

Stoffe und Reaktionen

Eine saubere Sache

Um chemische Reaktionen zu initiieren, zu beschleunigen oder selektiv durchzuführen, ist häufig die Anwendung eines Katalysators erforderlich. Bislang war es ein mühseliges Geschäft, entsprechende Substanzen für eine bestimmte gewünschte Reaktion zu identifizieren und zu testen. Nun sorgen jüngst entwickelte Hochdurchsatz-Screeningmethoden für Innovationen am laufenden Band.

Es ist wie die berühmte Suche nach der Stecknadel im Heuhaufen: Wer eine neue Substanz mit besonderen Eigenschaften benötigt – genau passend für eine spezielle Anwendung –, sieht sich im Labor einer schier unendlichen Vielfalt an chemischen Verbindungen gegenüber. Um passende Kandidaten aus der Fülle der Stoffe herauszufiltern, bedarf es mit herkömmlichen Methoden viel Zeit und viel Geld. Schnell und auch kostengünstiger geht es jetzt mit innovativen Hochdurchsatz-Verfahren (HTE – High Throughput-Experimentation). Dabei handelt es sich um eine Art Technologieplattform, die Methoden aus unterschiedlichen Bereichen miteinander kombiniert, zum Beispiel Mikroreaktor-Techniken, molekulare Simulation im Computer, statistische Versuchsplanung oder Massenscreening-Verfahren.

Besonders erfolgreich sind Hochdurchsatz-Verfahren inzwischen bei der Fahndung nach Stoffen für die Entwick-

Für die Entwicklung von Katalysatoren gilt es, die für einen bestimmten Reaktionsverlauf notwendige Substanz in der unendlichen Fülle der Stoffe zu identifizieren. Mit den neuen Hochdurchsatz-Technologien kommen die Materialentwickler schneller zum Ziel.



lung neuer Katalysatoren: Gesucht werden Substanzen und Verbindungen, die chemische Reaktionen auslösen oder ermöglichen und deren Geschwindigkeit beeinflussen, ohne dabei selbst verbraucht zu werden. Katalysatoren sind sozusagen Weichensteller im chemischen Reaktionskosmos, treiben Prozesse voran oder verschieben den Reaktionsverlauf zugunsten eines bestimmten Produktes. Wohl am bekanntesten ist der Abgaskatalysator im Automobil, meist kurz Kat genannt: Hier werden die Schadstoffe in den Abgasen in weniger umweltschädliche Substanzen umgewandelt.

Die Ingenieure und Wissenschaftler des Heidelberger Unternehmens hte Aktiengesellschaft (high throughput experimentation company) haben sich in der Katalyseforschung die Verbesserung des Dieselmotorkatalysators zum Ziel gesetzt. Ihre Forschungsarbeiten waren Teil eines vom BMBF

Gesucht: Katalysatoren zur Reinigung von Dieselaabgasen

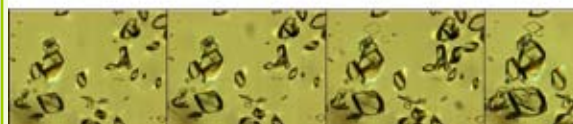
geförderten Verbundprojektes, das im Rahmen des Kompetenzzentrums für Katalyse (ConNeCat) strukturiert wurde. Zu den Kooperationspartnern gehörten die Automobilhersteller DaimlerChrysler AG und Volkswagen AG sowie die Zulieferer und Forschungsunternehmen Robert Bosch GmbH und OMG AG & Co. KG.

Dieselmotoren zählen zu den Sparkünstlern unter den Verbrennungsmotoren. Sie verbrauchen weniger Treibstoff als Benzinmotoren und setzen somit auch weniger Kohlendioxid frei. Allerdings enthalten die Abgase giftige Stickoxide und Rußpartikel, die sich nicht mit einem geregeltem Katalysator aus der Welt der Benzinmotoren aus dem Verkehr ziehen lassen. Stickoxide begünstigen Atemwegserkrankungen und fördern bei starker Sonneneinstrahlung die Bildung von schädlichem Ozon. Dieselaabgas bildet zusammen mit anderen Partikeln den gesundheitsschädlichen Feinstaub. Eine Lösung des Problems ist längst überfällig.

2005 wurden die Abgasnormen für Dieselmotoren europaweit drastisch verschärft, weitere Schritte sind geplant. Rundum befriedigende, kostengünstige Technologien, um

Kristallisationstests im Hochdurchsatz-Screening

Auch die sich seit Jahren bewährende Drei-Wege-Katalyse im Benzin betriebenen Auto kann noch verbessert werden, denn hohe Temperaturschwankungen und ständige Veränderungen im Mengenverhältnis von Luft zu Kraftstoff beeinträchtigen die Leistungsfähigkeit des Katalysators. Cer/Zirkonmischoxide übernehmen in diesem Zusammenhang die Aufgabe eines Puffers: Sie speichern überschüssigen Sauerstoff und geben ihn bei Bedarf wieder ab. Mit Hilfe der Hochdurchsatztechnologie ist es dem Heidelberger Unternehmen hte Aktiengesellschaft (high throughput experimentation company) gelungen, dieses Speichermedium zu verbessern. Die Wissenschaftler und Ingenieure setzten dabei auf die Bildung von Mischoxiden, die aus Zirkonium und dem Seltenerdmetall Cer bestehen. Die verschiedenen Kristallisationsvorgänge wurden detailliert ausgetestet, vor allem hinsichtlich ihrer Wirkung auf die Leistungsfähigkeit als Sauerstoffspeichermedium. Die Erfahrungen, die die Wissenschaftler und Ingenieure hierbei gemacht haben, nutzen sie nun auch für die unter hohem Durchsatz erfolgende Herstellung und Charakterisierung von anderen kristallinen Festkörpern. Das BMBF förderte die Entwicklung im Rahmen eines Verbundprojektes.



Auf Basis der Hochdurchsatz-Screeningverfahren lässt sich auch die Herstellung und Charakterisierung von kristallinen Festkörpern automatisieren.

Dieselaabgase vernünftig zu säubern, existieren bislang jedoch noch nicht. Pkw-Dieselfahrzeuge besitzen meist edelmetall-



Bei den Hochdurchsatz-Experimenten werden auf einer integrierten Technologieplattform unterschiedliche Methoden wie zum Beispiel Mikroreaktor-Techniken, molekulare Simulation im Computer oder Massenscreening-Verfahren miteinander kombiniert.

haltige Katalysatoren, die das Kohlenmonoxid und die Kohlenwasserstoffe der Abgase zu Kohlendioxid und Wasser umsetzen; zunehmend sind sie auch mit Rußpartikelfiltern ausgerüstet.

Die Stickoxide gelangen dabei jedoch weiterhin nahezu unbehelligt in die Umwelt. Zur Erfüllung zukünftiger Abgasnormen wie der Euro V, die im Jahr 2009 in Kraft treten wird, muss die Automobilindustrie wahrscheinlich auf teure und aufwändige DeNOx-Verfahren, beispielsweise auf den NOx-Speicher/Reduktionskatalysator oder das SCR-System zurückgreifen.

„Wir haben nun in dem Verbundprojekt zusammen mit den Partnern aus der Automobilindustrie eine interessante neue Klasse von Katalysatoren für Dieselmotoren entwickelt, die ebenfalls Stickoxide aus den Abgasen entfernen können“, sagt Dr. Wolfgang Strehlau, der bei der hte Aktiengesellschaft das BMBF-Projekt koordiniert hat. Es waren zwar bereits einige Systeme bekannt, die den Ausstoß von Stickoxiden mindern konnten, sie erforderten aber entweder ein sekundäres Reduktionsmittel oder wiesen eine geringe Resistenz gegenüber Schwefel auf. „Unsere neuentwickelten Katalysatoren zeigen hier konzeptionelle Vorteile und sind schwefelresistent“, fügt Strehlau hinzu, „jedoch sind weitere Verbesserungen notwendig, um technisch ausreichende NOx-Konvertierungen zu erhalten“.

Schwefel im Kraftstoff beeinträchtigt normalerweise die Entgiftungsfunktion des Katalysators. Nicht so bei der Neuentwicklung, denn dieser Katalysator besitzt eine andere chemische Zusammensetzung – enthält zum Beispiel keine Barium- und Alkaliverbindungen – und wirkt somit über einen bislang ungenutzten Reaktionsmechanismus. Das innovative Forschungs- und Entwicklungsergebnis konnte vor allem aufgrund der Hochdurchsatztechnologie erreicht werden. „Wir haben eine Vielzahl von Materialien ausprobiert, die noch nie für die Herstellung von Katalysatoren genutzt, vielleicht überhaupt noch nie hergestellt worden sind“, sagt der Heidelberger Chemiker. Und: „Die Förderung mit öffentlichen Mitteln wirkte hierbei ebenfalls als Katalysator, denn die industriellen Hersteller trauen sich an solche grundlegenden Neuentwicklungen nur vorsichtig heran, weil die Erfolgsaussichten zu unsicher sind.“

Wer weiß schon, wo die sprichwörtliche Stecknadel im Heuhaufen genau steckt? Die Hochdurchsatzforschung kommt auf jeden Fall schneller zum Ziel als herkömmliche Suchmethoden. Die Heidelberger Experten haben im BMBF-

Verbundprojekt aufzeigen können, dass sich künftig auf diese Weise generell neue Materialien mit deutlich erhöhter Geschwindigkeit aufspüren lassen. Und vor allem: Die Erfolgchancen werden erheblich verbessert. Und dies gilt wohl auch für die Weiterentwicklung bekannter Substanzen. „Wir machen interessante Entdeckungen selbst in Bereichen, die bereits umfassend mit herkömmlichen Methoden untersucht worden sind“, sagt Strehlau.

Hochdurchsatzverfahren kombinieren unterschiedliche Technologien

Die Forschungs- und Entwicklungsprogramme der hte Aktiengesellschaft laufen in der Regel in vier Phasen ab. Ohne klassische Experimente kommt auch das Hochdurchsatz-Screening nicht aus. Die erste Phase ist die Versuchsplanung: Dabei werden zum Beispiel auf Basis vorhandener experimenteller Daten – aber auch intuitiv – Materialklassen für eine neue gewünschte Anwendung ausgewählt. In der zweiten Phase erfolgt die Herstellung und Verarbeitung von Testmaterialien – eine Aufgabe, die sich meist mit Pipettierrobotern und anderen Automaten lösen lässt. In diesem Arbeitsschritt entstehen regelrechte Materialbibliotheken. Dann beginnt die dritte Phase: das Austesten. Im Rahmen des BMBF-Projektes führten die Kooperationspartner über 2000 Aktivitätsmessungen an neuen katalytischen Materialien unter dieselähnlichen Abgasbedingungen durch. In der letzten Phase kommen vor allem Computer gestützte Werkzeuge zum Einsatz, um den entstandenen Datenberg auszuwerten.

Auch nach dem erfolgreichen Abschluss des BMBF-Verbundprojekts läuft die Katalyseforschung bei der hte-Aktiengesellschaft unter Hochdruck weiter, um vielleicht zu noch besseren Lösungen zu kommen, denn das Marktpotenzial für einen leistungsfähigen Dieselmotorkatalysator ist hervorragend: Dieselmotoren finden eine sehr hohe, immer noch wachsende Akzeptanz. Das gilt vor allem für den Antrieb von Personenkraftwagen. Bei Nutzfahrzeugen ist der Dieselmotor ohnehin Favorit. Experten rechnen damit, dass Pkw-Dieselfahrzeuge in Europa mittelfristig einen Marktanteil von 45 Prozent erreichen. ■