

## Mat4Wasserstoff

Materialien für die effiziente Wasserstoffproduktion durch Kopplung von Elektrokatalyse und Plasmonik

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Energieforschung (e!MISSION), Energieforschung, Energieforschung 8. Ausschreibung	<b>Status</b>	abgeschlossen
<b>Projektstart</b>	01.10.2022	<b>Projektende</b>	31.12.2023
<b>Zeitraum</b>	2022 - 2023	<b>Projektlaufzeit</b>	15 Monate
<b>Keywords</b>	Elektrospinnen, Karbonisieren, Oberflächenfunktionalisierung, Photoelektrochemische Wasserspaltung, Wasserstoff, Plasmonik		

### Projektbeschreibung

Mat4Wasserstoff befasst sich mit der Wasserstofftechnologie und konzentriert sich auf die Entwicklung neuartiger Materialien und deren Optimierung für die hocheffiziente photoelektrochemische Produktion (PEC) von Wasserstoff. Wasserstoff (H<sub>2</sub>) als einer der effizientesten Energieträger, der fossile Rohstoffe wie Öl, Kohle und Erdgas ersetzen kann, ist einer der vielversprechendsten Ansätze, um das Ziel der Klimaneutralität bis 2040 zu erreichen. In diesem Zusammenhang hat die österreichische Regierung verschiedene Programme als Verpflichtung zum EU Green Deal beschlossen. Diese Programme unterstützen innovative Lösungen zur Anpassung unseres Lebens und unserer Wirtschaft an den zunehmenden Klimawandel und rücken Österreich als Beschäftigungsmotor und innovativen Wirtschaftsstandort in den Fokus. Das Ziel der Klimaneutralität bis 2040 forciert, durch intensive Nutzung aller zukunftsweisenden Technologien, den CO<sub>2</sub>-Ausstoß zu reduzieren und die globalen Klimaziele zu erreichen. Um dieses Ziel zu erreichen, wird ein multidisziplinäres Team aus erfahrenen Forschern mit internationaler Sichtbarkeit und ausgewiesene Expertise gebildet. Das Konsortium besteht aus Partnern aus unterschiedlichen komplementären Forschungsbereichen, ohne dass es zu Überschneidungen der Aktivitäten kommt. MUL und ESI Leoben sind die führenden österreichischen Institutionen auf dem Gebiet der Materialwissenschaften. Der tschechische Partner (Masaryk Universität) bringt sein fundiertes Fachwissen auf dem Gebiet der Plasmaerzeugung und deren Anwendung für Materialoberflächenmodifikationen ein, während das PCCL auf dem Gebiet der funktionellen Polymermaterialien internationale Anerkennung erlangt hat.

Mat4Wasserstoff zielt darauf ab, die anspruchsvolle Aufgabe der Entwicklung stabiler und effizienter PEC-Materialien zu bewältigen, indem eine neue Plattform zur Synthese nachhaltiger Photokatalysatoren entwickelt wird, die unter simulierter Bestrahlung durch die Kopplung von Oberflächenplasmonenresonanz und Elektrokatalyse effizient Wasser spalten. Zur Herstellung von Nanofaserpolymeren wird das Verfahren des Elektrospinnen verwendet, das gegenüber anderer Synthesemethoden erhebliche Vorteile bietet, darunter Kosteneffizienz, Skalierbarkeit und technische Vielseitigkeit. Der Prozess der photoelektrochemischen Wasserspaltung, in dem Wasser als Rohstoff zur Erzeugung von Wasserstoff aus Sonnenenergie verwendet wird, hat das Potential einen großen Beitrag zur österreichischen Wasserstoff-Initiative zu liefern. Um die Wasserstofferzeugung im großen Maßstab durchführen zu können, werden jedoch effizientere Photokatalysatormaterialien benötigt. Ziel des Mat4Wasserstoff-Projekt ist es daher maßgeschneiderte Nanokohlenstoff-3D-

Hybridmaterialien zur photoelektrochemischen Wasserspaltung zu entwickeln. Neuerung des Projekts ist einerseits die Verwendung innovativer Syntheseansätze (plasmaunterstütztes Elektrosponnen) und andererseits die schnellere Strukturoptimierung durch direkte Korrelation der gemessenen Effizienz mit der atomaren Struktur (untersucht mit modernsten TEM Charakterisierungsmethoden). Ziel ist es Materialschablonen mittels Elektrosponnen herzustellen und diese zu karbonisieren und/oder kalzinieren. Die Oberfläche der Nanofasermatten soll anschließend mit Ag-, Au- und CuO mit und ohne TiO<sub>2</sub> funktionalisiert werden, um die Wasserstoffproduktion durch photochemische Wasserspaltung zusätzlich zu verbessern. Besonderes Augenmerk wird darauf gelegt, eine starke Haftung von den Katalysator-Nanopartikeln in der Nanofasermatrix zu erreichen, damit diese sich während des operativen Einsatzes nicht ablösen. Ziel ist es einen wirtschaftlichen Syntheseprozess zu entwickeln, um Materialien mit herausragender photoelektrochemischer Leistung und langjähriger Stabilität zu liefern. Laut eines Berichts des US-Energieministeriums sind zumindest 2 Jahre Lebensdauer für die Wasserstoffproduktion durch photoelektrochemische Wasserspaltung notwendig. Zusammengefasst umfasst das Mat4Wasserstoff-Projekt eine Reihe von innovativen Aspekten: (i) Synthese von einzigartigen Nanofasermatten mittels plasmagestützten Elektrosponnen (ii) kontrollierte Oberflächenfunktionalisierung der Kohlenstoffmatrix zur Herstellung stabiler Photokatalysatoren mit großer Oberfläche (iii) detaillierte photoelektrochemische Charakterisierung kombiniert mit modernsten in-situ TEM Untersuchungen von Einzelfasern.

## **Abstract**

Mat4Hydrogen tackles emerging topic of hydrogen technology and focuses on the development of novel materials and their optimization for the highly efficient photoelectrochemical production (PEC) of hydrogen. Hydrogen (H<sub>2</sub>) as one of the most efficient energy carriers replacing fossil fuels such as oil, coal and natural gas is one of the most promising approaches to achieve the goal of climate neutrality by 2040. In this context, the Austrian government has launched several programs as a commitment to the EU Green Deal to achieve climate neutrality by 2040 and switch to energy from renewable sources by 2030. These programs support innovative solutions to adapt our lives and economy to increasing climate change and put Austria in the spotlight as an employment driver and innovative business location.

Climate neutral 2040 aims to reduce CO<sub>2</sub> emissions and achieve global climate targets through the intensive use of advanced technologies. To achieve this goal, a multidisciplinary team of experienced researchers with international visibility and proven expertise in the field is being formed. The consortium consists of partners from different complementary research areas without overlapping activities. MUL and ESI Leoben are the leading Austrian institutions in the field of materials science. The Czech partner (Masaryk University) contributes its deep expertise in the field of plasma generation and its application for material surface modification, while PCCL has gained international recognition in the field of functional polymer materials.

Mat4Hydrogen aims to address the challenging task of stable and efficient PEC materials by developing a new platform for the synthesis of sustainable photocatalysts that efficiently split water under simulated irradiation by coupling surface plasmon resonance and electrocatalysis. The process of electrospinning is used to produce nanofiber polymers, which offer significant advantages over other synthesis methods, including cost efficiency, scalability, and technical versatility. The process of photoelectrochemical water splitting, in which water is used as a raw material to produce hydrogen from solar energy, has the potential to make a major contribution to the Austrian Hydrogen Initiative. However, to perform hydrogen production on a large scale, more efficient photocatalyst materials are needed. Therefore, the aim of the Mat4Hydrogen project is to develop tailored nanocarbon 3D hybrid materials for photoelectrochemical water splitting. Novelty of the project is on the one hand the use of innovative synthesis approaches (plasma assisted electrospinning) relying on surface plasmon resonance of targeted materials and on the other hand to foster structure optimization by direct

correlation of the measured efficiency with the atomic structure (investigated with state-of-the-art TEM characterization methods). The goal is to fabricate material templates by electrospinning and to carbonize and/or calcine them. The surface of the nanofiber mats will then be functionalized with Ag, Au, CuO with and without TiO<sub>2</sub>, to further enhance hydrogen production by photochemical water splitting. Special attention will be paid to achieve strong adhesion from the catalyst nanoparticles in the nanofiber matrix to avoid degradation and that particles do not detach during operational use. The goal is to develop an economical synthesis process to deliver materials with outstanding photoelectrochemical performance and long-term stability. According to a U.S. Department of Energy report, at least 2 years of lifetime is required for hydrogen production by photoelectrochemical water splitting. In summary, the Mat4Water introduces several innovative aspects: (i) synthesis of unique nanofiber mats via plasma-assisted electrospinning (ii) controlled surface functionalization of the carbon matrix to produce stable high surface area photocatalysts coupled with (iii) surface plasmon resonance and (iv) detailed photoelectrochemical characterization combined with state-of-the-art in-situ TEM studies of single fibers.

### **Projektkoordinator**

- Montanuniversität Leoben

### **Projektpartner**

- Masaryk University Department of Physical Electronics
- Polymer Competence Center Leoben GmbH
- Österreichische Akademie der Wissenschaften