



Prof. Dr. Javier Pérez-Ramírez (Foto: Barbara Brauckmann)

„Wir sind dabei, die Geheimnisse katalytischer Funktionseinheiten zu entschlüsseln“

„Mein Traum: Nicht nur Publikationen, sondern ein Raum mit Trophäen zu gelungenen Prozessen“

„Oft spiegeln die an Modellkatalysatoren im Labor erzielten hervorragenden Ergebnisse nicht die Realität industrieller Prozesse wider. Sehr häufig treten beim Scale-up Formulierungsprobleme, Diffusionslimitierungen oder Verunreinigungen durch Abbauprodukte auf, die im Betrieb hohe Investitions- und Wartungskosten zur Folge hätten. Deshalb möchte ich die fundamentalen Regeln des Katalysatormaterials auf molekularem Level verstehen und dafür die zwischen Struktur, Eigenschaft und Funktionalität bestehenden Wechselwirkungen aufklären“, erläutert Javier Pérez-Ramírez, der seit 2010 eine ETH-Professur für *Catalysis Engineering* am Departement Chemie und Angewandte Biowissenschaften der ETH Zürich innehat.

Dafür werden in seiner Forschungsgruppe umfangreiche Materialbibliotheken durchgescreent, daraus «Leads» gewonnen und jene auf Stabilität, Akti-

vität, Selektivität untersucht, sowie ihre Reaktionskinetik und Tauglichkeit unter Industriebedingungen getestet.

So kann er das auf dem «Mikrolevel» (Nanostruktur multifunktionaler Materialien) und «Mesolevel» (optimiertes Reaktordesign) gewonnene Wissen nutzen, um es dann auf dem «Makrolevel» zur Umsetzung industrieller Prozesse einzusetzen.

„Eine enge Vernetzung zwischen industrieller Anwendung und Grundlagenforschung spielt in unseren Forschungsgebieten eine wichtige Rolle. Damit wir Versuchsergebnisse möglichst rasch in Praxis-Konzepte überführen können, pflegen wir mit mehreren bedeutenden Chemie- und Ölkonzernen intensive Kooperationen“, betont er.

Die Zielsetzung seines Teams umfasst das wissenschaftliche Verständnis und die technologische Entwicklung neuer katalytischer Materialien und Reaktortechnikkonzepte für nachhaltigere Herstellungsprozesse der gegenwärtigen und zukünftigen chemischen Industrie. Das Wort «Nachhaltigkeit» impliziert ei-

ne Fokussierung auf Verfahren, die in Hinsicht auf den Umweltschutz mit einem verringerten Energiebedarf, verbesserter Ausnutzung von Rohmaterialien, einer Ausweitung der Verwendung erneuerbarer Ausgangsstoffe und einer Minimierung der Abwassererzeugung verbunden sind.

Die Themenaspekte seiner drei Arbeitsschwerpunkte «Design funktioneller Materialien», «Verbesserte Methoden für mechanistische Untersuchungen» und «Entwicklung von Katalysatoren für spezifische Anwendungen» stehen im Einklang mit diesem Anliegen.

Der 38 Jahre alte, in Benidorm geborene Spanier kann dabei auf seine Erfahrungen aus Tätigkeiten bei Norsk Hydro und Yara International in Norwegen als auch am Institute of Chemical Research of Catalonia zurückgreifen.

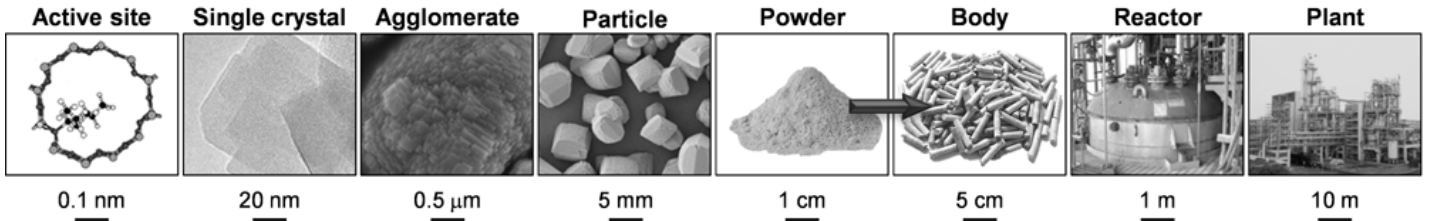
Neueste Erfolgsmeldungen

Ein Kernthema geht auf den 1868 patentierten *Deacon-Prozess* zur Herstellung von Chlor zurück, bei dem unter Sauerstoffzufuhr Chlorwasserstoff oxidiert wird. Letzteres fiel beispielsweise im schon 1792 eingeführten *Leblanc-Verfahren* zur Sodaproduktion an.

Henry Deacons Erfindung basiert auf dem Einsatz kupfersalzhaltiger Katalysatoren bei hohen Temperaturen. Doch an diesen traten Korrosions- und Verklumpungsvorgänge auf, die nach kurzer Zeit zur Inaktivierung führten.

Da heute HCl auch bei der Synthese von Polyurethanen und Polycarbonaten anfällt, bezugte die chemische Industrie schon bald grosses Interesse an stabilen und aktiveren Katalysatormischungen. Es dauerte einige Zeit, bis geeignete Zusammensetzungen aus robuster Träger- und Additivschicht mit wirkungsvoller Aktivphase entwickelt wurden.

„Zusammen mit Bayer Material Science AG ist es uns gelungen, mit einem speziellen $\text{RuO}_2/\text{SnO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ -Katalysator bereits im Pilottest Standzeiten von mehreren tausend Stunden zu gewährleisten. Dieser Erfolg geht darauf zurück, dass wir Zinnoxid als leicht handhabbare und kostengünstige Unterlage und Aluminiumoxid als Stabilisator einer sonst leicht agglomerierenden Rutheniumschicht verwendeten“.

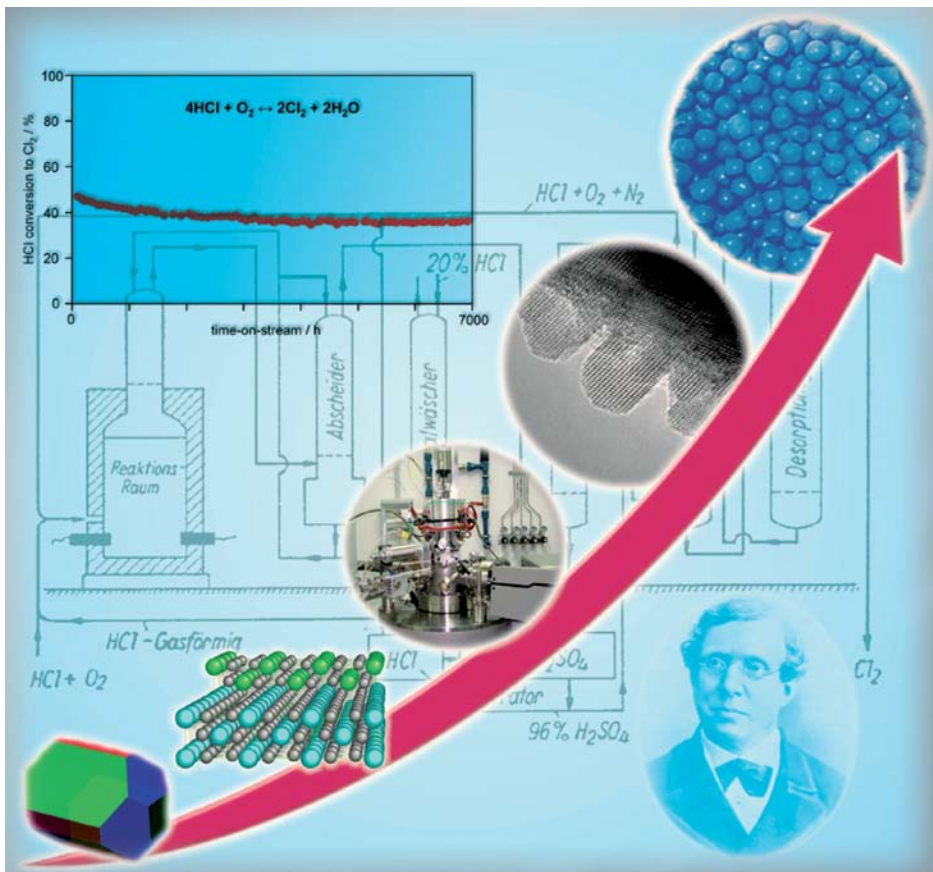


Übersicht verschiedener Größenordnungen mit Längenskalen - Vom aktiven Zentrum eines Festkörper-Katalysators bis zur Industrieanlage, in welcher dieser zur Anwendung kommt

Dieses Ergebnis veranschaulicht, wie eine Katalysatoroptimierung bereits seit Langem in der chemischen Industrie bestehende technische Probleme lösen kann. Für die damit erzielten grundlegenden und praktischen Vorteile wurde Pérez-Ramírez mit der *Otto-Roelen-Medaille 2012* bedacht. Mit dem Preis zeichnete die DECHEMA den Wissenschaftler für seine hervorragenden Beiträge auf dem Gebiet der Katalyse aus, die zudem starke industrielle Relevanz haben. Seine momentane Forschung in diesem Sektor konzentriert sich auf die Identifikation kostengünstiger alternativer Katalysatoren, um die Verbreitung jener

katalytischen Chlor-Recycling-Technologie voranzutreiben. Ein weiteres aktuelles Thema, welches in den letzten Jahren Fortschritte machte, betrifft das rationale Design der hierarchischen Zeolithe, die zur Materialklasse der in der modernen chemischen Industrie am häufigsten genutzten Katalysatoren gehören. „Wir haben vielseitige und kostengünstige Modifizierungsstrategien entwickelt, um die Poreneigenschaften bereits gefertigter, kommerzieller Zeolithe zu optimieren“, berichtet er. „Die konsequente Reduktion von Diffusionslimitierungen führte zu einer deutlichen

Ausbeutesteigerung in katalytischen Prozessen in der Erdölraffinerie, Petrochemie und in Anwendungsbereichen von Feinchemikalien. Die Zusammenarbeit mit der Zeochem AG stellte ausserdem die Skalierbarkeit unserer Veränderungsmaßnahmen in Hinblick auf die Herstellung hierarchischer Zeolith-Katalysatoren für industrielle Anwendungen unter Beweis.“ Optimiertes Design und die Weiterentwicklung technischer Katalysatoren strebt seine Arbeitsgruppe in allen Gebieten der Forschung an. „Wenn aufgrund von Laborstudien ein vielversprechender Katalysator identifiziert wurde, ist das noch weit entfernt vom Ende der Geschichte. Denn oft stösst man auf Schwierigkeiten, die Ergebnisse auf ein industrielles Umfeld zu übertragen, weil klare Richtlinien für die Herstellung ‚realer‘ Katalysatoren fehlen. Das ist auch der Grund dafür, dass wir zusammen mit dem Paul Scherrer Institut und dem Elektronenmikroskopie-Zentrum der ETH einen multidisziplinären Ansatz zur Visualisierung und zum Verständnis der strukturellen Organisation innerhalb der millimetergrossen technischen Komplexe von der Makro- bis zur Nanoskala verfolgen. Mit diesem Ansatz erwarten wir Schlüsselerkenntnisse für zukünftige Katalysatorentwicklungen.“



Darstellung von Hauptschritten in der Entwicklung von heterogenen Katalysatoren für das Chlor-Recycling

Grundlagenforschung zur Substitution von Erdöl

Andere Forschungsausrichtungen nehmen derzeitige globale Bedürfnisse auf. „Wir peilen dabei die Problematik der globalen Erwärmung und stetigen Abnahme fossiler Brennstoffe an, der wir mit der Verwendung von CO₂ für die Produktion von Benzin und Chemikalien gegensteuern möchten. Dies beginnt mit dem Auffangen von Kohlen-

dioxid aus industriellen Emissionen und umfasst verschiedene Formen der Wiederverwertung.“

Dafür werden modifizierte Metalloxide auf ihre Tauglichkeit als Sorbenzien geprüft. Aus gebundenem CO₂ kann dann Methanol erzeugt werden, welches zu den Schlüsselsubstanzen bei der Herstellung von Chemikalien zählt.

„In einem Kooperationsprojekt mit einem Partner aus der Industrie stellten hierarchische Zeolithe für diesen Zweck erfolgreich ihre Tauglichkeit unter Beweis. Alternativ können elektrokatalytische Methoden dazu dienen, aus CO₂ Brennstoffe zu gewinnen. Das ist ein spannendes Forschungsfeld der nahen Zukunft“, legt Pérez-Ramírez dar.

„Auch Biomasse, welche aus der Bindung des CO₂ entsteht, lässt sich verwenden. Kürzlich ist es uns mit ganz spezifisch designten Katalysatoren sogar gelungen, verschiedene Grundchemikalien im Bausteinprinzip aus Biomassekomponenten oder Bestandteilen aus der Natur zu Chemikalien oder Brennstoffen zu veredeln. Die neuesten Ergebnisse legen tiefgreifende Änderungen für das Designen der Katalysatoren im Vergleich mit gegenwärtigen Technologien nahe. Unsere Forschung zielt darauf ab, das Engineering von Zeolithen oder metallbasierten Katalysatoren und die Entwicklung von Prozesswegen in Gas- und Flüssigkeitsphasen zu beherrschen, um schliesslich selektiv Verbrauchschemikalien aus Biomolekülen zu erzeugen.“

Fortschritte bei Synthese-Werkzeugen und dem mechanistischen Verständnis

„Der Erfolg des katalytischen Materials kann durch die Optimierung seiner Struktur wesentlich gesteigert werden. Innovative Synthesewege mit exakt definierbaren Prozessschritten stehen in allen unseren Forschungsgebieten im Vordergrund. Besonders gilt das bei der Entwicklung von industriell anwendbaren Methoden zur Herstellung von neuartigen und verbesserten Materialien mit fein abgestimmten Partikelgrößen und -zusammensetzungen“ unterstreicht der Chemieingenieur.

Zur Beobachtung der Mikrokinetik der Gas-Festkörper-Reaktionen haben die

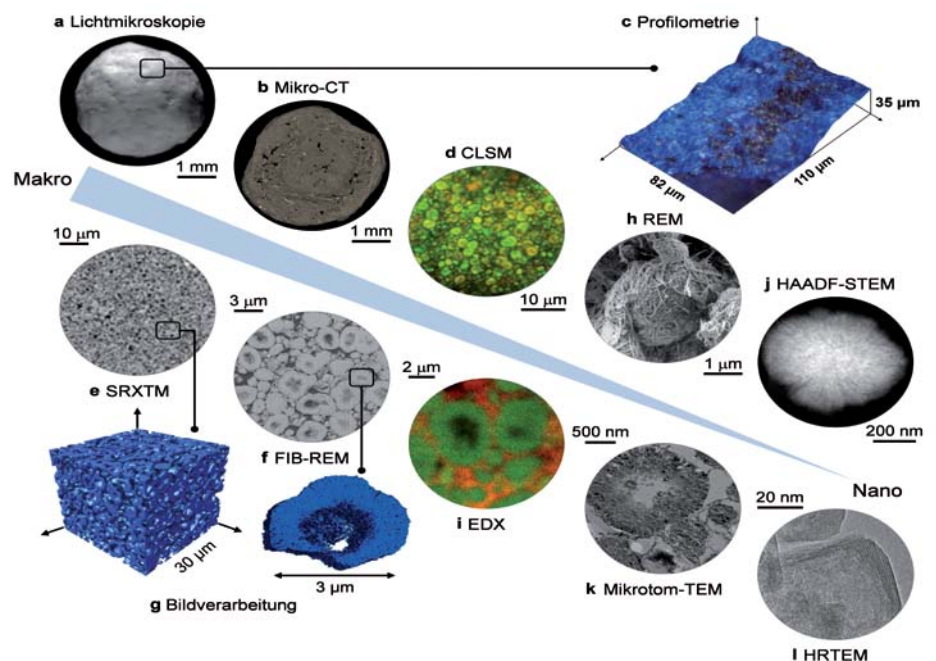
Wissenschaftler «zeitaufgelöste transiente Techniken» entwickelt. „Die für Testreihen an pulverförmigen Katalysatoren notwendigen kinetischen Untersuchungen mit hoher Zeitauflösung führen wir mit unserer eigens dafür generierten «Temporal Analysis of Products Methode» (TAP) durch. Im TAP-Reaktor können wir zur Aufklärung komplexer Reaktionsmechanismen sowohl Puls- als auch kontinuierliche Strömungsexperimente abwickeln. Der Einsatz dieser Technik verhalf uns zu einem fundierten Verständnis der NH₃-Oxidation, N₂O-Zersetzung, HCl-Oxidation und Alkin-Hydrogenierung.“

Die zuletzt genannte Transformationsreaktion wird bereits industriell über einen Palladium-basierten Katalysator ausgeführt und dient der Reinigung von Olefin-Strömen aus Steamcrackeranlagen. TAP-Experimente und Selektivitätsuntersuchungen liefern ein

bination mit innovativer Analytik und hochmoderner Computermethodik ausserdem zum Nachweis der entropischen Herkunft von Kompensationsphänomenen in der heterogenen Katalyse.

Inzwischen ist die Publikationsliste seiner interdisziplinären Arbeitsgruppe aus Chemikern, Materialwissenschaftlern und Ingenieuren auf über 220 Artikel angewachsen. Auch ist der Forscher Miterfinder in mehr als 10 Patenten, von denen sich etliche in industrieller Anwendung befinden.

„Ich betrachte die Katalyse eher als eine uralte Technologie und weniger als eine Wissenschaft. Diese besteht jedoch aus einer Mischung von Disziplinen, die alle selbst als Wissenschaft gelten“, sagt Pérez-Ramírez und fügt in einer Mischung aus Bescheidenheit und Stolz an: „Aber wir sind auf diesem Gebiet, das letztendlich auf sehr unkomplizierten Ideen basiert, weltführend“.



Ergänzende Techniken zur Visualisierung der Struktur von Zeolithkatalysatoren in technischer Form (Abbildungen auf Seite 2 und 3; Gruppe Pérez-Ramírez)

fundamentales Wissen auf molekulaarem und atomarem Niveau der Hydrogenierungschemie des Palladiums. Sie ermöglichte die Identifikation von preisgünstigeren, aber dennoch hochselektiven, edelmetallfreien alternativen Katalysatoren.

Kürzlich führte die TAP-Technik in Kom-

«MOLEKÜL»: Publikation der Öffentlichkeitsarbeit D-CHAB: www.chab.ethz.ch/publicrelations

Interview Text:

Dr. Barbara Brauckmann

Ergänzungen: Dr. Cecilia Mondelli

Englisch-Übersetzung Abstract:

Dr. Marianne Tauber