

Katalysatoren - Chemische Partnervermittlung im virtuellen Labor

Inhalt

Katalysatoren
Der Katalysator in der Großindustrie
Was passiert im Inneren?
Das virtuelle Labor.

Katalysatoren

Katalysatoren sind Substanzen, die Molekülen helfen, miteinander zu reagieren und so neue Verbindungen einzugehen.

Warum ist Partnervermittlung wichtig? Ohne Katalysatoren würden wichtige Reaktionen so langsam ablaufen, dass die gewünschten Verbindungen praktisch nicht entstehen. Die meisten Prozesse in der chemischen Industrie, mit denen Produkte unserer modernen Welt erzeugt werden, sind katalytische Prozesse und wären ohne Katalysatoren nicht möglich.



Entschwefelungskatalysatoren für Erdöl
(C) Poul Møller, Haldor Topsøe A/S, Denmark

Beispiele

- Das beginnt bei den Mineraldüngern, die überhaupt erst die Grundlage sind, dass die wachsende Weltbevölkerung ernährt werden kann und der Hunger in Teilen der Welt besiegt ist.
- Jeder Liter Benzin, den wir in unser Fahrzeug füllen, hatte auf seinem Weg vom Ölfeld in den Tank, vom Rohöl zum Produkt Vergaserkraftstoff, Kontakt mit mindestens einem Katalysator. Moderne Polymerwerkstoffe, der Gummi der Autoreifen und synthetische Fasern sind das Produkt katalytischer Prozesse.
- Die meisten kennen den Begriff des Katalysators als Abgaskatalysator im Auto. Hier sorgt der Katalysator dafür, dass schädliche Verbindungen wie NO in unschädliche

Verbindungen wie N_2 und O_2 umgewandelt werden.

Inhalt

Der Katalysator in der Großindustrie

Aus den Gasen N_2 und H_2 kann man Ammoniak herstellen, das die Grundsubstanz der mineralischen Dünger ist. Im NH_3 -Molekül ist Stickstoff in einer Form enthalten, den die Pflanzen nutzen können. Im Ammoniak sind drei H-Atome direkt an das N-Atom gebunden. Damit zwei NH_3 Moleküle entstehen können, müssen die N-N-Bindung im N_2 und die H-H Bindung in H_2 gespalten werden. Dazu ist viel Energie nötig. Diese wird allerdings zum größten Teil wieder frei, wenn die N-H-Bindungen im Ammoniak geknüpft werden. Es



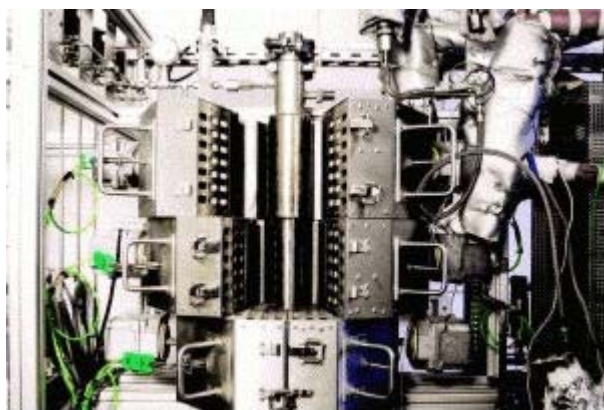
Ammoniak-Anlage in Bombay, Indien
(C) Poul Møller, Haldor Topsøe A/S, Denmark

ist also eine sehr hohe Energiebarriere zu überwinden, um von den Ausgangsstoffen zu den gewünschten Produkten zu gelangen. Je höher nun diese Barriere ist, umso länger dauert es, bis man diese überwunden hat. Der Katalysator ist der Stoff, der diese Barriere für eine spezielle Reaktion herabsetzt und dabei nicht verbraucht wird.

Feste Katalysatoren - Stein der Weisen der Moderne

Inhalt

Was passiert im Inneren?



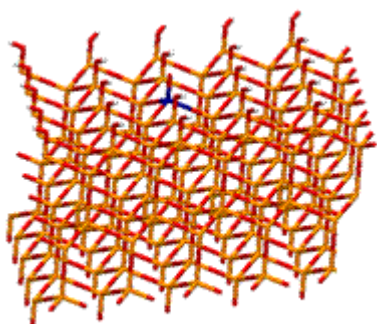
Mini-Produktionsanlage

Die selektive Oxidation von organischen Verbindungen hat in der industriellen Chemie einen hohen Stellenwert, da auf diesem Weg eine Reihe von wichtigen Grundchemikalien hergestellt werden kann. Als Basischemikalien werden häufig preisgünstige Erdgasne oder andere billige Produkte der petrochemischen

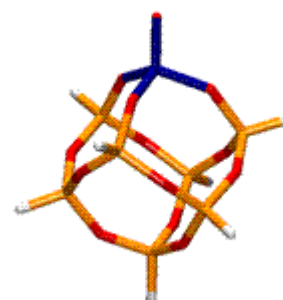
Industrie eingesetzt.

Für die Durchführung der Reaktionen werden oftmals Katalysatoren in Form von Feststoffen verwendet, die dann während der Reaktion mit Gasen in Wechselwirkung treten. Der Grund für die Benutzung von Katalysatoren ist zweifacher Art. Zum einen bewirkt der Katalysator eine Erhöhung der Reaktionsgeschwindigkeit, zum anderen erhält man andere Produkte als bei der direkten Oxidation der Gase mit Sauerstoff. Bei Oxidationsreaktionen tritt häufig das Problem auf, dass das Reaktionsprodukt leichter mit Sauerstoff reagiert als die Ausgangsverbindung. Daher würde ohne einen Katalysator nicht die gewünschte Verbindung entstehen, sondern die Ausgangsverbindung zu Kohlendioxid umgewandelt.

Wir beschäftigen uns unter anderem mit der Synthese von Formaldehyd aus Methanol. Methanol ist ein Beispiel für ein preisgünstiges petrochemisches Produkt. Formaldehyd ist eine höherwertige Grundchemikalie, die z. B. in der Kunststoffherstellung verwendet wird. Die Wirkungsweise von Vanadiumoxid-Katalysatoren für die Methanoloxidation ist Gegenstand der aktuellen Forschung. Das Vanadiumoxid wird hierzu oftmals auf die Oberfläche eines ansonsten unreaktiven Trägers aufgebracht. Der Träger kann beispielsweise Siliziumoxid sein.

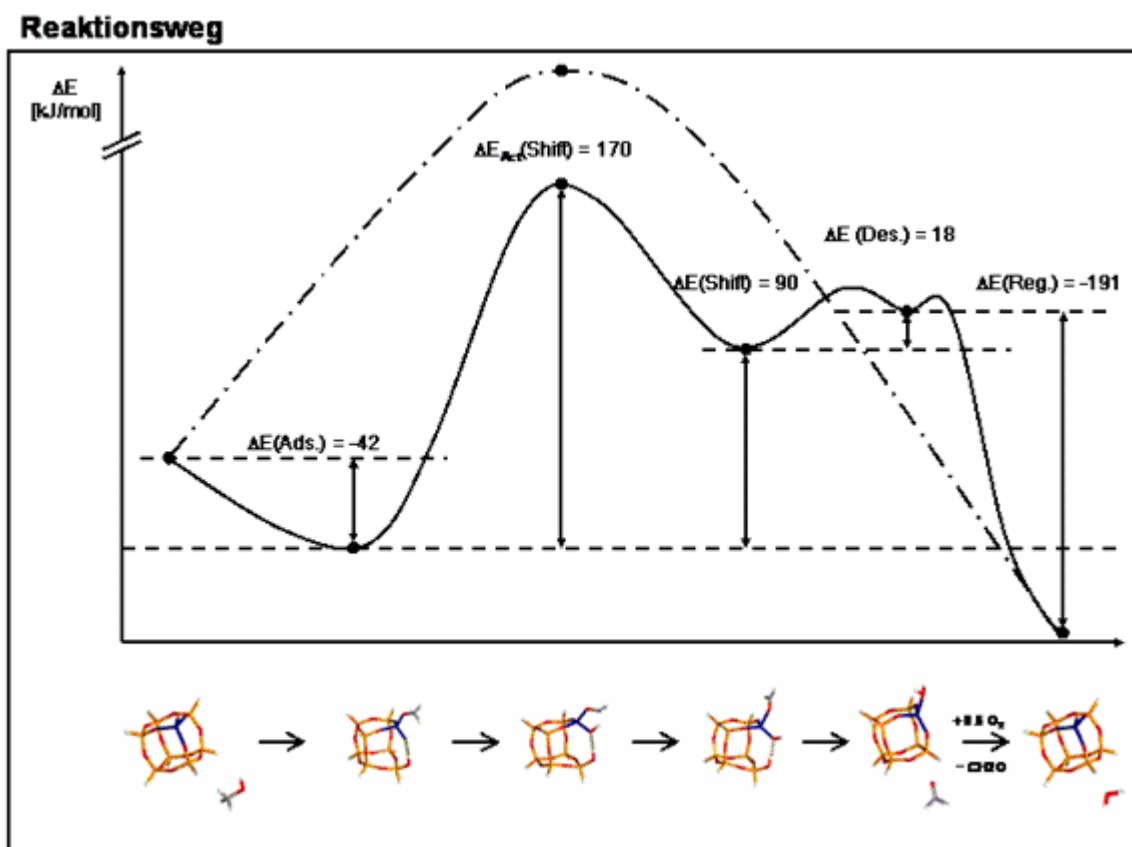


Die Struktur einer Vanadiumoxid-Gruppe (Vanadium: Blau) auf einer Siliziumoxidoberfläche ist in der linken Abbildung (zum Vergrößern bitte anklicken) gezeigt. Da [Computerberechnungen](#) der Eigenschaften solcher Oberflächenmodelle sehr aufwendig sind, werden oftmals kleinere Modelle für die Simulationen eingesetzt. Für die Untersuchung der Formaldehydbildung setzen wir eine Modellverbindung ein, in



der sich Siliziumatome in den Ecken eines Würfels befinden. Ein Modell für den Vanadiumoxid-Katalysator erhält man, indem ein Siliziumatom durch eine Vanadiumoxid-Gruppe ersetzt wird. Dieses Modell ist in der rechten Abbildung gezeigt.

Die Reaktion des Katalysators mit Methanol beginnt mit einer Reaktion des Methanolmoleküls mit dem Vanadiumoxid-Zentrum. Hierbei wird eine Methoxy-Gruppe ($-\text{OCH}_3$) am Vanadium gebildet und eine der Bindungen des Vanadiums zur Oberfläche gebrochen. An der Oberfläche entsteht eine OH-Gruppe. Während der Reaktion wird ein Wasserstoffatom der Methoxygruppe auf das Sauerstoffatom des Vanadiumoxids $\text{V}=\text{O}$ übertragen. Die Reaktion durchläuft hierbei einen sogenannten Übergangszustand. Hierbei handelt es sich um den Zustand, in dem das System die höchste Energie während der Reaktion ($E=129 \text{ kJ/mol}$, experimentell bestimmt: 79 kJ/mol) aufweist. Übergangszustände sind aufgrund der hohen Energie des Systems ungünstig, das Auffinden des Übergangszustands ist jedoch für das Verständnis der Reaktion von großer Bedeutung, da während der Reaktion der Übergangszustand passiert wird. Die Energiedifferenz zwischen Übergangszustand und Ausgangsverbindung liefert eine Information über die Reaktionsgeschwindigkeit, einem wichtigen Parameter bei der Betrachtung der Kinetik chemischer Reaktionen. Im Energiediagramm ist der genaue energetische Ablauf der Reaktion, der Reaktionsweg, dargestellt, die gestrichelte Linie symbolisiert die virtuelle Energiekurve der Reaktion ohne Katalysator. Die [Animation](#) zeigt den Ablauf der Reaktion mit dem Übergangszustand.



Nachdem das Modell den Übergangszustand passiert hat, bildet sich aus der V=O-Gruppe eine V-OH-Gruppe und aus der Methoxygruppe (-OCH₃) ein Formaldehyd-Molekül CH₂O, das noch schwach an das Vanadiumatom gebunden ist. In den folgenden Reaktionsschritten löst sich dann das Formaldehyd von der Oberfläche und der Katalysator wird regeneriert, indem eine Oxidation mit gasförmigem Sauerstoff stattfindet, während gleichzeitig Wasser gebildet wird.

Die so erhaltenen Aussagen über die Wirkungsweise von Katalysatoren müssen mit [experimentellen Ergebnissen](#) verglichen werden.

Inhalt

Das virtuelle Labor - das Labor im Computer

Simulationen der Struktur und Reaktivität von Katalysatoren sind sehr aufwändig. Dank der enorm schnellen Entwicklung gängiger PC-Hardware ist eine zügige Untersuchung auch mit preiswerter PC-Ausstattung möglich. Sollte diese jedoch nicht ausreichen, werden die modernsten Supercomputer Deutschlands (s. Bilder) eingesetzt, um die chemische Partnervermittlung aufzuklären.

[Inhalt](#)