

## Brennstoffzellen mit Ethanol?

Ulmer Forscher wissen, in welche Richtung sie forschen müssen

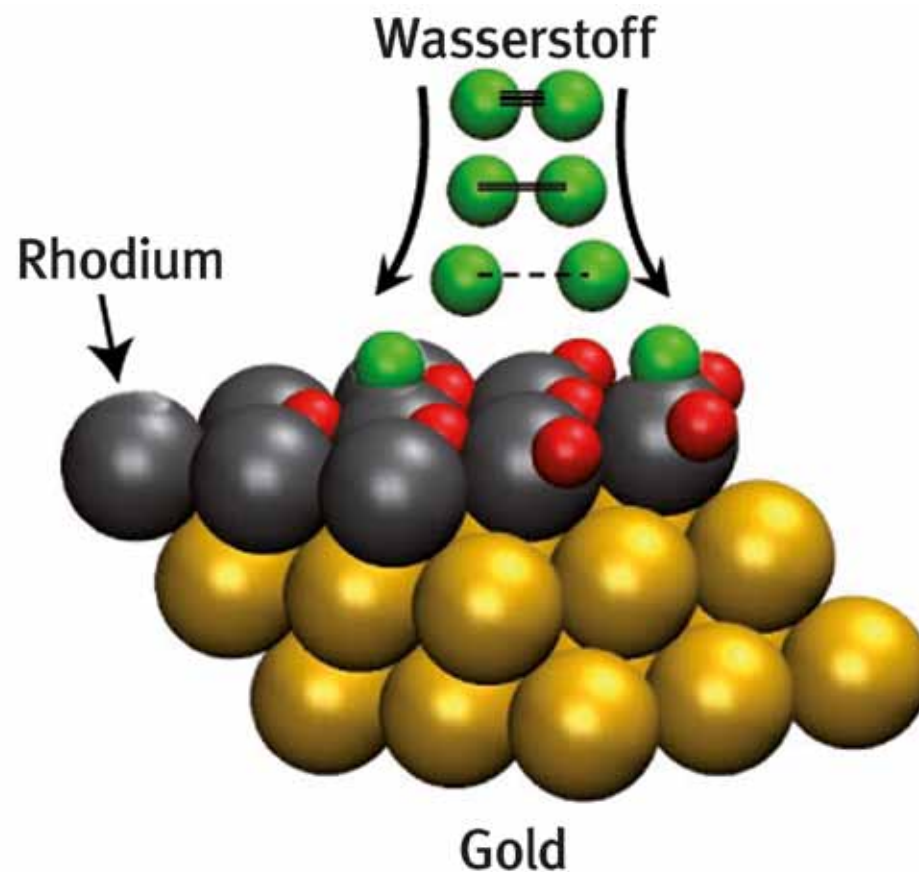
In elektrochemischen Energiespeichern und -wandlern, seien es Batterien oder Brennstoffzellen, müssen die Reaktionen schnell ablaufen, damit die Energie effektiv und ohne Verluste entnommen oder gespeichert werden kann. Dazu werden besonders aktive Elektroden benötigt, sogenannte Elektrokatalysatoren. Die Entwicklung neuer Katalysatoren war bis vor wenigen Jahren eine Kunst, die auf einer Mischung von Erfahrung und Intuition beruhte und zahllose, oft erfolglose Versuche erforderte. Seit einigen Jahren zeichnet sich ein grundlegender Wandel ab: der Übergang zu einer rationalen, gezielten Entwicklung von Elektrokatalysatoren. Die gewonnenen Ergebnisse fließen auch in die Katalysatorenforschung bei Batterien ein.

Ermöglicht wird dies durch große Fortschritte sowohl in der experimentellen als auch der theoretischen Elektrochemie. Auf der experimentellen Seite wurden verschiedene Methoden entwickelt, um den Verlauf einer Reaktion auf der atomaren Skala zu verfolgen. Hiervon stehen in Ulm viele zur Verfügung. Die Theoretiker ihrerseits haben Modelle dazu entwickelt, wie die elektronischen Eigenschaften der Elektroden den Verlauf und die Geschwindigkeit der Reaktionen beeinflussen. Im Zusammenspiel von Experiment und Theorie wird deutlich, welche Anforderungen ein guter Katalysator erfüllen muss und welche Materialien und

Strukturen in Frage kommen. Von großer Bedeutung sind dabei quantenchemische Rechnungen, die erst durch die Entwicklung immer schnellerer und größerer Computer ermöglicht wurden. Mit ihrer Hilfe lassen sich viele der chemischen und physikalischen Eigenschaften berechnen, welche die Elektrokatalyse bestimmen.

„Unsere Gruppe arbeitet überwiegend in der theoretischen Elektrochemie. In den letzten Jahren haben wir uns mit der Reaktion des Wasserstoffs befasst, der in Brennstoffzellen eine wichtige Rolle spielt. Weil diese Reaktion nur aus zwei Schritten besteht, bietet sie sich als Forschungsobjekt für neue Theorien an“, erklärt Wolfgang Schmickler, Professor für Theoretische Chemie an der Universität Ulm. „In unseren ersten Arbeiten zu diesem Thema haben wir noch versucht, bekannte experimentelle Befunde zu erklären, hinkten dem Experiment also hinterher. Mittlerweile ist unsere Theorie so weit gediehen, dass wir es wagen, vorherzusagen, welche noch nicht untersuchten Materialien besonders gute Katalysatoren für diese Reaktion sein sollten. Jetzt hoffen wir, dass die Experimentatoren unsere Vorschläge aufgreifen!“

Schon seit über hundert Jahren suchen Elektrochemiker nach guten und möglichst billigen Katalysatoren. Alle einfachen Metalle und



Experiment und Theorie zeigen, dass oft eine einzige Lage von aktiven Atomen auf einem preiswerten Substrat ausreicht, um eine große katalytische Wirkung zu erzielen: Hier ist der Tausch des teuren Platins gegen das „billigere“ Gold der Weg. Die Grafik weist in das Zentrum der Arbeit der theoretischen Chemiker in Ulm, denn schon aus rein wissenschaftlicher Sicht ist der „Kostenvorteil“ ein Erfolg für die Elektrokatalyse in ihrem Beitrag für die Brennstoffzellentechnologie.



Prof. Dr. Wolfgang Schmickler

Legierungen sind längst untersucht, ohne dass man etwas Besseres gefunden hätte als das teure Platin. Die Hoffnung richtet sich jetzt auf Methoden der Nanotechnologie, die es ermöglichen, Elektroden im atomaren Bereich zu modifizieren. In der Tat zeigen Experiment und Theorie, dass oft eine einzige Lage von aktiven Atomen auf einem billigen Substrat ausreicht, um eine große katalytische Wirkung zu erzielen. Schon aus rein wissenschaftlicher Sicht ist dies ein großer Erfolg für die Elektrokatalyse. Zudem verspricht dieser Befund aber auch, dass man in elektrochemischen Zellen mit wenig aktivem Material auskommen kann. Ob sich diese nanostrukturierten Elektroden dann in der Praxis bewähren, ob sie auf Dauer stabil genug sind, können nur Langzeitexperimente zeigen.

Der Transport und die Lagerung von Wasserstoff sind problematisch, deshalb wird schon lange an Alternativen geforscht. Ethanol ist ein vielversprechender Treibstoff: Er wird jetzt schon dem Benzin zugesetzt, und die Menschheit verfügt seit Tausenden von Jahren über bewährte Methoden zu seiner Produktion und Verbreitung. „Statt Ethanol in Motoren zu verbrennen, wäre es viel effektiver, es in Brennstoffzellen direkt in Strom zu wandeln“, meint Schmickler. „Schließlich ist der Wirkungsgrad von Motoren durch den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik begrenzt, der von Brennstoffzellen aber nicht.“ Leider waren alle Versuche, eine Brennstoffzelle mit Ethanol zu betreiben, bisher erfolglos. Dies liegt an einem scheinbar simplen, aber unverständlichen Problem: „Bei der Umsetzung von Ethanol muss man die Bindung zwischen zwei Kohlenstoffatomen brechen. Eigentlich sollte das nicht so schwierig sein – unser eigener Körper tut dies sehr effektiv, wann immer wir Alkohol trinken. Trotzdem findet dieser Bindungsbruch in elektrochemischen Zellen bisher nur selten statt, und ein großer Teil der im Ethanol gespeicherten Energie geht verloren.“ Es gibt aber Hinweise, in welcher Richtung nach einer Lösung zu suchen wäre: So stellte sich heraus, dass in alkalischer Lösung die Kohlenstoffbindung leichter gebrochen wird als in saurer Lösung; zudem sind gewisse Elektrodenstrukturen wie Stufen oder Oberflächenlegierungen effektiv. „Auf diesem Gebiet und bei verwandten Themen – zum Beispiel Methanolbrennstoffzelle, neue Typen von Lithiumbatterien – gibt es einen großen Bedarf

an Forschung, die eine Kooperation von Theorie und Experiment erfordern. Hier liegen unsere Themen für die nächsten Jahre“, so Schmickler.

Solche fundamentalen Probleme lassen sich natürlich nicht im Alleingang lösen. Deshalb sind Forschungsverbünde wie die Ulmer DFG-Forscherguppe zur Elektrokatalyse, das neue Helmholtz-Institut oder die verschiedenen, von der Europäischen Union geförderten Netzwerke extrem wichtig. Schmicklers Gruppe pflegt zudem seit Jahrzehnten einen intensiven Austausch mit Lateinamerika, insbesondere mit Argentinien und Brasilien. Beide Länder haben in den letzten zehn Jahren viel in die Ausbildung investiert und haben entsprechend gut ausgebildete Studenten – gerade auch in der Elektrochemie. Das große Interesse dieser Länder an der Elektrochemie kommt nicht von ungefähr. Brasilien ist einer der größten Produzenten von Bioethanol, während im relativ dünn besiedelten Argentinien die beständig wehenden Winde Patagoniens eine potenzielle zuverlässige Energiequelle sind. Fortschritte in der Brennstoffzellentechnik könnten einen großen Beitrag zur zukünftigen Energieversorgung leisten. „Vor allem mit Argentinien haben wir verschiedene Austauschprogramme. Mittlerweile kommen so viele Mitarbeiter aus Lateinamerika, dass Spanisch die dominante Sprache geworden ist und man nur ins Englische oder Deutsche wechselt, wenn einer der wenigen deutschen Doktoranden das Zimmer betritt, die noch nicht einige Monate in Buenos Aires, Córdoba oder Santa Fe



Intensive Diskussionen sind der Nährboden für eine gute Wissenschaft. Der argentinische Doktorand German Soldano erhielt dieses Jahr den Preis der Fachgruppe Angewandte Elektrochemie der GDCh für seine Dissertation.

verbracht haben“, berichtet Schmickler. „Gute Wissenschaft gedeiht am besten in einer internationalen Atmosphäre, wo sich verschiedene Kulturen, Ideen und Denkweisen treffen.“

**„Unsere Gruppe arbeitet überwiegend in der theoretischen Elektrochemie. In den letzten Jahren haben wir uns mit der Reaktion des Wasserstoffs befasst, der in Brennstoffzellen eine wichtige Rolle spielt. Weil diese Reaktion nur aus zwei Schritten besteht, bietet sie sich als Forschungsobjekt für neue Theorien an.“**  
Wolfgang Schmickler