

## MEHR LEISTUNG DURCH DEFEKTE

Forscher haben am HZB herausgefunden, dass **Fehlorderungen in der Kristallstruktur** die Reaktionsgeschwindigkeit eines Katalysators zur Methanolsynthese erhöhen.

**M**anchmal eilt die industrielle Anwendung dem wissenschaftlichen Verständnis voraus: So hat sich in der Herstellung von Methanol ein Katalysator aus Kupfer, Zink- und Aluminiumoxid ( $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ ) bewährt, der die besten Ergebnisse liefert. Doch warum das so ist, war Wissenschaftlern bislang ein Rätsel. „Wegen seiner komplexen Nanostruktur wurde das Verfahren bislang nicht besonders gut verstanden“, erklärt Malte Behrens vom Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, „mit unseren Erkenntnissen gibt es nun eine Antwort.“ Er leitete eine Gruppe von 14 Wissenschaftlern unterschiedlicher Einrichtungen, die Arbeiten an den Großgeräten wurden mit den Teams der Helmholtz-Zentren durchgeführt.

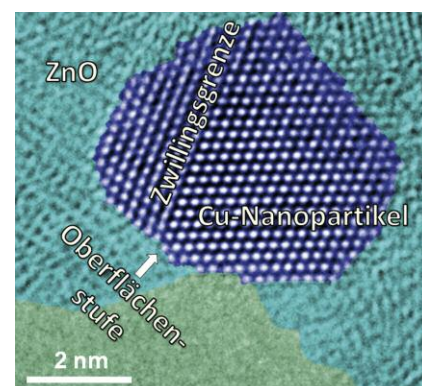
Methanol zählt mit einer weltweiten Jahresproduktion von rund 50 Millionen Tonnen zu den wichtigsten Grundchemikalien, es kommt zum Beispiel bei der Herstellung von Polymeren zum Einsatz. In Bezug auf die Energiewende könnte Methanol künftig auch eine Rolle als flüssiger Kraftstoff spielen. Das in der Industrie verwendete Methanol wird derzeit aus Kohle und Erdöl gewonnen. Die Herstellung läuft am Methanolsynthesekatalysator bei Temperaturen von 200 bis 300 °C und unter einem Druck von 50 bis 100 bar ab. Behrens und seine Kollegen haben für ihre Untersuchung die Ergebnisse von fünf unterschiedlichen Katalysatoroberflächen mit denen einer reinen Kupferoberfläche verglichen. Die Größe der Nanopartikel entsprach mit 5 bis 15 nm der Größe industrieller Katalysatoren, ebenso vergleichbar waren die Reaktionsbedingungen wie Druck, Temperatur und die verwendeten Synthesegase.

### Übereinstimmung von Theorie und Experiment

„Die Neutronenexperimente zeigten, dass die besonders aktiven Katalysatoren die mit den meisten Baufehlern in der Kristallstruktur sind“, erklärt Michael Tovar, Instrumentverantwortlicher für das Neutronenpulverdiffraktometer E9 am HZB. Während der Katalysatorsynthese entstehen sogenannte Kristallbaufehler, das heißt Abweichungen von der Idealstruktur in Form von Versetzungen, Korngrenzendefekten und Stapelfehlern. Wo diese auf die Oberfläche der Kupferpartikel treffen, fehlen den Atomen ihre direkten

Nachbarn und es entstehen besonders reaktive Zentren mit hoher Oberflächenenergie. Wissenschaftler der Universität Stanford lieferten parallel zu den Experimenten Berechnungen mithilfe der Dichtefunktionaltheorie. „Die Theoretiker haben gezeigt, dass die Anwesenheit von Zink und die Oberflächenstruktur eine wesentliche Rolle spielen“, erläutert Behrens, „hier passte sehr gut, dass sich die beobachteten Experiment-Eigenschaften auch in der Theorie als entscheidende Parameter erwiesen.“ Die Wissenschaftler gehen davon aus, dass die Effizienz des Katalysators durch die Oberflächendefekte erheblich höher ist, als die bisher auf Grundlage der gesamten freiliegenden Cu-Oberfläche berechneten Werte.

Die Kooperation hat sehr gut funktioniert und wird fortgesetzt, berichtet Behrens: „Wir hatten seit jeher eine enge Zusammenarbeit mit den Kolleginnen und Kollegen vom HZB. Aktuell untersuchen wir an der Neutronenquelle in einem Langzeitprojekt die Katalysatorstabilität. Dabei gehen wir mit dem Neutronen-Diffraktometer der Frage nach, wie sich die Defektstruktur im Laufe der Zeit verändert und wie der Methanolsynthese-Katalysator in unterschiedlichen Umgebungen reagiert.“



Elektronenmikroskopische Aufnahme eines Kupfernanopartikels in einem hochaktiven Cu/ZnO-Methanolsynthese-Katalysator. Gitterbaufehler wie die hier gezeigte Zwillingsgrenze enden an der Partikeloberfläche und führen zu Oberflächendefekten.

Science 336, 893 (2012); (DOI: 10.1126/science.1219831): The Active Site of Methanol Synthesis over Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Industrial Catalysts, M. Behrens, F. Studt, I. Kasatkin, S. Kühl, M. Hävecker, F. Abild-Pedersen, S. Zander, F. Girgsdies, P. Kurr, B.-J. Kniep, M. Tovar, R. W. Fischer, J. K. Nørskov, R. Schlögl