

## Gemeinsame Presse-Information

### 40 Jahre alter Katalysator birgt Überraschungen für die Wissenschaft

**Ludwigshafen, Zürich, Köln, Berlin, 29. Oktober 2020** – Der Katalysator “Titansilikalit-1“ (TS-1) ist nicht neu: Schon vor fast 40 Jahren wurde er entwickelt und seine Fähigkeit entdeckt, Propylen in Propylenoxid, eine wichtige Grundchemikalie in der Chemieindustrie, umzuwandeln. Jetzt hat ein Wissenschaftlerteam der ETH Zürich, der Universität Köln, dem Fritz-Haber-Institut und der BASF durch die Kombination verschiedener Methoden einen überraschenden Wirkmechanismus dieses Katalysators entdeckt. Diese Erkenntnisse sollen die Katalysatorforschung einen wichtigen Schritt voranbringen.

Propylenoxid wird in der Industrie eingesetzt, um zum Beispiel Polyurethane oder Frostschutzmittel und Hydraulikflüssigkeiten herzustellen. Mehr als elf Millionen Tonnen Propylenoxid werden in der chemischen Industrie weltweit jedes Jahr produziert, davon schon jetzt eine Million durch die Oxidation von Propylen mit Wasserstoffperoxid. Die chemische Reaktion wird katalysiert durch TS-1, ein mikroporöses, kristallines Material, das aus Silizium und Sauerstoff besteht und in dem kleine Mengen Titan enthalten sind. Der Katalysator wird seit 40 Jahren erfolgreich genutzt und die Fachwelt ging davon aus, dass das aktive Zentrum im TS-1 einzelne, isolierte Titanatome enthält, die für die besondere Reaktivität des Katalysators sorgen.

Ein Forscherteam der ETH Zürich, der Universität Köln, des Fritz-Haber-Instituts und der BASF hat diese Annahme in Frage gestellt. “In den vergangenen Jahren kamen Zweifel auf, ob die Annahme über den Wirkmechanismus korrekt ist, da sie sich hauptsächlich auf Analogien zu vergleichbaren Katalysatoren stützt und weniger auf experimentellen Beweisen. Wenn man aber versucht, auf Basis einer falschen Annahme einen Katalysator zu optimieren, ist das sehr schwierig und kann einen in

die völlig falsche Richtung führen. Daher war es wichtig, diese Annahme genauer zu überprüfen“, erläutert der BASF-Wissenschaftler Dr. Henrique Teles, einer der Co-Autoren der wissenschaftlichen Veröffentlichung, den Ausgangspunkt für die Zusammenarbeit.

In einer Studie, die jetzt in “Nature“ veröffentlicht wurde, konnten die Wissenschaftler unter anderem mit Hilfe von Festkörper-NMR-Untersuchungen und Computermodellierungen zeigen, dass zwei benachbarte Titanatome nötig sind, um die besondere katalytische Aktivität zu erklären. Dies wiederum hat das Forscher-Team darauf schließen lassen, dass die Titanatome nicht isoliert vorliegen, sondern dass das katalytisch aktive Zentrum aus einem Titan-Paar besteht. “Keine der Methoden, die wir in der Studie verwendet haben, ist grundsätzlich neu, dennoch hätte keine der beteiligten Forschungsgruppen allein die Untersuchung durchführen können“, betont Prof. Christophe Copéret von der ETH Zürich, der Korrespondenzautor der Publikation. “Nur die Kombination von unterschiedlichen Kenntnissen, Erfahrungen und verschiedenen Techniken hat es möglich gemacht, das aktive Zentrum des Katalysators genauer zu untersuchen.“

“Wir haben viele Jahre an der Aufklärung des Reaktionsmechanismus eines Katalysators für die homogene Katalyse gearbeitet und herausgefunden, dass hier – entgegen den Annahmen in der Literatur – das Wasserstoffperoxid durch ein Titan-Paar aktiviert wird. Es war wirklich ein besonderer Moment, als wir in der aktuellen Untersuchung gesehen haben, dass die Erkenntnisse aus der homogenen Katalyse auch für die heterogene Katalyse zutreffen.“ erklärte der Co-Autor Prof. Albrecht Berkessel von der Universität Köln. Und Dr. Thomas Lunkenbein, Co-Autor vom Fritz-Haber-Institut in Berlin, ergänzt: “Wir freuen uns sehr, dass wir einen Beitrag zu dieser Studie leisten konnten. Mit unserer Analytik konnten wir die Schlussfolgerungen untermauern. Die Erkenntnis eines zweiatomigen aktiven Zentrums ist von grundlegender Bedeutung und eröffnet neue Möglichkeiten in der Katalysatorforschung.“

Das Team ist überzeugt, dass die Erkenntnisse dieser Studie nicht nur dazu beitragen werden, bestehende Katalysatoren zu verbessern, sondern auch neue homogene und heterogene Katalysatoren zu entwickeln.

**Referenz**

Gordon CP, Engler H, Tragl AS, Plodinec M, Lunkenbein T, Berkessel A, Teles JH, Parvulescu AN, Copéret C. Efficient epoxidation over dinuclear sites in Titanium Silicalite-1. Nature (2020)  
doi: 10.1038/s41586-020-2826-3

**Weitere Informationen:**

ETH Zurich  
Prof. Dr. Christophe Copéret  
Department of Chemistry and Applied Biosciences  
Telefon: +41 44 633 93 94  
[ccoperet@inorg.chem.ethz.ch](mailto:ccoperet@inorg.chem.ethz.ch)

Universität zu Köln  
Robert Hahn  
Abt. 81, Presse & Kommunikation  
Telefon: +49 221 470 2396  
[r.hahn@verw.uni-koeln.de](mailto:r.hahn@verw.uni-koeln.de)

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft  
Presse- und Öffentlichkeitsarbeit  
Agatha Frischmuth  
Telefon: +49 8413 3333  
[presse@fhi.mpg.de](mailto:presse@fhi.mpg.de)

BASF SE  
Media Relations  
Birgit Lau  
Telefon: +49 621 60 20732  
[birgit.lau@basf.com](mailto:birgit.lau@basf.com)