

Methanolsynthese

Einblicke in die Struktur eines rätselhaften Katalysators

Der Katalysator für die Produktion von Methanol hatte sich in der Vergangenheit allen Versuchen, seine Struktur aufzuklären, entzogen. Jetzt wissen Forscher mehr über sein aktives Zentrum.

Methanol ist eine der wichtigsten Basischemikalien, etwa um Kunststoffe oder Baumaterialien herzustellen. Um den Produktionsprozess noch effizienter gestalten zu können, wäre es hilfreich, mehr über den Kupfer/Zinkoxid/Aluminiumoxid-Katalysator zu wissen, der bei der Methanolherstellung im Einsatz ist. Bislang war es jedoch nicht möglich, seine Oberfläche unter Reaktionsbedingungen mit strukturaufklärenden Methoden zu untersuchen. Einem Team der Ruhr-Universität Bochum (RUB) und des Max-Planck-Instituts für Chemische Energiekonversion (MPI CEC) ist es dennoch gelungen, Einblicke in den Aufbau seines aktiven Zentrums zu gewinnen. Diese beschreiben die Wissenschaftler in der Zeitschrift Nature Communications vom 4. August 2020.

Das Team zeigte erstmals, dass die Zink-Komponente des aktiven Zentrums positiv geladen ist und dass der Katalysator sogar zwei kupferbasierte aktive Zentren besitzt. „Über den Zustand der Zink-Komponente am aktiven Zentrum wurde seit Einführung des Katalysators in den 1960er-Jahren kontrovers diskutiert. Aus unseren Erkenntnissen können wir nun zahlreiche Ideen ableiten, wie wir den Katalysator in Zukunft optimieren können“, resümiert Prof. Dr. Martin Muhler, Leiter des Lehrstuhls für Technische Chemie an der RUB und Max Planck Fellow am MPI CEC. Er kooperierte für die Arbeiten mit dem Bochumer Forscher Dr. Daniel Laudenschleger und dem Mülheimer Forscher Dr. Holger Ruland.

Methanol nachhaltig herstellen

Die Arbeiten waren eingebettet in das Projekt Carbon2Chem, das zum Ziel hat, Hüttengase, die bei der Stahlproduktion anfallen, für die Herstellung von Chemikalien zu nutzen und so den CO₂-Ausstoß zu verringern. Auch für eine nachhaltige Methanolsynthese könnten Hüttengase als Ausgangsstoff dienen, zusammen mit elektrolytisch hergestelltem Wasserstoff. Im Rahmen von Carbon2Chem untersuchte das Forschungsteam zuletzt, wie sich Verunreinigungen in Hüttengasen, die zum Beispiel in der Kokerei oder dem Hochofen entstehen, auf den Katalysator auswirken. Diese Arbeiten ermöglichten letztendlich auch die Erkenntnisse über den Aufbau des aktiven Zentrums.

Aktives Zentrum für Analyse deaktiviert

Die Forscher hatten stickstoffhaltige Substanzen – Ammoniak und Amine – als Verunreinigungen identifiziert, die als Katalysatorgift wirken. Sie deaktivieren den Katalysator, allerdings nicht dauerhaft: Verschwinden die Verunreinigungen, erholt sich der Katalysator von selbst. Mithilfe einer einzigartigen selbst gebauten Forschungsapparatur – einer Flussapparatur mit integrierter Hochdruck-Pulseinheit – leiteten die Forscher Ammoniak und Amine über die Katalysatoroberfläche, wodurch sie das aktive Zentrum mit Zink-Komponente zeitweilig deaktivierten. Trotz dieser Deaktivierung der Zink-Komponente konnte weiterhin eine andere Reaktion am Katalysator stattfinden: nämlich die Umsetzung von Ethen zu Ethan. Auf diese Weise wiesen die Forscher ein parallel arbeitendes zweites aktives Zentrum nach, das metallisches Kupfer beinhaltet, aber keine Zink-Komponente besitzt.

Da Ammoniak und die Amine an positiv geladene Metallionen auf der Oberfläche gebunden werden, war damit klar, dass Zink als Teil des aktiven Zentrums eine positive Ladung trägt.

Förderung

Das Bundesministerium für Bildung und Forschung förderte die Arbeiten im Rahmen des Projekts Carbon2Chem (Förderkennzeichen 03EK3039E).

Originalveröffentlichung

Daniel Laudenschleger, Holger Ruland, Martin Muhler: Identifying the nature of the active sites in methanol synthesis over Cu/ZnO/Al₂O₃ catalysts, in: Nature Communications, 2020, DOI: 10.1038/s41467-020-17631-5

Pressekontakt

Prof. Dr. Martin Muhler
Lehrstuhl für Technische Chemie
Fakultät für Chemie und Biochemie
Ruhr-Universität Bochum
Tel.: +49 234 32 26745
E-Mail: muhler@techem.rub.de

(Herausgeber der Pressemitteilung: Ruhr-Universität Bochum)