

## BEES-4-CO2RR

Bioinspired Electrodes for Efficient and Scalable electrocatalytic CO<sub>2</sub> reduction to high added-value products

<b>Programm / Ausschreibung</b>	DST 24/26, DST 24/26, Schlüsseltechnologien im produktionsnahen Umfeld, 2024: Robotik, Advanced Materials, Photonik und Smarte Textilien	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.04.2025	<b>Projektende</b>	31.03.2028
<b>Zeitraum</b>	2025 - 2028	<b>Projektlaufzeit</b>	36 Monate
<b>Keywords</b>	bio-inspired structures; NIL; CO <sub>2</sub> reduction reaction; electrocatalysis		

### Projektbeschreibung

Die elektrokatalytische CO<sub>2</sub>-Reduktionsreaktion (CO<sub>2</sub>RR) ist der vielversprechendste Weg zur CO<sub>2</sub>-Nutzung, da sie effizient, vielseitig, skalierbar und mit erneuerbaren Energien kompatibel ist. BEES-4-CO<sub>2</sub>RR entwickelt effiziente, nachhaltige und skalierbare katalytische Elektroden, die von der Natur inspiriert und in einem skalierbaren Durchflussreaktor integriert sind, um eine effiziente CO<sub>2</sub>RR zu CH<sub>4</sub> und anderen Kohlenwasserstoffen zu ermöglichen. Die technischen Innovationen des Projekts werden weitreichende Auswirkungen auf die Energie- und Chemieindustrie haben.

Im Mittelpunkt des Konzepts steht die Entwicklung neuartiger poröser Katalysatormaterialien auf gasdiffundierenden Elektroden (GDEs), die gesputterte Kupfer- und Kupfer-Zink-Legierungskatalysatoren mit multifunktionalen, bio-inspirierten polyionischen Flüssigkeitsstrukturen kombinieren, die speziell entwickelt und mittels Nano-Imprint-Lithographie (NIL) hergestellt werden. Diese innovativen Elektroden vereinen zahlreiche kritische Funktionen zur Steigerung der CO<sub>2</sub>RR-Leistung:

- (i) Super)hydrophilie kombiniert mit (Super)aerophobie der neuartigen aktiven Materialoberfläche durch bio-inspirierte Strukturierung. Dies gewährleistet eine optimale Benetzung des Katalysators mit dem Elektrolyten und eine schnelle Freisetzung der gebildeten gasförmigen Produkte, um die katalytischen Stellen für weitere Reaktionen freizugeben, was die Aktivität und die Stromstabilität steigert.
- (ii) Verbesserte katalytische Eigenschaften durch die Implementierung selektiver Cu-Zn-Legierungskatalysatoren in Kombination mit der Imidazolium-Funktionalisierung des Polymers, die das gelöste CO<sub>2</sub> aktiviert und somit den Prozess an der Dreiphasengrenze verbessert und die Menge des mit dem Katalysator interagierenden CO<sub>2</sub> erhöht.
- (iii) Hydrophobie des porösen Trägersubstrats zur Vermeidung der sogenannten "Flutung" der Elektrode mit dem Elektrolyten. Der Einsatz poröser, nicht fluorierter Polymerfolien anstelle des häufig verwendeten kohlenstoffhaltigen GDE wird voraussichtlich zu einer solchen positiven Wirkung führen und die Langzeitstabilität fördern.
- (iv) Verbesserte elektrische Leitfähigkeit der Elektrode. Neben hochleitfähigen Metallkatalysatoren wird die Leitfähigkeit des NIL-Polymers durch eingebettete Cu-Aktivspezien und/oder auf der Polymeroberfläche abgelagerte Cu-Inseln verbessert, was sich positiv auf die Stromdichte und Selektivität auswirkt.

Die entwickelte multifunktionale Elektrode: (i) wird durch skalierbare Methoden wie Sputtern und NIL verarbeitet, (ii) verwendet keine kritischen Rohstoffe (CRMs), ohne die Leistung zu beeinträchtigen, (iii) untersucht Alternativen zu fluorierten polymeren porösen Substraten und (iv) implementiert ein leicht skalierbares Durchflussreaktordesign, bei dem CO<sub>2</sub> über eine GDE zu den aktiven Katalysatorstellen geleitet wird, um Transportbegrenzungen zu vermeiden.

Bei der Implementierung im Endsystem zielt das vorgeschlagene Konzept darauf ab, eine Faraday-Effizienz von nahezu 85 % für die Umwandlung von CO<sub>2</sub> zu CH<sub>4</sub> zu erreichen, mit einer Stabilität von mehr als 100 Stunden, während eine Stromdichte von über 100 mA/cm<sup>2</sup> beibehalten wird.

## Abstract

The electrocatalytic CO<sub>2</sub> reduction reaction (CO<sub>2</sub>RR) is the most promising route for CO<sub>2</sub> utilization, due to its efficiency, versatility, scalability and compatibility with renewable energies. BEES-4-CO<sub>2</sub>RR develops efficient, sustainable and up-scalable catalytic electrodes, inspired from nature and integrated in a scalable flow reactor, for the efficient CO<sub>2</sub>RR to CH<sub>4</sub> and other hydrocarbons. The technical innovations proposed in the project will have a broad impact for the energy and chemical industries.

At the center of the proposed concept is the development of novel, porous, catalytic materials on gas diffusion electrodes (GDEs), combining sputtered Cu and Cu-Zn-alloy catalysts with multifunctional, bio-inspired poly-ionic liquid structures, specially engineered and produced using nano imprint lithography (NIL). These innovative electrodes pack numerous critical functionalities to boost CO<sub>2</sub>RR performance. These are:

(i) (Super)hydrophilicity combined with (super)aerophobicity of the novel active material surface, through the bio-inspired structuration. This guarantees optimal wetting of the catalyst with the electrolyte and fast release of the formed gaseous products, to free the catalytic sites for further reactions, boosting activity and current stability.

(ii) Enhanced catalytic properties, through the implementation of selective Cu-Zn-alloy metal catalysts, combined with imidazolium functionalization of the polymer, which activates the solubilized CO<sub>2</sub>, thus improving the process at the triple-phase boundary and increasing the amount of CO<sub>2</sub> interacting with the catalyst.

(iii) Hydrophobicity of the supporting porous substrate thus avoiding the so-called "flooding" of the electrode with the electrolyte. The use of porous, non-fluorinated polymer foils as a substrate, instead of the more common carbonaceous GDE, is anticipated to have such a beneficial effect, leading to long-term stability.

(iv) Enhanced electrical conductivity of the electrode. Apart from using highly conducting metal catalysts, the NIL polymer's conductivity will be boosted with embedded Cu active species and/or Cu islands deposited on the polymer surface, having a net positive impact on the current density and selectivity.

The developed multifunctional electrode: (i) is processed using up-scalable methods of sputtering and NIL, (ii) uses non-CRMs (critical raw materials), without compromising performance, (iii) explores alternatives to fluorinated-polymer porous substrates, (iv) implements an easily up-scalable flow-reactor design where CO<sub>2</sub> is provided to the active catalytic sites via a GDE to avoid the mass transport limitations.

When implemented in the final system, the proposed concept aims to achieve a CO<sub>2</sub>-to-CH<sub>4</sub> faradaic efficiency close to 85% with a stability of more than 100 h, while maintaining a current density of more than 100 mA/cm<sup>2</sup>.

## **Projektkoordinator**

- AIT Austrian Institute of Technology GmbH

## **Projektpartner**

- PROFACTOR GmbH
- Luxinergy GmbH