

**Jens Kehlet Nørskov
modtog Carlsbergfondets
Forskningspris 2015**

Jens Kehlet Nørskov er professor ved Departments of Chemical Engineering and Photon Science og leder af forskningscentret SUNCAT – Center for Interface Science and Catalysis – på Stanford University og SLAC National Accelerator Laboratory, USA. Han har publiceret mere end 450 videnskabelige artikler og har modtaget en lang række nationale og internationale priser for sit videnskabelige arbejde.

Nørskov er anerkendt for sit betydningsfulde bidrag til teoretiske beskrivelser af overfladefysik og -kemi, katalysatorer, materialer, nanostrukturer og biomolekyler. Hans forskning omfatter blandt andet udviklingen af teorier, der kan forbedre forståelsen af kemiske processer, der foregår på materialers overflade. Han er især engageret i forståelse af katalytiske processer, der har betydning for bæredygtig energi og miljøbeskyttelse.

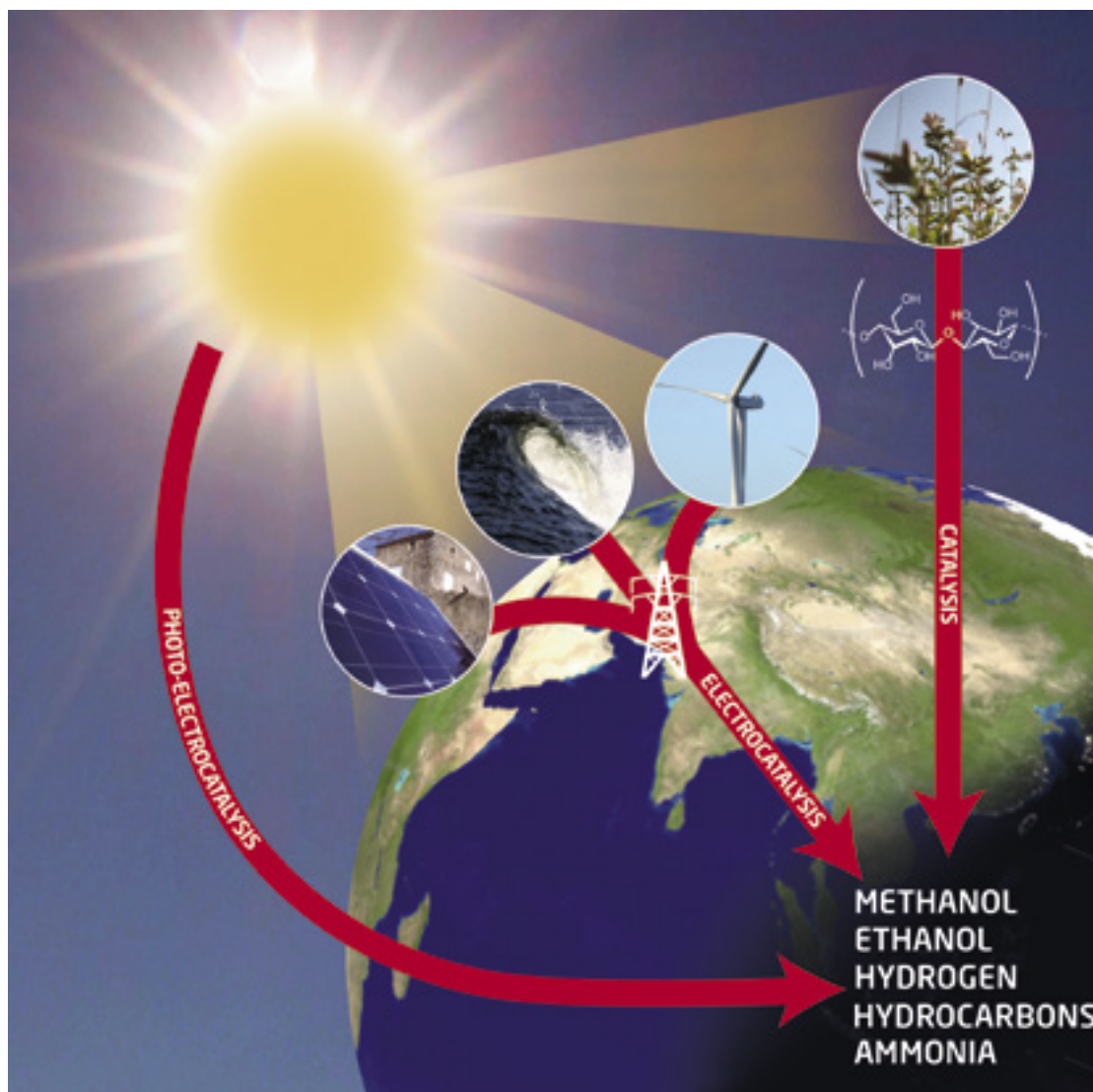
Af
JENS K. NØRSKOV
PROFESSOR , PH.D.
SUNCAT CENTER,
STANFORD UNIVERSITY

3

KUNSTIG FOTOSYNTSE:

OMDANNELSE AF SOLENERGI TIL KEMISK ENERGI

Hvis vi skal gøre os uafhængige af fossile ressourcer, bliver vi nødt til at finde en måde at efterligne naturens fotosyntese på. Derved vil vi kunne gemme solens energi i brændstoffer og danne de kemikalier, der er nødvendige til alle de produkter, der er basis for et moderne samfund. Ny forskning er nødvendig for at forstå, hvordan kunstig fotosyntese kunne virke, og for at finde de katalysatorer, der kan gøre det muligt.



Figur 1
Illustration af kunstig fotosyntese: katalytiske processer til lagring af energien fra sollys i brændstof og andre kemikalier.

Vi står over for enorme udfordringer, fordi vores forbrug af fossile ressourcer truer stabiliteten i jordens klima. Hele vores civilisation er baseret på olie, gas og kul som energikilder. Med den meget positive udvikling, der er sket de seneste år inden for udviklingen af vedvarende kilder til elektrisk energi, solceller og vindmøller, er det dog ikke umuligt, at en stor del af vores strømforbrug snart kan være baseret på solens indstråling. Det løser imidlertid desværre kun en del af problemet, for vi har brug for at kunne gemme energi til natten eller perioder med vindstille og som drivkraft i transportsektoren. Den mest effektive måde at gemme energi på er i form af kemiske bindinger. Det betyder, at vi skal omdanne meget stabile kemiske forbindelser til mindre stabile molekyler - et godt brændstof består af forbindelser, der er så ustabile som muligt, men ikke

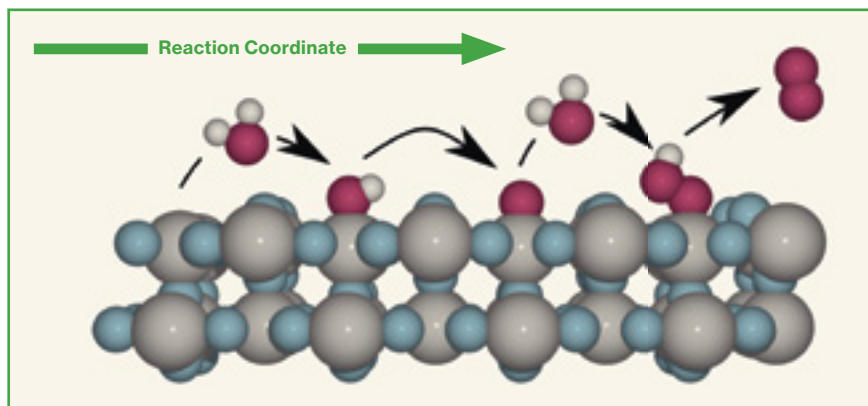
mere end at de ikke eksploderer i hænderne på os. Benzin er et godt eksempel. Hvis vi skal lave benzin, skal vi danne kulbrinter - kæder af $-CH_2-$ enheder. Det kan f.eks. ske ved at tage den mest stabile form for kulstof, CO_2 , og reducere det ved at tilføje brint. Samtidig skal vi fjerne iltatomerne (O) ved at danne vand, H_2O . Den energi, der skal til, kommer fra solen, direkte eller indirekte, som antydnet i Figur 1. Det er en lignende proces, planter benytter, når de i fotosyntesen omdanner CO_2 fra atmosfæren til biologisk brændstof i form af sukker. Derfor kaldes førstnævnte proces ofte kunstig fotosyntese.

For at kontrollere en kemisk proces har vi brug for en katalysator, enten molekyler i opløsning eller faste stoffer, hvor de kemiske processer foregår på overfladen. En simpel proces er illustreret i Figur 2. Katalysatoren binder de reagerende molekyler og gør det mindre energikrævende at bryde bindinger

“
Vi har brug for at kunne gemme energi til natten eller perioder med vindstille og som drivkraft i transportsektoren
”

“
**Vi har kun få år til
 at finde alternativer,
 hvis vi skal fortsætte
 vores nuværende
 levevis.**
 ”

Figur 2
 Illustration af en vigtig katalytisk del-proces i forbindelse med kunstig fotosyntese. Det viser, hvordan en RuO₂ overflade kan hjælpe med oxidationen af vand, H₂O, til protoner og elektroner samt ilt, O₂, (som i fotosyntesen). Protonerne og elektronerne kan f.eks. bruges til at reducere CO₂.



og danne nye. I kunstig fotosyntese skal katalysatoren også hjælpe med at omdanne energirige elektroner, der er dannet ved at absorbere sollys, eller fra vindmøllestrøm, til nye bindinger.

Naturen har over millioner af år udviklet katalysatorer, enzymer, der kontrollerer fotosyntese i planter, men vi har kun få år til at finde alternativer, hvis vi skal fortsætte vores nuværende levevis. Og de nye løsninger/katalysatorer skal helst være mere effektive end naturens - planter omsætter i gennemsnit over et år væsentligt under 1% af energien i det indfaldne sollys til biomasse. Herudover skal katalysatorerne være billige (ingen ædle metaller som platin eller rhodium), og de skal være holdbare.

Fossile ressourcer danner også basis for produktion af utallige produkter, som vi bruger hver dag. Faktisk bruges omkring 10% af al energi i dag til kemisk produktion af essentielle produkter som polymerer og kunstgødning. Vi har derfor også brug for at finde alternative råvarer til disse processer, som antydnet i Figur 1.

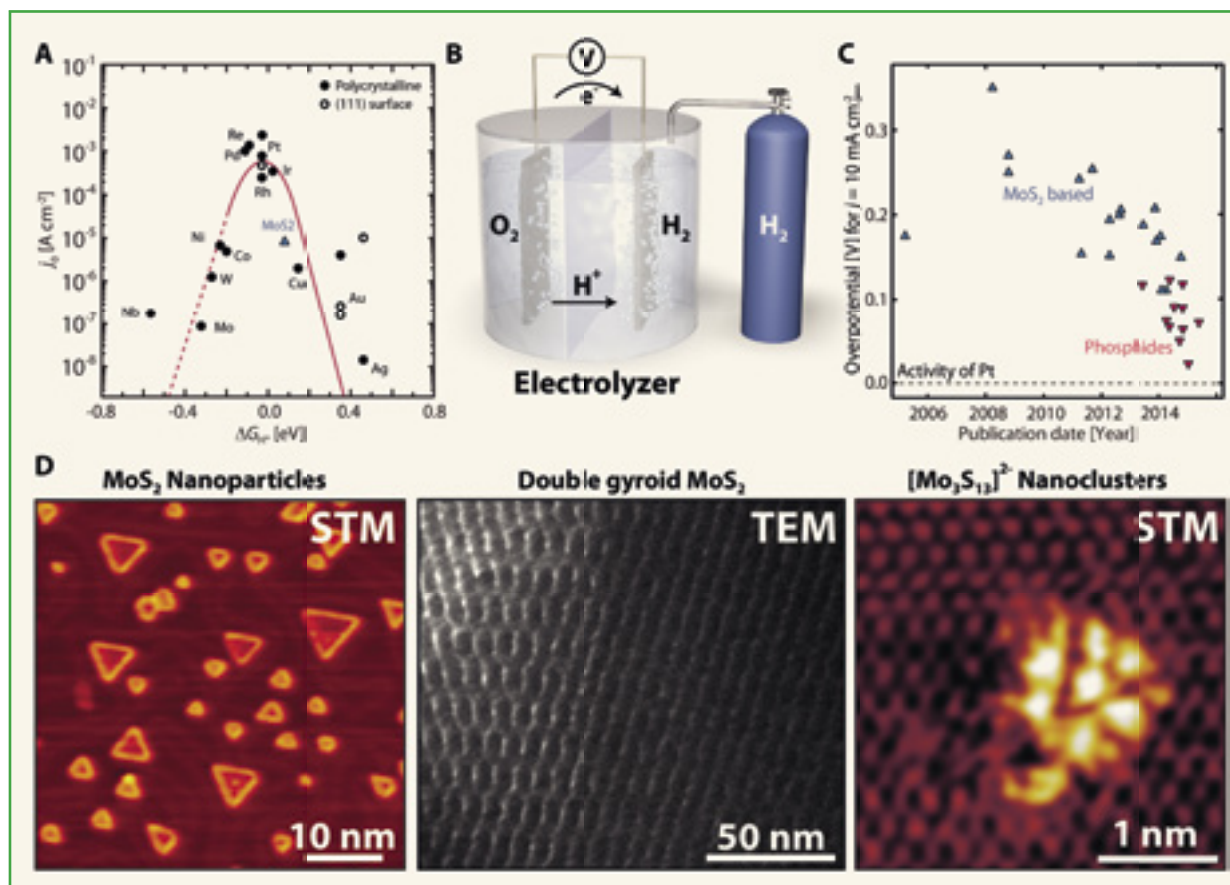
I dag mangler vi gode katalysatorer til de fleste delprocesser, der tilsammen kunne udgøre kunstig fotosyntese. Meget har været prøvet, men det er klart, at empirisk "trial-and-error" meget gerne skulle accelereres betydeligt. Der er tre videnskabelige udviklinger inden for de seneste år, der giver nye redskaber til at gøre det. For det første revolutionerer teoretiske og beregningsmæssige metoder kemien i disse år. Med udgangspunkt i kvantemekaniske beregninger og ved udnyttelse af den eksponentielt stigende computerkraft er det i dag muligt at regne sig frem til kemiske reaktionsmekanismer. Desuden begynder vi at kunne forudsige, om en bestemt katalysator er bedre end en anden. Det åbner for muligheden for at bruge computere til at gennemgå tusinder af katalysatorer. Ved at kombinere disse beregninger med algoritmer til maskinlæring, hvor data, der ikke findes endnu, estimeres på basis af allerede kendte data, kan millioner af

katalysatorer i fremtiden testes på kort tid. De kvantekemiske beregninger har sammen med eksperimenter givet os en forståelse af, hvorfor det er så svært at finde gode katalysatorer for disse processer. Det i sig selv giver inspiration til nye ideer til katalysatorer.

Den anden vigtige udvikling er relateret til udviklingen af avancerede kemiske syntesemetoder i forbindelse med satsningen på nanoteknologi over de seneste 10-20 år. Det har givet os metoder til at kontrollere sammensætningen af en katalysator, atom-for-atom, i visse tilfælde. En sådan kontrol er afgørende for at kunne lave nye, velkontrollerede materialer.

Endelig er der sket en voldsom udvikling i eksperimentelle metoder til at karakterisere katalysatorer og kemiske processer. Elektronmikroskopi giver os i dag direkte billeder af katalysatorer under procesbetingelser, og synkrotroner kan fortælle direkte om, hvilke kemiske forbindelser der sidder på overfladen af en fastofkatalysator, mens processen foregår. Sammen med de beregningsmæssige fremskridt beskrevet ovenfor giver det helt nye muligheder for at forstå de vigtigste dele af en kompleks katalytisk proces. De mest avancerede røntgenkilder, fri-elektronlaserne, kan i dag begynde at følge kemiske omdannelser på den tidsskala (pico-sekunder: 0,000000000001 sek.), hvor processerne foregår.

Som nævnt mangler vi effektive, billige og holdbare katalysatorer til de fleste processer, der indgår i kunstig fotosyntese. Der har imidlertid været et vigtigt gennembrud de seneste år, der har givet os en vigtig ny klasse af katalysatorer til brintproduktion. Elektrolyse af vand kan bruges til at danne brint, et fremragende brændstof, der bruges i brændselsceller og i øvrigt som reaktant overalt i den kemiske industri. Processen består af to delprocesser: en, hvor vand omdannes til ilt og protoner og elektroner (illustreret i Figur 2), og en, hvor protoner og elektroner omdannes til brint: $2(\text{H}^+ + \text{e}^-) \rightarrow \text{H}_2$. For den sidste proces har vi i mange år vidst, at platin, Pt, og andre ædle og dyre metaller er gode katalysatorer. Baseret på en forståelse af, hvilke materialeegenskaber der giver en god katalysator, er det lykkedes os teoretisk at vise, at MoS₂ (som består af hyppigt forekommende, og dermed billige, grundstoffer) også skulle være en rimeligt god katalysator^{1,2} - i hvert fald hvis vi nano-strukturerer materialet sådan, at det eksponerer mange kanter. Mange grupper verden over har arbejdet med at syntetisere sådanne systemer, og Figur 3C viser, hvordan overpotentialet, som er et udtryk for energitabet i processen, er gået voldsomt ned de seneste år^{3,4,5,6}.



Så kampen er gået ind i en ny fase, men der er stadig væsentlige uløste fundamentale problemer med at finde katalysatorer til kunstig fotosyntese. For de fleste delprocesser findes der ingen katalysatorer eller processer, der for alvor virker, ikke engang i laboratoriet. I den forbindelse skal man huske på, at en løsning skal være skalerbar, dvs. den skal kunne tages fra laboratoriet og laves i en skala, der er sammenlignelig med de ca. 100 millioner tønder olie, der årligt forbruges i dag. Som illustreret med eksemplet ovenfor, skal løsningen givetvis skabes i samarbejde, hvor teori og eksperiment kan udforske principper og løsninger. Der sættes på denne forskning mange steder i verden, men langt fra nok, givet vigtigheden og ikke mindst den tikkende bombe, som den hastigt stigende CO₂-udledning udgør. Under COP21 i Paris rejste Bill Gates problemet og lovede at investere væsentlige dele af sin formue i at finde løsninger. Han fik en række regeringer, inklusive den danske, til at love væsentlige stigninger i bevillinger til energiforskning, og vi kan forvente, at der bliver forøget fokus på området. Privatpersoner og fonde er i stigende grad opmærksomme på, at her ligger måske den største videnskabelige og tekniske udfordring med afgørende betydning

for kloden. Senest valgte Villum Fonden at markere Veluxgruppens 75-års jubilæum ved at annoncere en bevilling på 150 mio. kr. til forskning i den videnskabelige basis for nye vedvarende energiløsninger. Der må ses som et godt tegn.

Noter

- 1 B. Hinnemann, P.G. Moses, J. Bonde, K.P. Jørgensen, J.H. Nielsen, S. Horch, I. Chorkendorff, and J.K. Nørskov: *Biometric hydrogen evolution*, J. Am. Chem. Soc. 127, 5308 (2005).
- 2 J.K. Nørskov, T. Bligaard, J. Rossmeisl, and C.H. Christensen: *Towards the computational design of solid catalysts*, Nature Chemistry 1, 37 (2009).
- 3 Zhi Wei Seh, Jakob Kibsgaard, Colin F. Dickens, Ib Chorkendorff, Jens K. Nørskov, Thomas F. Jaramillo, *Combining Theory and Experiment in Electrocatalysis: A Framework for Providing Insights into Materials Design* (2016).
- 4 T.F. Jaramillo, K.P. Jørgensen, J. Bonde, J.H. Nielsen, S. Horch, I. Chorkendorff, *Identification of active edge sites for electrochemical H₂ evolution from MoS₂ nanocatalysts*, Science 317, 100 (2007).
- 5 J. Kibsgaard, Z. Chen, B.N. Reinecke, T.F. Jaramillo, *Engineering the surface structure of MoS₂ to preferentially expose active edge sites for electrocatalysis*, Nature Materials 11, 963 (2012).
- 6 J. Kibsgaard, T.F. Jaramillo, F. Besenbacher, *Building an appropriate active-site motif into a hydrogen-evolution catalyst with thiomolybdate [Mo₃S₁₃]²⁻ clusters*, Nature Chemistry 6, 248 (2014).

Figur 3
Katalysatorer til elektrokemisk brintproduktion. (A) Afbildning af katalytisk aktivitet af forskellige metaller for elektrokemisk brintudvikling. x-aksen viser, at en optimal katalysator, såsom platin (Pt), har en brintadsorptionsenergi på $\Delta G_{H^*} = \sim 0$ eV. Kanterne på molybdænsulfid, MoS₂, blev teoretisk forudsat, og sidenhen eksperimentel påvist at være en god katalysator for brintudvikling.¹ (B) Skematisk afbildning af elektrokemisk brintproduktion. (C) Afbildning der viser den kronologiske udvikling af overpotentialet for brintudvikling. (D) Tre forskellige nanostrukturerede molybdænsulfidbrintudviklingskatalysatorer. Venstre: triangulær molybdænsulfid nanopartikel afbildet med scanning tunnel mikroskopi⁴. Midt: 3-dimensionel mesoporøs nanostruktur af molybdænsulfid afbildet med transmission elektron mikroskopi. Højre: molekylære Mo₃S₁₃ nanopartikler afbildet med scanning tunnel mikroskopi⁶.