

# COALYSE

Combinatorial thin film alloys for water electrolysis

|                                 |                                                                                                             |                        |            |
|---------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|------------|
| <b>Programm / Ausschreibung</b> | EW 24/26, FTI-Fokusinitiativen, Energieforschung<br>2024 FTI -Fokusinitiativen                              | <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>                 | water electrolysis, oxygen evolution, combinatorial thin films, magetron sputtering, high throuput analysis |                        |            |

## Projektbeschreibung

Fortschrittliche Technologien zur Wasserelektrolyse sind ein vielversprechender Ansatz zur Erzeugung erneuerbarer Energiequellen und zur Reduzierung des schädlichen Verbrauchs fossiler Brennstoffe. Die Wasserelektrolyse weist eine hervorragende Umweltbilanz auf, da der benötigte Strom leicht aus erneuerbaren Quellen (Photovoltaik, Wind) gewonnen werden kann.

Das zentrale Element der Wasserelektrolyseanlage ist ein metallisches Gitter, das mit dem Elektrodenmaterial beschichtet ist. Typischerweise bestehen die Elektroden aus binären oder ternären Legierungen auf Nickelbasis. Die elektrochemische Umwandlung von  $H_2O$  in  $H_2$  und  $O_2$  findet an der Oberfläche dieser Elektroden statt. Die chemische Zusammensetzung, der Aufbau und die Stabilität der Elektrode sind entscheidende Kriterien für die Effizienz der Wasserelektrolyse.

Das Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung neuer Dünnschicht-Legierungen, die 3 bis 5 chemische Elemente enthalten und eine verbesserte katalytische Leistung aufweisen, durch Hochdurchsatz-Synthese und -charakterisierung. Durch die Anwendung eines kombinatorischen Sputteransatzes mit einer vordefinierten Maske können homogene Dünnschichtlegierungen über einen weiten Bereich chemischer Zusammensetzungen hergestellt werden. Aufgrund der einzigartigen Prozessbedingungen werden repräsentative Phasendiagramme und Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen entwickelt und in Werkstoffbibliotheken zusammengefasst. Dies stellt ein völlig neues Anwendungsfeld für die kombinatorische Dünnschichttechnologie dar und wäre ein wichtiger Schritt für die Entwicklung und kommerzielle Anwendung der Wasserelektrolyse.

Die entwickelten Dünnschichtlegierungen werden für die Herstellung innovativer mesoporöser Elektroden verwendet und für die elektrochemische Wasserspaltung getestet. Die geplante Elektrode soll durch die Kombination von optimaler chemischer Legierungszusammensetzung und optimaler Morphologie maximale Leistung und Stabilität aufweisen. Es wird erwartet, dass der Hochdurchsatz-Ansatz eine schnellere Identifizierung der optimalen Legierungszusammensetzung im Vergleich zur konventionellen Metallurgie, dem derzeitigen Stand der Technik, ermöglicht und dass diese neuartigen Multielement-Legierungen im Vergleich zu den bestehenden Zusammensetzungen höhere Produktausbeuten und Wirkungsgrade

ermöglichen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das geplante Projekt eine zeit- und ressourceneffiziente Entwicklung neuartiger Elektrodenmaterialien ermöglicht, was zu neuen Elektrodendesigns für die Wasserspaltung mit geringeren Kosten für Entwicklung und industrielle Produktion führt. Dies ist entscheidend, um die industrielle Anwendung dieser vielversprechenden Reaktion zu erleichtern.

## **Abstract**

Advanced Water Splitting Technologies are a promising approach to generate renewable energy sources and reduce harmful consumption of fossil fuels. This process has an excellent environmental balance, as the necessary electricity can be easily provided by renewable sources (photovoltaics, wind)

The central element for the water electrolysis setup is a metallic mesh that is decorated with the electrode material. Typically, electrodes are based on binary or ternary Ni alloys. The electrochemical conversion of H<sub>2</sub>O into the H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> is taking place on the surface of these electrodes. The chemical composition, structure and stability of the electrode are decisive criteria for the efficiency of the overall water electrolysis.

The goal of this project is the development of novel thin film alloys containing 3-5 chemical elements that exhibit improved catalytic performance through high throughput synthesis and characterisation. By applying a combinatorial sputter approach with a pre-defined mask, homogeneous thin film alloys can be created over a large range of chemical compositions. Due to the unique processing conditions, representative phase diagrams and structure-reactivity relationships shall be developed and summarized in materials libraries. This is a completely novel application field for the combinatorial thin film technology and would be a significant step forward for the development and commercial application of water electrolysis.

The developed thin film alloys will be utilized for the manufacturing of innovative mesoporous electrodes and tested for electrochemical water splitting. The envisioned electrode shall have maximum performance and stability through combining both, the optimized chemical alloy composition and the optimum morphology. It is expected that the high-throughput approach will allow faster identification of optimal alloy compositions compared to conventional metallurgy, which is the current state of the art, and that these novel, multi-element alloys enable higher product yields and efficiencies in water electrolysis, compared to existing compositions.

Concludingly, the planned project enables the time and resource-efficient development of novel electrode materials, resulting in electrode designs for water splitting with lower costs for development and industrial production. This is crucial to facilitate the industrial application of this highly promising reaction.

## **Projektkoordinator**

- Montanuniversität Leoben Department Werkstoffwissenschaft

## **Projektpartner**

- Montanuniversität Leoben Lehrstuhl für Funktionale Werkstoffe und Werkstoffsysteme
- Technische Universität Wien Institut für Angewandte Physik
- voestalpine Stahl GmbH