innere funktionierender chemischer Reaktoren. Darüber berichten die Forschenden nun in *Nature Catalysis*. (DOI: 10.1038/s41929-020-00552-3)

Die Katalyse ist für viele Branchen unentbehrlich. So werden 95 Prozent aller Chemikalien mithilfe von Katalysatoren hergestellt. Auch für Energietechnologien und beim Umweltschutz übernehmen Katalysatoren eine Schlüsselrolle. Katalysatoren sind Stoffe, die chemische Reaktionen beschleunigen, um Energie zu sparen und unerwünschte Nebenprodukte zu vermeiden. Auf diesem chemisch-physikalischen Prinzip basieren ganze Anlagen, beispielsweise Katalysatoren in

Monika Landgraf
Leiterin Gesamtkommunikation
Pressesprecherin

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

Weiterer Pressekontakt:

Margarete Lehné
Stellv. Pressesprecherin
Tel.: +49 721 608-41157
E-Mail:
margarete.lehne@kit.edu

Weitere Materialien:

Zur Veröffentlichung in *Nature Catalysis* (Abstract):
<https://www.nature.com/articles/s41929-020-00552-3>

Fahrzeugen oder Kraftwerken zur Reduktion von Schadstoffemissionen in der Abluft. Technische und industrielle Katalysatoren werden unter anderem auch in der Düngemittel- und in der Polymerherstellung eingesetzt. Oft müssen sie einem hohen Druck standhalten und eine hohe mechanische Festigkeit aufweisen. Darüber hinaus arbeiten sie unter dynamischen Umgebungsbedingungen. Bei Katalysatoren bringen schon kleine Effizienzsteigerungen wesentliche Vorteile für Mensch und Umwelt, sei es bei der Entfernung von Schadstoffen wie Kohlenmonoxid, Stickoxiden und Feinstaub aus Abgasen, sei es bei der Produktion von grünem Wasserstoff. Um katalytische Materialien und Methoden zu verbessern, bedarf es allerdings eines genauen Verständnisses ihrer Funktion. „Ob in einem großen chemischen Reaktor, in einer Batterie oder unter einem Auto – technische und industrielle Katalysatoren besitzen eine hochkomplexe Struktur“, sagt Dr. Thomas Sheppard vom Institut für Technische Chemie und Polymerchemie (ITCP) des KIT. „Um wirklich zu verstehen, wie diese Materialien funktionieren, müssen wir einen Blick in das Innere des Reaktors werfen, während der Katalysator arbeitet – am besten mit einem analytischen Werkzeug, das einen Einblick in die komplexe 3D-Struktur des aktiven Katalysators erlaubt.“

Operando-Röntgenspektroskopie liefert 3D- und wichtige chemische Informationen

Thomas Sheppard leitete eine Studie zu Fahrzeugkatalysatoren, über deren Ergebnisse die beteiligten Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler vom KIT sowie vom PSI und von der ESRF nun in der Zeitschrift *Nature Catalysis* berichten. Zur Untersuchung der Katalysatoren setzte das Team ein neu entwickeltes Set-up ein und führte Tomografie-Experimente an Synchrotronstrahlungsanlagen in der Schweiz und in Frankreich durch. Die Computertomografie liefert 3D-Bilder einer Probe, und zwar sowohl von außen als auch von innen, ohne dass die Probe aufgeschnitten werden muss. Anhand eines speziellen Reaktors verfolgten die Forschenden einen aktiven katalytischen Prozess mit Tomografie und Röntgenspektroskopie. So gelang es ihnen, die 3D-Struktur eines Katalysators zur Emissionskontrolle unter Bedingungen zu beobachten, die denen in realen Autoabgasen entsprechen. Diese sogenannte operando-Röntgenspektroskopie liefert nicht nur die 3D-Struktur der Probe, sondern auch wichtige chemische Informationen.

Methode eignet sich für verschiedene Katalysatoren

„Da Katalysatoren oft eine so komplexe und uneinheitliche Struktur aufweisen, ist es wichtig zu wissen, ob das gesamte Katalysatorvolumen oder nur Teile davon ihre chemische Funktion wie vorgesehen erfüllen“, erklärt Johannes Becher vom ITCP, einer der Hauptautoren der Studie. „Mit der operando-Röntgenspektroskopie können wir die

spezifische Struktur und Funktion jedes einzelnen Teils betrachten. Dies zeigt uns, ob der Katalysator mit maximaler Effizienz arbeitet und – was noch wichtiger ist – ermöglicht uns, die zugrunde liegenden Prozesse zu verstehen.“ Während der Reaktion beobachtete das Team einen strukturellen Gradienten der aktiven Kupferspezies innerhalb des Katalysators, der zuvor mit herkömmlichen analytischen Werkzeugen nicht nachgewiesen werden konnte. Dies ist eine wichtige diagnostische Information für die Leistung von Katalysatoren zur Emissionskontrolle. Die Methode an sich lässt sich jedoch für viele verschiedene Katalysatoren und chemische Prozesse anwenden.

Neue Möglichkeiten für die Material- und Reaktionsdiagnostik

Die Studien des Teams zeigen, wie die Visualisierung des chemischen Zustands eines aktiven Katalysators in 3D neue Möglichkeiten für die Material- und Reaktionsdiagnostik eröffnet. „Bisher war es nicht möglich zu untersuchen, welche Reaktionen in einem beliebig gewählten Teil eines funktionierenden Katalysators ablaufen, ohne sie zu stören. Nun können wir genau verfolgen, welche Reaktionen ablaufen, wo und warum“, erklärt Professor Jan-Dierk Grunwaldt vom ITCP. „Dies ist der Schlüssel zu einem besseren Verständnis der chemischen Prozesse und zur Entwicklung besserer und effizienterer Katalysatoren in der Zukunft.“ Studien mit der operando-Röntgenspektroskopie lassen sich an verschiedenen Synchrotronstrahlungsquellen realisieren, sofern eine geeignete Probenumgebung vorhanden ist. Die Forschungsgruppen von Jan-Dierk Grunwaldt und Thomas Sheppard werden ihre Untersuchungen im neuen Sonderforschungsbereich „TrackAct“ am KIT fortsetzen. „TrackAct“ zielt darauf, das Design und die Effizienz von Katalysatoren zur Emissionskontrolle zu verstehen und zu verbessern.

Originalpublikation

Johannes Becher, Dario Ferreira Sanchez, Dmitry E. Doronkin, Deniz Zengel, Debora Motta Meira, Sakura Pascarelli, Jan-Dierk Grunwaldt, Thomas L. Sheppard: Chemical gradients in automotive Cu-SSZ-13 catalysts for NOx removal revealed by operando X-ray spectrotomography. Nature Catalysis, 2020. DOI: 10.1038/s41929-020-00552-3

Abstract unter <https://www.nature.com/articles/s41929-020-00552-3>

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:
<https://www.kit.edu/kit/presseinformationen.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.