

Mittwoch, 11.11.2009

Nanoporöse Materialien in der Energieforschung: Wasserstoffspeicher der Zukunft?

Prof. Dr. Michael Fröba, Institut für Anorganische und Angewandte Chemie,
Universität Hamburg

Nanoporöse Materialien wie z.B. metallorganische Gerüstverbindungen (MOFs), die aus anorganischen – Metall- oder Metalloxid-Clustern – Bausteinen und organischen Verknüpfungseinheiten (Linker) bestehen, könnten als künftige mobile Speichermedien für Wasserstoff oder Methan (im Bereich des Automobilssektors) zum Einsatz kommen, wenn es gelingt, eine genügend hohe Energiedichte in einem entsprechenden Tanksystem zu realisieren.



Im Vergleich zu Materialien, die auf chemisorptiver Speicherung basieren, wie Metallhydride, haben MOFs den Vorteil, dass sie leicht sind, eine schnelle Adsorptions-Desorptions-Kinetik aufweisen und leicht wiederzubefüllen sind. Ein Nachteil ist bisher jedoch, dass aufgrund der schwachen Wechselwirkung der Gase mit dem Gerüst die Speicherkapazität, insbesondere bei Raumtemperatur, noch zu gering ist, um in den Bereich technologischer Anwendbarkeit zu gelangen.

Unser Beitrag zu diesem sich stürmisch entwickelnden Feld basiert auf einer Kombination eines eng verzahnten theoretischen (Molecular Modelling) wie praktischen (Synthese) Ansatzes. Zunächst werden neue Materialien am Computer entworfen und ihre Sorptionseigenschaften mithilfe von Monte-Carlo-Simulationen und DFT-Rechnungen ermittelt. Hand-in-Hand werden schließlich die aussichtsreichen, hoch porösen Kandidaten synthetisiert und charakterisiert, einschließlich der Bestimmung des Speicherpotentials durch Messung druckabhängiger Wasserstoff- oder Methanisoothermen (auf volumetrischem oder gravimetrischem Wege) und Ableitung isosterischer Adsorptionswärmen. Diese Erkenntnisse wiederum fließen in einer Art Rückkopplungs-Schleife in die Modelling-Studien ein.