OxyCAT

Sauerstoff-Elektrokatalysatoren aus Ni/Fe-basierten MOFs und Legierungen durch kombinatorischen Materialansatz

Programm / Ausschreibung	Energieforschung (e!MISSION), Energieforschung, Energieforschung 8. Ausschreibung	**Status**	abgeschlossen
Projektstart	01.03.2023	**Projektende**	28.02.2026
Zeitraum	2023 - 2026	**Projektlaufzeit**	36 Monate
Keywords	Hydrogen; MOF; AEM; Ni-Fe Alloy		

Projektbeschreibung

Es wird erwartet, dass die weltweiten Investitionen in Wasserstoff bis zum Jahr 20301 300 Milliarden US-Dollar übersteigen werden, da die Wasserstoffenergie das Potenzial bietet, die Wasserstofferzeugung über die Elektrolyseurtechnologie mit erneuerbaren elektrischen Energiequellen zu verbinden und "grünen" Wasserstoff zu erzeugen. Von den Elektrolyseurtechnologien bieten Anionenaustauschmembran-Wasserelektrolyseure (AEMWE) ein großes Potenzial, da sie im Vergleich zu den bekannteren Protonenaustauschmembran-Wasserelektrolyseuren die Verwendung billigerer Katalysatoren ermöglichen und die Karbonatbildungsprobleme der bereits industriell eingesetzten alkalischen Wasserelektrolyseure (AWE) vermeiden. Die billigeren AEMWE-Katalysatoren bedürfen jedoch noch erheblicher technologischer Verbesserungen, da ihre derzeitige Leistung um mehr als eine Größenordnung hinter den teuren Katalysatoren auf der Basis von Platingruppenmetallen (PGM) zurückbleibt.

Das Hauptziel dieser Arbeit ist daher die Optimierung der AEMWE-basierten Wasserstoffproduktion mit dem Ziel, die Leistung wirtschaftlicher Katalysatoren auf Nicht-PGM-Basis zu verbessern. Wir werden uns auf die Sauerstoffentwicklungsreaktion (OER) konzentrieren, die die Engpassreaktion im Wasserspaltungsprozess ist, und werden teure Metall- oder Metalloxidkatalysatoren vermeiden und stattdessen Katalysatoren auf Ni- oder Fe-Basis verwenden, um die Investitionskosten für AEMWE zu senken und so den Weg für deren späteren Markteintritt zu ebnen.

Um die derzeitigen Beschränkungen von Nicht-PGM-Katalysatoren zu überwinden, entwickelt OxyCAT mehrere innovative Konzepte, wie z. B. 1) kombinatorische elektrochemische Abscheidung (CED) für die Erzeugung von Ni-Legierungs- und metallorganischen Gerüstbibliotheken (MOF) mit hohem Durchsatz für eine schnelle Materialoptimierung; 2) die Verwendung von orientierter elektrophoretischer Abscheidung von MOF-Katalysatoren zur Maximierung der Massentransportraten; 3) Maximierung der aktiven Katalysatoroberflächen durch Nanostrukturierung, Steuerung der Benetzbarkeit und beschleunigte Blasenablösung zur Optimierung der OER-Katalysatorleistung.

Es wird daher erwartet, dass OxyCAT verbesserte OER-Katalysatoren für AEMWEs entwickelt und Zusammensetzungs- und Struktur-Funktionsbeziehungen für die OER-Leistung herstellt. Unser Ziel ist es, die Zusammensetzungen von Ni-

Übergangsmetall-Legierungen sowie von bimetallischen MOF-Elektrokatalysatoren auf der Basis von Ni-Übergangsmetall für die OER-Leistung unter industriell relevanten Bedingungen zu optimieren und die Auswirkungen ihrer veränderten Zusammensetzung auf die Leistung und Stabilität zu verstehen. Wir erwarten, dass wir neue Methoden zur Kontrolle der Nano-/Mikrostruktur von OER-Katalysatoren durch kontrollierte elektrophoretische Abscheidung und MOF-Wachstum entwickeln werden, um den Massentransport, die Benetzbarkeit und die Ablösung von Blasen zu verbessern und so die OER-Leistung zu optimieren. Die Auswirkungen dieser Faktoren auf die langfristige Katalysatorleistung werden untersucht, um Grundsätze für das Design von Nicht-PGM-OER-Katalysatoren abzuleiten. Die Ergebnisse sollen den Weg für eine kostengünstige und praktische Nutzung von AEMWE ebnen.

Übersetzt mit www.DeepL.com/Translator (kostenlose Version)

Abstract

Worldwide, hydrogen investments are expected to exceed US 300 Billion by 20301 as hydrogen energy offers the potential to pair hydrogen generation with renewable electrical energy sources via electrolyser technology, generating “green” hydrogen. Of the electrolyser technologies, anion exchange membrane water electrolysers (AEMWEs) offer much potential as they allow the use of cheaper catalysts compared to the better-known proton exchange membrane water electrolyers and avoid the carbonate formation problems of the already industrially used alkaline water electrolyzers (AWEs). However, the cheaper AEMWE catalysts still require significant technological improvements as their current performances fall short of the expensive platinum group metal (PGM)-based catalysts by more than an order of magnitude.

The main goal of this proposed work is therefore to optimize AEMWE based hydrogen production, directed at improving the performance of economical non-PGM based catalysts. We will focus on the oxygen evolution reaction (OER), which is the bottleneck reaction in the water splitting process, and will avoid expensive metal or metal oxide catalysts, utilizing instead Ni or Fe-based catalysts to help lower AEMWE capital expenditure costs and thereby pave the way for their eventual market entry.

To address current non-PGM catalyst limitations, OxyCAT develops several innovative concepts such as 1) combinatorial electrochemical deposition (CED) for the high throughput generation of Ni alloy and metal-organic framework (MOF) libraries for rapid materials optimization; 2) the use of oriented electrophoretic deposition of MOF catalysts to maximize mass transport rates; 3) maximization of active catalyst surface areas through nanostructuring, wettability control and accelerated bubble detachment to optimize OER catalyst performance.

It is therefore expected that OxyCAT will develop improved OER catalysts for AEMWEs, and establish compositional and structure-function relationships for OER performance. We aim to optimize the compositions of Ni-transition metal alloys as well as Ni-transition metal bimetallic MOF based electrocatalysts for OER performance under industrially relevant conditions and to understand the impact of their changing composition on performance and stability. We expect to establish new methods of controlling OER catalyst nano/microstructure through controlled electrophoretic deposition and MOF growth, to enhance mass transport, wettability and bubble detachment, thereby optimizing their OER performance. The impact of these factors on long-term catalyst performance will be studied to derive principles for non-PGM OER catalyst design, and the findings are expected to pave the way towards cost-effective and practical AEMWE utilization.

Projektkoordinator

- Universität Wien Institut für Funktionelle Materialien und Katalyse

Projektpartner

- AIT Austrian Institute of Technology GmbH
- Universität Wien Institut für Anorganische Chemie