

Energieforschungsprogramm

Präsentation des Projektes auf der KLI.EN Homepage /

publizierbare Kurzfassung / publizierbarer Zwischenbericht

Titel des Projekts	<i>Mat4Wasserstoff</i> Materialien für die effiziente Wasserstoffproduktion durch Kopplung von Elektrokatalyse und Plasmonik
Synopsis	Mat4Wasserstoff Projekt 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. Somit ist unsere Prämisse, die Oberflächenplasmonenreaktion mit der Elektrokatalyse zu verbinden, um einen effizienteren Katalysator für die Sauerstoffreduktionsreaktion (ORR) zu erhalten, erreicht. Die ORR als elektrokatalytische Reduktion von Sauerstoff zu Wasser an der Kathode ist ein wichtiger Schritt in verschiedenen elektrochemischen Prozessen, darunter Brennstoffzellen und elektrochemische CO ₂ -Reduktionsreaktionen.
Kurzfassung / Abstract	Mat4Wasserstoff greift das aufstrebende Thema der Wasserstofftechnologie auf und konzentriert sich auf die Entwicklung neuartiger Materialien und deren Optimierung für die hocheffiziente photoelektrochemische Produktion (PEC) von Wasserstoff. Um dieses Ziel zu erreichen, wird ein multidisziplinäres Team aus erfahrenen Forschern mit internationaler Sichtbarkeit und ausgewiesener Expertise auf diesem Gebiet gebildet. Das Konsortium besteht aus Partnern aus verschiedenen komplementären Forschungsbereichen ohne Überschneidungen. Die MUL und das ESI Leoben sind die führenden österreichischen Institutionen auf dem Gebiet der Materialwissenschaften. Der tschechische Partner (Masaryk Universität) bringt seine tiefgehende Expertise auf dem Gebiet der Plasmaerzeugung und deren Anwendung für die Modifikation von Materialoberflächen ein, während das PCCL als führendes nationales Polymerzentrum internationale Anerkennung auf dem Gebiet der funktionellen Polymermaterialien erlangt hat. Mat4Wasserstoff widmet sich der anspruchsvollen Aufgabe stabiler und effizienter PEC-Materialien, indem es eine neue Plattform für die Synthese nachhaltiger Photokatalysatoren entwickelt, die unter simulierter Bestrahlung durch Kopplung von Oberflächenplasmonenresonanz und Elektrokatalyse effizient Wasser spalten. Der Prozess des Elektrosplinnens wurde zur Herstellung von Nanofaserpolymeren verwendet, die gegenüber anderen Synthesemethoden erhebliche Vorteile bieten, darunter Kosteneffizienz, Skalierbarkeit und technische Vielseitigkeit. Um den

	vollen Nutzen aus den erhaltenen Strukturen mit hohem Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis zu ziehen, wurde eine thermische Behandlung durchgeführt, um karbonisierte Strukturen mit besseren mechanischen Eigenschaften zu erhalten. Wir demonstrieren die Neuartigkeit des Projekts durch die Verwendung innovativer Syntheseansätze (plasmagestütztes Elektrosponnen), die unsere Studie über den Einfluss der thermischen Behandlung von PAN-Lösungen mit zugesetzten Katalysatoren auf die chemischen und morphologischen Eigenschaften von elektrogesponnenen Nanofasern auszeichnet. Unsere umfassende Studie legt sogar neue chemische Mechanismen in der Polymerfaser nahe, die während des Elektrosponnens induziert werden. Wir sind der Meinung, dass diese Ergebnisse für industrielle Anwendungen von großer Bedeutung sind, da 90 % der derzeitigen Faserproduktion auf Polymeren basiert, die aus PAN hergestellt werden, wie das in unserer Studie verwendete Polymer. Durch den Einsatz der In-situ-TEM-Charakterisierungsmethode führen wir neue Aspekte bei der Charakterisierung von Polymerfasern ein, indem wir eine direkte Korrelation zwischen den gemessenen elektrischen Eigenschaften und der atomaren Struktur herstellen. Die weiteren Aussichten dieser Methode zur Optimierung der Elektrodenstruktur sind Gegenstand der aktuellen Studie. Der Prozess der photoelektrochemischen Wasserspaltung basiert auf Wasser als Rohstoff zur Erzeugung von Wasserstoff aus Sonnenenergie. Die angestrebte Effizienz für die Wasserstoffproduktion auf elektrogesponnenen Hybridmatten mit in das Polymer eingebettetem TiO_2 und Cu/CuO wird auch nach der Karbonisierung nicht erreicht. Unsere ausführlichen Studien zeigen jedoch ein enormes Potenzial für die Verstärkung der Sauerstoffreduktionsreaktion auf Ag/Pd-funktionalisierten karbonisierten Polymermatten nach Beleuchtung. Somit ist unsere Prämisse, die Oberflächenplasmonenreaktion mit der Elektrokatalyse zu verbinden, um einen effizienteren Katalysator für die Sauerstoffreduktionsreaktion (ORR) zu erhalten, erreicht. Die ORR als elektrokatalytische Reduktion von Sauerstoff zu Wasser an der Kathode ist ein wichtiger Schritt in verschiedenen elektrochemischen Prozessen, darunter Brennstoffzellen und elektrochemische CO_2-Reduktionsreaktionen. Weitere Arbeiten zur Integration von ORR-Studien in die Charakterisierung von Elektrokatalysatoren für CO_2RR und Wasserspaltung werden ein umfassendes Verständnis der elektrokatalytischen Prozesse bei der Umwandlung von CO_2 und Wasser in wertvolle Produkte und sauberen Wasserstoff ermöglichen. Durch die gezielte Optimierung von Kathodenmaterialien können wir Aktivität, Selektivität und Stabilität verbessern, was wiederum zu einer höheren Effizienz und Wirtschaftlichkeit der Gesamtreaktionen führt. Wir haben die TRL-Stufe 3 erreicht, und in weiteren grundlegenden Studien wird der Effekt der Kopplung mit der Elektrolyse untersucht, was Einblicke in das Zusammenspiel zwischen lichtinduzierten Phänomenen und elektrochemischen Reaktionen ermöglichen wird. Darüber hinaus entwickeln wir eine Methode zur Synthese freistehender, flexibler Elektroden aus PAN/PANI-Polymeren, die in Kombination mit einem Katalysator auf Cu-Basis für die CO_2-
--	--

Energieforschungsprogramm - 8. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

	Reduktionsreaktion eine der höchsten Faradaischen-Wirkungsgrade für die Ethylenproduktion erzielen. Damit erforscht Mat4Wasserstoff Wege zur Herstellung weiterer chemischer Zusatzstoffe wie Ethylen und trägt sogar zu einer effizienten CO₂-Kreislaufwirtschaft bei, indem es die CO₂-Nutzung angeht und Gasdiffusionselektroden entwickelt. In diesem Zusammenhang trägt Mat4Wasserstoff zu den Programmen bei, die die österreichische Regierung im Rahmen des EU Green Deal gestartet hat, um bis 2040 Klimaneutralität zu erreichen und bis 2030 auf Energie aus erneuerbaren Quellen umzustellen. Wir gehen auch davon aus, dass dieser wirtschaftliche Syntheseweg zur Herstellung von Materialien mit hervorragender Leistung auf großes Interesse stoßen wird, da er mit den Nachhaltigkeitszielen SDG 7, Erschwingliche und saubere Energie, und SDG 13, Klimaschutz durch die Entwicklung von Elektroden für zukünftige saubere Energie, in Einklang steht. Und schließlich stärkt dieses Projekt Frauen in Führungspositionen, was mit dem SDG 5 "Gleichstellung der Geschlechter" in Einklang steht.
Projektleiter	<i>Dr. Lidija Rafailovic</i>
Institut / Unternehmen	<i>Montanuniversität Leoben, Department Werkstoffwissenschaft, Lehrstuhl für Materialphysik</i>
Kontaktadresse	<i>Jahnstraße 12/I, 8700 Leoben, Österreich</i> <i>Tel: +43 3842 804 208</i> <i>e-mail: lidija.rafailovic@unileoben.ac.at</i> <i>https://www.oeaw.ac.at/esi/erich-schmid-institute</i>
Auflistung der weiteren Projekt- bzw. Kooperationspartner	<i>Erich-Schmid-Institut für Materialwissenschaft der Österreichischen Akademie der Wissenschaften</i> <i>Masaryk University, Faculty of Science, Department of Physical Electronics</i> <i>Polymer Competence Center Leoben GmbH (PCCL)</i>
Project Title	<i>Mat4Hydrogen</i> <i>Materials for efficient hydrogen production by coupling electrocatalysis and plasmonics</i>
Synopsis	Mat4Hydrogen project 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. Mat4Hydrogen project 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. Our premise of combining the surface plasmon reaction with electrocatalysis to obtain a more efficient catalyst for the oxygen reduction reaction (ORR) has been

	achieved. ORR as the electrocatalytic reduction of oxygen to water at the cathode is an important step in various electrochemical processes, including fuel cells and electrochemical CO₂ reduction reactions.
Summary / Abstract	Mat4Wasserstoff tackles the 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. 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 as a prominent national polymer center has gained international recognition in the field of functional polymer materials. Mat4Wasserstoff addresses 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 was used to produce nanofiber polymers, which offer significant advantages over other synthesis methods, including cost efficiency, scalability, and technical versatility. To fully benefit from obtained high surface to volume structures, the thermal treatment was carried out to yield carbonized structures with better mechanical stability and electrical conductivity, as a prerequisite for development of efficient electrocatalysts. We demonstrate the novelty of the project by employing innovative synthesis approaches, such as plasma-assisted electrospinning, to investigate the effects of thermal treatment on PAN solutions with added catalysts on the chemical and morphological properties of electrospun nanofibers. Our comprehensive study even suggests novel chemical mechanism in the polymer fiber induced during electrospinning. We believe that these results are of high importance for industrial applications considering that 90% of current fiber productions relies on polymer produced from PAN, as polymer used in our study. By employing in situ TEM characterization method, we introduce novel aspects in characterization of polymer fibers by direct correlation of the measured electrical properties with the atomic structure. The further prospects of this method for electrode structure optimization are matter of current study. The process of photoelectrochemical water splitting, relies on water as a raw material to produce hydrogen from solar energy. The envisioned efficiency for hydrogen production on electrospun hybrid mats with embedded TiO₂ and Cu/CuO into the polymer is not reached, even after carbonization. However, our extended studies show enormous potential for enhancement of oxygen reduction reaction on Ag/Pd functionalized carbonized polymer mats upon illumination. Thus, our premise of coupling surface plasmon response with electrocatalysis to yield more efficient catalyst is reached for

	oxygen reduction reaction-ORR. ORR as the electrocatalytic reduction of oxygen to water at the cathode is a critical step in various electrochemical processes, including fuel cells and electrochemical CO₂ reduction reactions. Further work on integration of ORR studies into the characterization of electrocatalysts for CO₂RR and water splitting will provide a comprehensive understanding of the electrocatalytic processes involved in the conversion of CO₂ and water into valuable products and clean hydrogen. Through the targeted optimization of cathode materials, we can improve activity, selectivity and stability, which in turn leads to higher efficiency and economy of the overall reactions. We achieved the TRL 3 level and further fundamental studies explores the effect of coupling with electrolysis, which will provide insights in the interplay between light induced phenomena and electrochemical reactions. Furthermore, we develop a method for synthesis of free - standing, flexible electrode made of PAN/PANI polymers, that in combination with Cu based catalyst yields for CO₂ reduction reaction one of the highest Faradaic efficiencies towards ethylene production. Thus, Mat4Wassrestoff explores routes for production of more added chemicals as ethylene and contributes even to efficient CO₂ cycle economy by tackling CO₂ utilization and developing gas diffusion electrodes. In this context, Mat4Wasserstoff contributes to the programs launched by Austrian government as a commitment to the EU Green Deal to achieve climate neutrality by 2040 and switch to energy from renewable sources by 2030. Also, we anticipate that these economical synthesis route to deliver materials with outstanding performances will attract significant interest, aligning with the sustainability goals SDG 7, Affordable and clean energy and SDG 13, Climate action by development of electrodes for future clean energy. Finally, this project empowers women in leadership positions aligning with the Gender equality SDG 5.
Projekt manager	<i>Dr. Lidija Rafailovic</i>
Institute / Company	<i>University of Leoben, Department of Materials Science, Chair of Materials Physics</i>
Contact address	<i>Jahnstrasse 12/I, 8700 Leoben, Austria</i> <i>Tel: +43 3842 804 208</i> <i>e-mail: lidija.rafailovic@unileoben.ac.at</i> <i>https://www.oeaw.ac.at/esi/erich-schmid-institute</i>
Partners of the consortium	<i>Erich Schmid Institute of Materials Science of the Austrian Academy of Sciences</i> <i>Masaryk University, Faculty of Science, Department of Physical Electronics</i> <i>Polymer Competence Center Leoben (PCCL)</i>