NanoGreenH2-Pro

Nano-functionalization of Photoactive Materials for High-Efficient Photoelectrochemical Green Hydrogen Production

Programm / Ausschreibung	Produktion der Zukunft, 38. AS PdZ transnationale Projekte 2020	**Status**	abgeschlossen
Projektstart	01.09.2022	**Projektende**	30.09.2024
Zeitraum	2022 - 2024	**Projektlaufzeit**	25 Monate
Keywords	Water splitting, photoelectrochemistry, nanomaterials, thin film		

Projektbeschreibung

Wasserstoff ist ein aussichtsreicher, emissionsfreier Energieträger, der fossile Brennstoffe ersetzen kann, um den anthropogenen Klimawandel zu verlangsamen. Das derzeitige industrielle Standardverfahren zur Wasserstoffproduktion ist das Dampfreformierungsverfahren von Erdgas. Dieses ist jedoch aus Umweltsicht problematisch, da es massiv CO2 und andere Treibhausgase als Nebenprodukte emittiert und daher sicherlich weit entfernt von einem CO2-neutralen Prozess ist. Im Gegensatz dazu kann Wasserstoffgas auch mit nahezu null Treibhausgasemissionen hergestellt werden, wenn er mittels erneuerbarer Energiequellen und einem photoelektrochemischen (PEC) Wasserspaltungsprozess hergestellt wird. Dabei werden Sonnenlicht und photoaktive Materialien genutzt, um Wasser in H2 und O2 zu spalten.
Besonders attraktiv ist dabei die Verwendung von Materialien, deren Ausgangselemente auf der Erde reichlich vorhanden sind. Vielversprechende Resultate konnten zum Beispiel mit Hämatit (Fe2O3) und Kesterit (Cu2ZnSnS4, CZTS) gezeigt werden. Die Weiterentwicklung von Hämatit- und Kesterit-basierten PEC-Geräten steht jedoch immer noch vor Herausforderungen, wie z. B. eine unpassende Bandausrichtung aufgrund ungeeigneter Materialauswahl, oder Oberflächendefekte, die eine Ladungsträgerrekombination verursachen, oder Photokorrosion, die zu Materialinstabilität in der Prozessumgebung führt. Diese Probleme führen zu niedrigem Photostrom, niedriger Photospannung und schlechter Stabilität von PEC-Zellen, die diese Materialien beinhalten. Dies führt letztendlich zu einer niedrigen Solar-to-Hydrogen (STH)-Effizienz.
NanoGreenH2-Pro ist bestrebt, die oben genannten Materialherausforderungen zu lösen, indem es neuartige photoaktive Materialien/Photoelektrodendesigns vorschlägt. Die zentrale Hypothese dieses Forschungprojektes ist eine Leistungssteigerung von PEC-Zellen durch Funktionalisierung von Hämatit-Photoanoden- und Kesterit-Photokathodenoberflächen mit neuartigen metall-organischen Gerüst (metal organic frameworks, MOFs)-basierten Cokatalysatoren. MOFs können auf einer geeigneten Halbleiter-Photoanode und/oder Photokathode als Co-Katalysatoren wirken, die die O2- und/oder H2-Erzeugungsraten möglicherweise weiter beschleunigen und so zu einer insgesamt höheren STH-Effizienz führen.
NanoGreenH2-Pro setzt sich als Ziel, die Leistung von Hämatit und Kesterit-basierten PEC-Zellen in Richtung 5 % STH-Effizienz zu steigern. Gleichzeitig sollen die Zellen in einem vierstündigen Stabilitätstest weniger als 15 % Photostromreduktion zeigen. Die Hauptaktivität des Projekts wird die Entwicklung neuartiger, photoaktiver

Materialien/Photoelektrodenmaterialien aus Fe2O3 und Cu2ZnSnS4 sein, die mit UiO-, ZiF- und MiL-basierten metallorganische Gerüsten (MOFs) funktionalisiert werden, um ihre Photoreaktionen zu verbessern. Neben der Entwicklung neuartiger Materialien, die die PEC-Zellen und die Steigerung der Wasserspaltungs-STH-Effizienz umfassen, sollen im Rahmen des Projekts synergistische Materialkombination entdeckt werden, die zu einer hocheffizienten PEC-Vorrichtung führen. Um diese Forschungsziele zu erreichen, wird eine bilaterale F&E-Kooperation zwischen der Shanghai University, dem Austrian Institute of Technology und dem PMT Powder Processing eingerichtet.
Die Ergebnisse von NanoGreenH2-Pro werden die Eindämmung des Klimawandels unterstützen, indem eine alternative Technologie zur Dampfreformierung der Wasserstoffgasproduktion angeboten wird. Die Projektaktivität ist auch im Einklang mit dem Ziel Nr. 13 der „Ziele für nachhaltige Entwicklung“ (Sustainable Development Goals, SDG), die darauf abzielen, „dringende Maßnahmen zur Bekämpfung des Klimawandels und seiner Auswirkungen zu ergreifen“. PEC-Wasserspaltung soll die Wasserstoffgas-Wertschöpfungskette schrittweise dekarbonisieren. Darüber hinaus wird erwartet, dass die vorgeschlagenen PEC-Zellen eine nachhaltigere Alternative zu fossilen Brennstoffen durch Erzeugung von grünem Wasserstoff bieten. Wasserstoff als Energieträger spiegelt perfekt das SDG Nr. 7 wider, das fordert, „den Zugang zu bezahlbarer, zuverlässiger, nachhaltiger und moderner Energie für alle sicherzustellen“. Dies wird auch eine konkrete Lösung für eine saubere Energiewende weg von fossilen Energieträgern liefern.

Abstract

Hydrogen is currently envisaged to substitute fossil fuels as zero-emission energy carrier to decelerate antrophogenic climate change. Nonetheless, the problem associated with current production of hydrogen, is the use of the steam reforming process of natural gas which emits CO2 or other greenhouse gases as side products. This certainly lies the hydrogen production far from a carbon-neutral process. On the contrary, the hydrogen gas can also be produced with near-zero greenhouse gas emissions utilizing renewable energy sources of solar power, through photoelectrochemical (PEC) water splitting process that utilizes sunlight and photoactive materials to reduce water into H2 and O2 gases.
Earth-abundant materials, such as hematite Fe2O3 and kesterite Cu2ZnSnS4 (CZTS), have been reported to deliver promising performance for providing H2 production through PEC water splitting route. The advancement of hematite and kesterite-based PEC device, however, still faces challenges of, for instance, improper band alignment due to inappropriate material selection, surface defects that cause charge carrier recombination, photocorrosion that leads to material instability under process environment. These challenges bring consequences on the poor PEC water splitting device performance, in terms of low photocurrent, low photovoltage and poor device stability that ultimately leads to low Solar-to-Hydrogen (STH) efficiency.
NanoGreenH2-Pro strives to address the aforementioned material challenges by proposing novel photoactive materials/ photoelectrodes design. The central hypothesize of this proposal is an increase of PEC device performance through functionalization of hematite photoanode and kesterite photocathode surfaces with novel Metal-Organic Frameworks (MOFs)-based co-catalysts. MOFs on appropriate semiconductor photoanode and/or photocathode can act as co-catalysts that potentially further accelerate the O2 and/or H2 evolution reaction, resulting overall higher STH efficiency.
In this regards, NanoGreenH2-Pro sets its ultimate goal to boost the earth-abundant PEC device performance towards 5% STH efficiency with less than 15% photocurrent reduction under four hours stability test. The project main activity will be the designing novel earth-abundant photoactive/photoelectrodes materials of Fe2O3 and Cu2ZnSnS4, functionalized by UiO, ZiF and MiL-based Metal-Organic Frameworks (MOFs) for enhancing their photoresponses. Apart from the development of novel materials encompassing the PEC water splitting device and the improvement of water splitting STH efficiency, the project is also expected to unveil the impacts of synergistic material combination that lead to high-efficient PEC device. A bilateral

R&D is established between Shanghai University, Austrian Institute of Technology, PMT Powder Processing to pursue this research direction.
The outcomes of the NanoGreenH2-Pro will reinforce the climate change mitigation by offering an alternative technology to steam reforming hydrogen gas production. The project activity also represents Sustainable Development Goals (SDG) No. 13 aiming to “take urgent action to combat climate change and its impact”. This PEC water splitting is foreseen to decarbonize the hydrogen gas value chain gradually. Moreover, the hydrogen gas from the proposed zero-emission PEC water splitting device is expected to produce an alternative energy carrier to fossil fuel in a form of (green) hydrogen which is more sustainable. The hydrogen as energy carrier perfectly reflects SDG No. 7, calling to ”ensure access to affordable, reliable, sustainable and modern energy for all”. This will also deliver a concrete solution to a clean energy transition away from fossil.

Projektkoordinator

- AIT Austrian Institute of Technology GmbH

Projektpartner

- PMT Powder Processing GmbH