

# WIRTSCHAFTSIMPULSE DURCH FORSCHUNG

## CO<sub>2</sub>-Umwandlung mittels Design-Katalysatoren

Der Klimawandel stellt eine der größten Herausforderungen des 21. Jahrhunderts dar. Es herrscht ein breiter, gesellschaftspolitischer Konsens in der EU darüber, dass der Mensch seit der Industriellen Revolution eine Erhöhung der weltweiten Temperatur um etwa ein Grad verursacht hat. Laut eines Berichts des Weltklimarates [1] lag die Durchschnittstemperatur im Zeitraum 2006–2015 um 0,87 °C höher als im 19. Jahrhundert und es wird bei momentanen Emissionswerten ein weiterer Anstieg von etwa 0,2 °C pro Jahrzehnt prognostiziert.

Die Folgen dieses Temperaturanstiegs kann man bereits heute beobachten – häufigere und extremere Wetterphänomene wie Stürme und Dürren, Rückgang von Gletschern und Polareis, irreparable Schäden an Ökosystemen wie Korallenriffen, usw.

Um diesen Entwicklungen entgegenzusteuern, haben sich beinahe alle Nationen im Zuge des Pariser Klimaschutzabkommens von 2015 [2] darauf geeinigt, die CO<sub>2</sub>-Emissionen zu verringern, um die globale Erwärmung auf unter 2 °C zu beschränken.

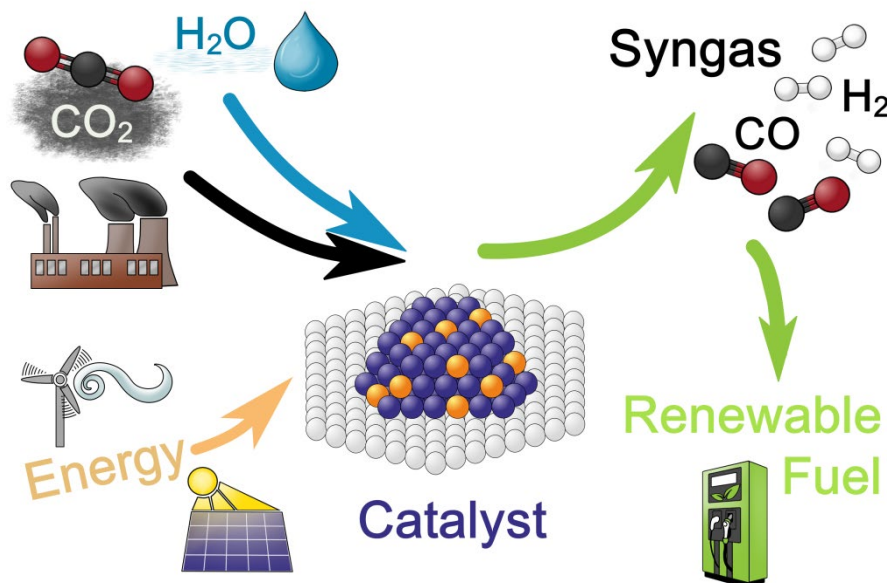


Abbildung 1: Schematische Darstellung eines katalytischen Prozesses, bei dem aus CO<sub>2</sub>, Wasserdampf und (erneuerbarer) Energie so genanntes Synthesegas (Syngas) gewonnen wird, das in weiterer Folge zur Herstellung erneuerbarer Energieträger verwendet werden kann. So ein Prozess wäre doppelt nützlich: Zum einen kann damit Energie aus nicht-fossilen Quellen für spätere Verwendung gespeichert werden – zum anderen wird CO<sub>2</sub> aus der Atmosphäre entfernt.

Zwei mögliche Maßnahmen, um dieses Ziel zu erreichen, sind die verstärkte Nutzung von erneuerbaren Energien und Treibstoffen (anstelle von fossilen Brennstoffen) sowie die Nutzbarmachung von freigesetztem CO<sub>2</sub> als Ausgangsstoff zur Erzeugung von erneuerbaren Energieträgern.

## WIRTSCHAFTSIMPULSE DURCH FORSCHUNG

Abbildung 1 zeigt schematisch einen katalytischen Prozess, der nicht nur beides leisten kann, sondern auch noch zwei Probleme dieser beiden Maßnahmen löst: CO<sub>2</sub> (bspw. aus Industrieabgasen) wird an einer Katalysatoroberfläche aktiviert. Diese Aktivierung ist notwendig, da CO<sub>2</sub> an sich sehr reaktionsträge ist. Anschließend kann unter Aufwendung von erneuerbarer Energie – z. B. Wind- oder Solarenergie – Synthesegas (Syngas) hergestellt werden, das in einem weiteren Schritt zu erneuerbarem Treibstoff (wie zum Beispiel Methanol) umgesetzt werden kann. In dieser Form kann die Energie auch gespeichert werden, wodurch auch das Problem überschüssiger elektrischer Energie (z. B. durch saisonale und tageszeitabhängige Schwankungen bei Wind und Sonneneinstrahlung) reduziert werden kann.

Im Rahmen unseres EU-Projektes „TUCAS“ [3] beschäftigen wir uns mit neuartigen Oxidkatalysatoren auf Perowskit-Basis, die solche Prozesse ermöglichen. Bei Perowskiten handelt es sich um eine Klasse an Materialien, die aus drei Elementen aufgebaut sind und nach dem Mineral Perowskit (chemisch Calciumtitanat – CaTiO<sub>3</sub>) benannt sind. Zwei verschiedene positiv geladene Ionen A und B befinden sich an den Ecken bzw. in der Mitte eines Würfels, während negativ geladene Sauerstoffatome einen Oktaeder um das B-Ion bilden (siehe Abbildung 2 oben).

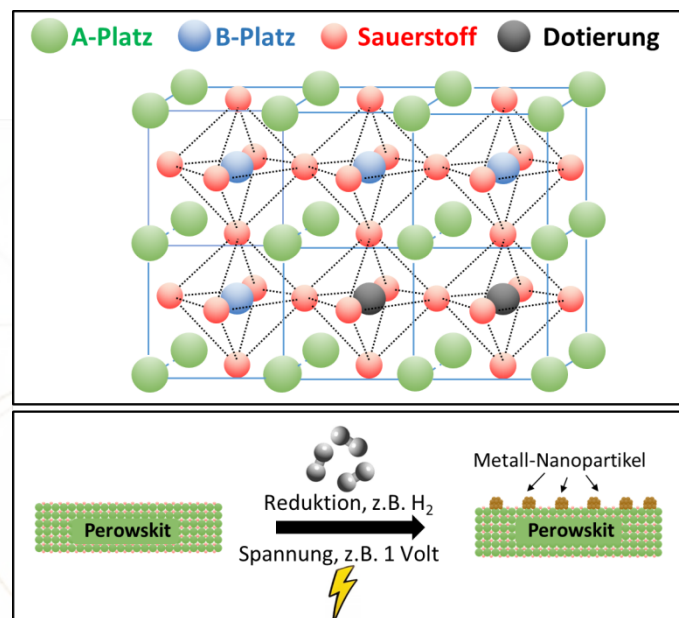
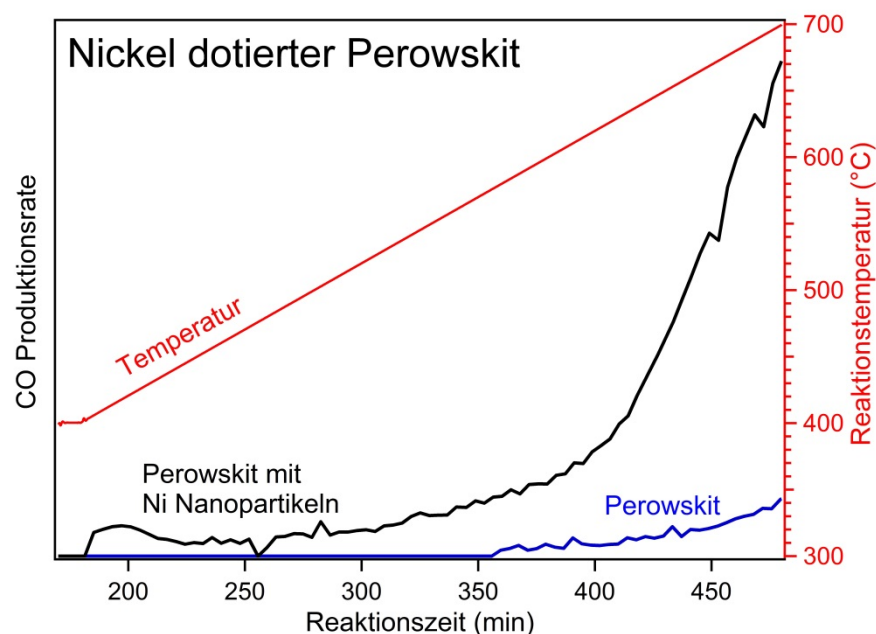


Abbildung 2 oben: Die Grundstruktur eines Minerals aus der Klasse der Perowskite – Minerale, die gemäß der Formel ABO<sub>3</sub> aufgebaut sind. Typische „A-Platz“-Ionen (grün) sind z. B. La<sup>3+</sup>, Nd<sup>3+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, ... ; verbreitete „B-Platz“-Ionen (blau) sind bspw. Fe<sup>3+</sup>, Ti<sup>4+</sup>, ... Das Anion Sauerstoff ist rot und Dotierungselemente, die zu den gewünschten Eigenschaften führen, sind schwarz dargestellt. Als Dotierungselemente kommen z. B. Co<sup>2+</sup> und Ni<sup>2+</sup> in Frage. Abbildung 2 unten: Schematische Darstellung eines dotierten Perowskits vor (links) und nach (rechts) einer Vorbehandlung (bspw. Reduktion in Wasserstoffatmosphäre oder Anlegen einer Spannung) – die Dotierungselemente wandern an die Oberfläche und bilden katalytisch aktive Metall-Nanopartikel. Hierbei spricht man von Exsolution.

## WIRTSCHAFTSIMPULSE DURCH FORSCHUNG

Diese Art von Katalysatoren ist aus zwei Gründen von großem Interesse: Es ist möglich, durch Oberflächenbehandlung solcher Katalysatoren (Reduktion in Wasserstoffatmosphäre, Anlegen von Spannung,...) katalytisch aktive metallische Nanopartikel aus den Ionen des B-Platzes zu erzeugen, was zu einer deutlichen Erhöhung der katalytischen Aktivität führt – dieser in Abbildung 2 unten dargestellte Prozess wird Exsolution genannt [4].

Außerdem können die Eigenschaften durch Dotierung in weiten Bereichen an die gewünschte Anwendung angepasst werden. Abbildung 2 oben zeigt beispielhaft Dotierung am B-Platz. Wir verwenden in unserer Forschung Perowskite auf Eisenoxidbasis, deren katalytische Eigenschaften durch B-Platz-Dotierung mit Kobalt oder Nickel (d.h. Eisen wird ersetzt) verbessert werden können. Diese Katalysatoren werden dann auf ihre Fähigkeit, CO<sub>2</sub> zu aktivieren, getestet: Abbildung 3 zeigt die CO-Produktionsrate bei der Methan-Trockenreformierung, bei der CO<sub>2</sub> und Methan in CO und Wasserstoff (Synthesegas) umgewandelt werden. Bei der reversen Wassergas-Shift-Reaktion – ebenfalls eine Reaktion, die CO<sub>2</sub> verbraucht – konnten wir ebenfalls deutlich gesteigerte Umsatzraten durch Metall-Nanopartikel an der Katalysatoroberfläche beobachten.



**Abbildung 3:** Schematischer Verlauf der CO Produktionsrate beim Prozess der Methan-Trockenreformierung auf einem mit Nickel dotiertem Katalysator. Es wird die unterschiedliche Performance zwischen Oberfläche mit (schwarz) und ohne (blau) Nanopartikeln gezeigt.

Wir konnten beindruckend zeigen, dass sich unsere neuartigen Perowskit-Katalysatoren mit Metall-Nanopartikeln auf der Oberfläche sehr gut zur Verwertung von freigesetztem CO<sub>2</sub> eignen und somit auch zur effizienten Speicherung chemischer Energie beitragen können.

# WIRTSCHAFTSIMPULSE DURCH FORSCHUNG

## Referenzen:

[1] IPCC, 2018: *Global Warming of 1.5 °C. An IPCC Special Report on the impacts of global warming of 1.5 °C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty*. Zu finden auf: <https://www.ipcc.ch/sr15/>

[2] [https://ec.europa.eu/clima/policies/international/negotiations/paris\\_de](https://ec.europa.eu/clima/policies/international/negotiations/paris_de)

[3] Finanziert durch das „EU Horizon 2020 Research and Innovation Programme“ des European Research Council (ERC) – ERC Starting Grant Nr. 755744.

[4] H. Tanaka, et al.; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2006**, 45, 5998-6002.

## Kontakt:



Priv. Doz. Dr. Christoph Rameshan  
[christoph.rameshan@tuwien.ac.at](mailto:christoph.rameshan@tuwien.ac.at)  
 E165 – Institut für Materialchemie  
 Technische Universität Wien

