

# Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

## Institut für Biowissenschaften / Chemie / Mathematik / Physik

**Fachgebiet:** *Chemie*

Betreuer: Prof. Dr. Matthias Beller

Ihr Name Carolin A. M. Stein

(e-mail: carolin.stein@catalysis.de)

### Titel Ihrer Arbeit

#### Deutsche Zusammenfassung

Der Übergang zu einer wasserstoffbasierten Energiewirtschaft erfordert sichere, effiziente, kostengünstige und reversible Wasserstoffspeichertechnologien. Unter verschiedenen Techniken erscheint die chemische Wasserstoffspeicherung mit CO<sub>2</sub> und seinen Derivaten als Trägermoleküle aufgrund ihrer Verfügbarkeit, geringen Toxizität und der Möglichkeit zur Erreichung von CO<sub>2</sub>-Neutralität vielversprechend.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit lag auf der Entwicklung und Evaluierung katalytischer Systeme für die Wasserstoffspeicherung und -freisetzung unter Verwendung von drei verschiedenen Trägermolekülen: Ameisensäure, Kaliumformiat und Methylformiat. Eine Kombination aus homogenen und heterogenen Katalysatorsystemen wurde untersucht, wobei Parameter wie Aktivität, Selektivität, Katalysator-Recyclingfähigkeit und Eignung unter industriell relevanten Bedingungen im Fokus standen. Der Inhalt dieser Arbeit reicht von der Grundlagenforschung zur Machbarkeit von Methylformiat als flüssigem Wasserstoffträger bis hin zur praktischen Umsetzung robuster Wasserstoffspeichersysteme.

Neben mechanistischer Studien und der Optimierung von Katalysatoren wurden ausgewählte Systeme in Zusammenarbeit mit einem Industriepartner unter skalierbaren und anwendungsrelevanten Bedingungen getestet. Dieser umfassende Ansatz zielt darauf ab, die Lücke zwischen akademischer Forschung und industrieller Machbarkeit zu schließen.

#### Englisch Zusammenfassung

The transition to a hydrogen-based economy requires safe, efficient, affordable and reversible hydrogen storage technologies. Among different approaches, chemical hydrogen storage with CO<sub>2</sub> and its derivatives as carrier molecules seems promising due to their abundance, low toxicity, and ability to achieve carbon neutrality.

The focus of this work was to develop and evaluate catalytic systems for hydrogen storage and release using three different carrier molecules: formic acid, potassium formate, and methyl formate. A combination of homogeneous and heterogeneous catalyst systems was examined, with a focus on parameters such as activity, selectivity, catalyst recyclability, and suitability under industrially relevant conditions. This work extends from fundamental

research on the feasibility of methyl formate as a liquid hydrogen carrier, to the practical implementation of robust hydrogen storage systems.

Beyond exploring mechanistic insights and optimizing catalysts, selected systems were tested in collaboration with an industrial partner under scalable and application-relevant conditions. This comprehensive approach aims to bridge the gap between academic research and industrial feasibility.