

Strategien zur heterogen-katalytischen Aktivierung von molekularem Sauerstoff

R. Schlögl

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft

Die enorme Stabilität des Moleküls Di-Sauerstoff erfordert bei allen partiellen und totalen Oxidationsreaktionen im Dunkeln eine effiziente Strategie zur Bereitstellung des oxidierenden atomaren Sauerstoffes. Die reduktiv-dissoziative Adsorption erfordert eine lokal verfügbare hohe Elektronendichte am Adsorptiv, der Angriff des Sauerstoffatoms wird durch einen Elektronenmangel am Substrat begünstigt.

Eine der einfachsten möglichen reaktiven Kombinationen ist das System Kohlenstoff/Sauerstoff, bei dem Adsorptiv und Substrat stofflich identisch sind. Die „Bi-Funktionalität“ der reagierenden Oberfläche wird durch Defekte, die durch ihre lokale, chemische und geometrische Struktur in Abstufungen reaktiv sind, bewirkt.

Im System Kupfer/Sauerstoff/Methanol tritt eine Abstufung der Reaktivität vor allem durch die differenzierte Wechselwirkung von Kupfer gegenüber atomarem Sauerstoff in Gegenwart eines organischen Substrates auf.

Das System Molybdän-Vanadiumoxid/Sauerstoff/Isopropanol ist ein technisch relevantes Modellsystem für Partialoxidationskatalysatoren. Die Speicherung von „chemisch gebremstem“ Gittersauerstoff, der die Partialoxidation bewirkt, wird durch eine komplexe Kristallstruktur und eine zusätzliche 2-dimensionale Fehlordnungsstruktur ermöglicht. Die spektroskopische und chemische Identifikation der aktiven Form von Sauerstoff in einem Oxid wird illustriert.

In der Zusammenfassung wird gezeigt, wie die oben erwähnte „Bi-Funktionalität“ in den drei Beispielsystemen unterschiedlich realisiert wurde. In allen Fällen wird deutlich, daß nur durch das Mitwirken extrinsischer Faktoren (Defektstrukturen) eine stabile Funktionsweise der Prozesse erreicht wird. Diese Erkenntnis mag eine der Ursachen für die „Schwärze“ der Wissenschaft von der Heterogenen Katalyse sein.