

## ProLipEM

Lipid-like liquid crystals as proton conducting materials for fuel cells

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Spin-off Fellowship, Spin-off Fellowship, 2. AS Spin Off Fellowship 2022-2027	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.03.2024	<b>Projektende</b>	31.01.2026
<b>Zeitraum</b>	2024 - 2026	<b>Projektlaufzeit</b>	23 Monate
<b>Keywords</b>	Proton-exchange membranes; organic materials; fuel cell;		

### Projektbeschreibung

Die Zukunft der Energieerzeugung liegt jenseits der fossilen Brennstoffe, da die weltweiten Ressourcen abnehmen und die vom Menschen verursachte Verschmutzung durch deren übermäßige Nutzung den Klimawandel vorantreibt. Eine vielversprechende Möglichkeit der Energieerzeugung sind Brennstoffzellen (FC), die elektrische Energie aus der elektrochemischen Reaktion von Wasserstoff und Sauerstoff gewinnen. Brennstoffzellensysteme werden derzeit in Fahrzeugen und stationären Stromversorgungsanlagen eingesetzt, und es wird erwartet, dass sie sich zunehmend verbreiten werden. Polymermembranen spielen eine Schlüsselrolle in mehreren Klassen von FC, darunter Polymerelektrolytmembranen (PEMFC), Direktmethanolmembranen (DMFC) und alkalische Membranen (AFC), die für Fahrzeuge und tragbare Geräte konzipiert sind. PEMs bestehen jedoch in der Regel aus Perfluorsulfonsäuren (PFSA), meist Nafion™. PFSA haben mehrere Nachteile, darunter eine begrenzte Bandbreite an Betriebsbedingungen, hohe Kosten (>\$500/sq.m) und die Umweltproblematik im Zusammenhang mit perfluorierten Verbindungen. Die von Toyota, GM und dem US-DoE für das Jahr 2030 gesteckten Ziele verlangen nach FC mit höherem Wirkungsgrad und höheren Betriebstemperaturen (>120°C). Die derzeitigen PFSA-Membranen können diese Ziele nicht erfüllen, und die Suche nach Alternativen ist von höchster Priorität. Im Rahmen dieses Projekts werden vielversprechende Kohlenwasserstoff-Alternativen zu PEMs entwickelt, die auf unserem urheberrechtlich geschützten Wissen über Flüssigkristalle (LCs) aus lipidähnlichen Molekülen (Lipoiden), die Protonen leiten, aufbauen: ProLipEMs. ProLipEMs bilden sich, wenn Lipidoide mit Säuren gemischt werden, die sie in LCs mit ionischen Nanokanälen (0,5-2 nm breit) verwandeln, durch die Protonen geleitet werden. Die Lipoid-Bausteine von ProLipEMs werden in einem umweltfreundlichen Prozess aus kostengünstigen Ausgangsmaterialien synthetisiert, und die Materialkosten werden nach dem Scale-up voraussichtlich <\$100/sq.m betragen. ProLipEMs haben grundlegende Vorteile bezüglich Materialeigenschaften gegenüber den derzeitigen PEMs: Da sie nur ein Minimum an Wasser enthalten, sind sie unempfindlich gegenüber Änderungen der relativen Luftfeuchtigkeit und zeigen eine erhöhte Leitfähigkeit bei höheren Temperaturen. Im Gegensatz dazu leiden PFSA unter Dehydrierung und die Leitfähigkeit nimmt oberhalb von 80°C ab. Die Widerstandsfähigkeit von ProLipEM gegenüber hohen Temperaturen und niedriger Luftfeuchtigkeit dürfte daher ihre Verwendung in verschiedenen Klassen von FC erleichtern und das Spektrum der FC-Anwendungen erweitern. Die Entwicklung von ProLipEMs in Richtung Kommerzialisierung wird durch mehrere Meilensteine erreicht. Erstens werden die am besten protonenleitenden Materialien aus den Hunderten von möglichen Strukturen durch Hochdurchsatz-Screening

mit Hilfe von maschinellem Lernen identifiziert. Von den vielversprechenden "Hit"-ProLipEM-Materialien werden durch die Messung grundlegender temperatur- und feuchtigkeitsabhängiger Eigenschaften ihre potenziellen Einsatzbereiche in FCs ermittelt. Das Projekt wird auch die Maßstabsvergrößerung der Membranproduktion umfassen, damit sie in die Membranmontageprozesse passt. Schließlich werden die wichtigsten Leistungsindikatoren von ProLipEMs in FC-Umgebungen getestet, einschließlich Leistungsdichte, Gasdurchlässigkeit, Betriebslebensdauer und Langzeitdegradation.

## Abstract

The future of energy production lies beyond fossil fuels, as global resources decrease and manmade pollution from its overuse drives climate change. One highly promising means of energy generation is through fuel cells (FCs), which derive electrical energy from the electrochemical reaction of hydrogen and oxygen. FC systems are currently used in vehicles and stationary power applications and are expected to become increasingly widespread. Polymer membranes play a key role in several classes of FCs including polymer electrolyte membrane (PEMFC), direct methanol (DMFCs) and alkaline (AFCs), which are designed for vehicles and portable devices. However, PEMs are typically composed of perfluorosulfonic acids (PFSAs), most commonly Nafion™. PFSAs have several drawbacks, including a limited range of operating conditions, high cost (>\$500/sq.m), and the environmental issues surrounding perfluorinated compounds. Targets set by Toyota, GM, and US DoE for 2030 outline demands for FCs with higher efficiency and higher operating temperatures (>120°C). Current PFSA membranes cannot meet these targets and finding alternatives is an imminent priority.

This project will develop promising hydrocarbon alternatives to PEMs, building on our proprietary knowledge of liquid crystals (LCs) of lipid-like molecules (lipidoids) that conduct protons: ProLipEMs. ProLipEMs form when lipidoids are mixed with acids, transforming them into LCs containing ionic nanochannels (0.5-2 nm wide) through which protons are conducted. The lipidoid building blocks of ProLipEMs are synthesized in an environmentally-friendly process from low cost starting materials, and material costs after scale-up are anticipated to be <\$100/sq.m. ProLipEMs have fundamental material property advantages over current PEMs: because they contain minimal water, they are unaffected by changes in relative humidity (RH) and show increased conductivity at higher temperatures. In contrast, PFSAs suffer dehydration and conductivity decreases above 80°C. Thus, the resilience of ProLipEM to high temperatures and low humidities should facilitate their use in different classes of FCs, broadening the range of FC applications.

Developing ProLipEMs towards commercialization will be achieved through several milestones. Firstly, the highest proton conducting materials will be identified from the 100s of possible structures using high-throughput screening facilitated by machine learning. From the promising "hit" ProLipEM materials, measuring fundamental temperature and RH-dependent properties will identify their potential windows of operation within FCs. The project will also encompass scale-up of membrane production to fit into membrane assembly processes. Finally, key performance indicators of ProLipEMs will be tested within FC environments, including power density, gas permeability, operating lifetime and long-term degradation.

## Projektpartner

- Universität Graz