

Energieforschungsprogramm

Publizierbarer Endbericht

Programmsteuerung:

Klima- und Energiefonds

Programmabwicklung:

Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft mbH (FFG)

Endbericht

erstellt am

29.05.2026

Projekttitel: Oxygen electrocatalysts from Ni/Fe-based MOFs and alloys by combinatorial material approach

Projektnummer: 44436385

Energieforschungsprogramm - XX. Ausschreibung

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

Ausschreibung	Energieforschungsprogramm – 8. Ausschreibung (Klima- und Energiefonds / FFG)
Projektstart	01/03/2023
Projektende	27/02/2026
Gesamtprojektdauer (in Monaten)	36 Monate
ProjektnehmerIn (Institution)	Assoc. Prof. Jia Min Chin (University of Vienna)
AnsprechpartnerIn	Assoc. Prof. Jia Min Chin
Postadresse	Institute of Functional Materials and Catalysis, Faculty of Chemistry, University of Vienna Währinger Str. 42, 1090 Vienna, Austria
Telefon	+43-1-4277-52922
Fax	N/A
E-mail	Jiamin.chin@univie.ac.at
Website	https://bioinspiredmateria.wixsite.com/group/about-us

OxyCAT: Oxygen electrocatalysts from Ni/Fe-based MOFs and alloys by combinatorial material approach

AutorInnen:

Prof. Jia Min Chin (Uni Wien), Prof. Michael R. Reithofer (Uni Wien), Dr. Rachmat Adhi Wibowo (AIT), Dr. Constantin Eisen (Uni Wien)

1 Inhaltsverzeichnis

1	Inhaltsverzeichnis	4
2	Einleitung	5
3	Inhaltliche Darstellung	8
3.1	Projektmanagement und Konsortialstruktur (AP 1)	8
3.2	Kombinatorische Materialentwicklung und Legierungsbibliotheken (AP 2 & AP 3)	8
3.2.1	Elektrochemische Abscheidung (CED) und Gradientenpräparation	9
3.2.2	Hochdurchsatz-Screening	9
3.3	Synthese und Strukturkontrolle MOF-basierter Elektrokatalysatoren (AP 4)	9
3.3.1	Solvothermale Synthese und Morphologiekontrolle	9
3.3.2	In-situ Synthese auf dreidimensionalen Substraten	9
3.3.3	Nanopartikel-MOF-Verbundsysteme und Plasmabehandlung	10
3.4	Orientierte elektrophoretische Abscheidung (EPD) (AP 4)	10
3.5	Analytik und elektrochemische Leistungsbewertung (AP 5)	10
3.5.1	Materialanalytische Charakterisierung	10
3.5.2	Elektrochemische Charakterisierung und Störungsanalyse	11
3.6	Systemintegration und Validierung (AP 5)	11
4	Ergebnisse und Schlussfolgerungen	11
4.1	Kombinatorische Abscheidung und Aktivitätsmapping (AP 2 & AP 3)	12
4.2	Hocheffiziente OER-Anodenkatalysatoren auf Nickelschaum (AP 4 & AP 5)	12
4.2.1	Elektrochemische Leistungsdaten	12
4.3	Plasma-assistierte Aktivierung und der strategische HER-Shift (AP 4)	12
4.4	Orientierte elektrophoretische Abscheidung und Blasenmanagement (AP 4 & AP 5)	13
4.5	Topologische Datenanalyse und Struktur-Leistungs-Link	13
4.6	Methodischer Kompetenzaufbau und Wissenstransfer	14
5	Ausblick und Empfehlungen	14
5.1	4.1 Skalierung und Erhöhung des Reifegrades (TRL-Uplift)	14
5.2	Systemintegration und Membran-Elektroden-Einheit (MEA)	15
5.3	Digitalisierung der Materialentwicklung und datengetriebene Ansätze	15
5.4	Sektorkopplung und Technologietransfer	15
6	Literaturverzeichnis	Fehler! Textmarke nicht definiert.
7	Anhang	Fehler! Textmarke nicht definiert.
8	Kontaktdaten	16

2 Einleitung

Das Projekt OxyCAT („Oxygen electrocatalysts from Ni/Fe-based MOFs and alloys by combinatorial material approach“, Projektnummer: 44436385) adressiert die Entwicklung hocheffizienter, kostengünstiger und langlebiger Elektrokatalysatoren für die Anionenaustauschmembran-Wasserelektrolyse (AEMWE) zur Erzeugung von grünem Wasserstoff. Im Mittelpunkt stand die Entwicklung und Untersuchung von nicht auf Platingruppenmetallen (PGM-frei) basierenden Übergangsmetall-Katalysatoren, insbesondere auf Basis von Nickel (Ni), und Eisen (Fe). Ziel war es, die hohen Materialkosten konventioneller Elektrolysesysteme (wie der Protonenaustauschmembran-Elektrolyse, PEMWE, welche auf teure Edelmetalle wie Ir, Ru und Pt angewiesen ist) drastisch zu reduzieren und gleichzeitig die Kinetik der Sauerstoffentwicklungsreaktion durch die Optimierung der elektrochemischen Leistung und Stabilität der Anodenmaterialien zu maximieren.

OxyCAT

“Oxygen electrocatalysts from Ni/Fe-based MOFs and alloys using a combinatorial materials approach”

“Entwicklung hocheffizienter, kostengünstiger und langlebiger Sauerstoff-Elektrokatalysatoren für die Wasserstoffelektrolyse mit Anionenaustauschmembranen (AEMWE) zur Erzeugung von grünem Wasserstoff”.

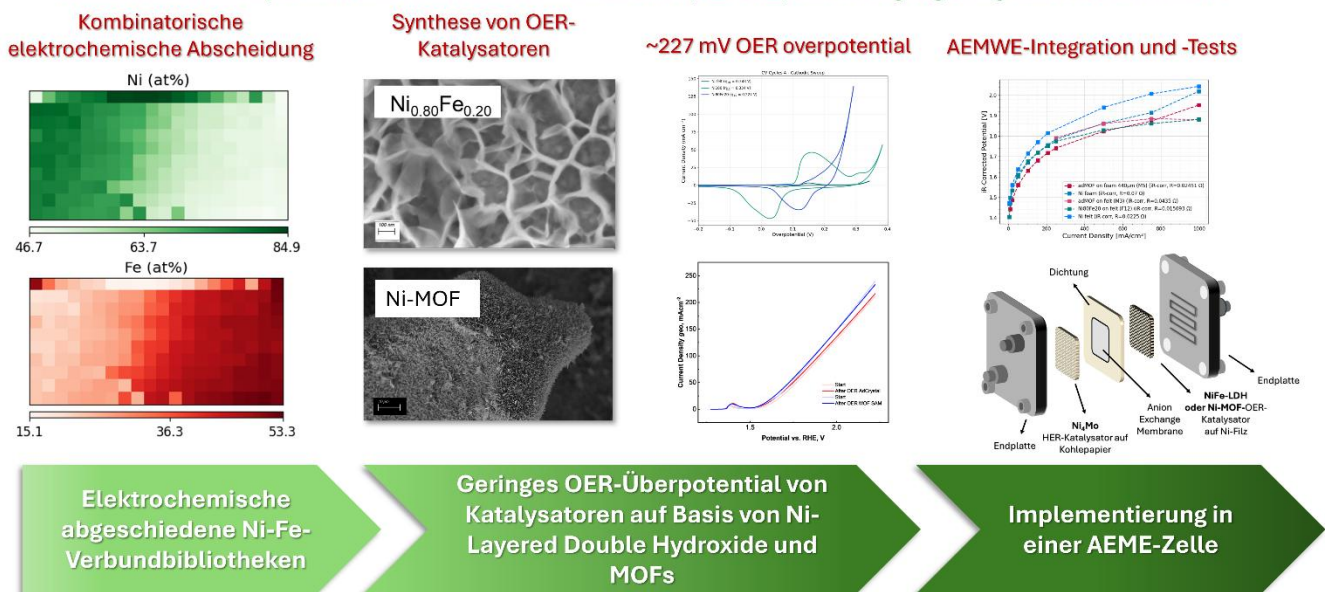


Figure 1. Übersicht des Arbeitsprogramms von OxyCAT.

2.1 Aufgabenstellung

Die zentrale Aufgabenstellung des Projekts bestand darin, grundlegende Struktur-Eigenschafts-Beziehungen von Ni- und Fe-basierten Legierungen, geschichteten Doppelhydroxiden (LDHs) und metallorganischen Gerüstverbindungen (MOFs) systematisch zu entschlüsseln und daraus universelle Designprinzipien für katalytische Elektroden abzuleiten.

Dabei lag der Fokus ursprünglich auf der Kontrolle von Zusammensetzung, Morphologie, Orientierung, Benetzbarkeit und Blasenablösung an den Elektrodenoberflächen, um Stofftransportprozesse sowie die

elektrochemische Aktivität der Sauerstoffentwicklungsreaktion (OER) gezielt zu verbessern. Im Zuge der Projektumsetzung wurde die Aufgabenstellung erfolgreich erweitert: Neben der OER-Optimierung an der Anode rückte die plasmaunterstützte Oberflächenmodifikation von Mn-basierten MOFs für die Wasserstoffentwicklungsreaktion (HER) an der Kathode in den Fokus, um ein tieferes Verständnis der bifunktionellen Elektrokatalyse in alkalischen Medien zu erlangen. Darüber hinaus sollte eine kombinatorische Hochdurchsatzstrategie etabliert werden, um Bibliotheken von Übergangsmetall-Legierungen und darauf aufbauenden MOF-Katalysatoren effizient herzustellen, mittels elektrochemischen Mappings zu evaluieren und direkt in funktionale AEMWE-Zellen zu integrieren.

2.2 Schwerpunkte des Projektes

Die wissenschaftlichen und technologischen Schwerpunkte von OxyCAT gliederten sich in vier zentrale, komplementäre Themenbereiche:

Kombinatorische elektrochemische Abscheidung (CED): Entwicklung und Etablierung einer Hochdurchsatzmethode zur kontrollierten, elektrochemischen Abscheidung räumlich abgestufter Ni-M-Legierungssysteme (M = z.B. Fe, Co) mit kontinuierlichen Zusammensetzungsgradienten auf planaren Substraten zur beschleunigten Synthese und Katalysatoroptimierung.

Strukturierte und Morphologie-kontrollierte MOF-Elektrokatalysatoren: solvothermische Synthese sowie direkte in-situ-Präparierung von NiFe- und Mn-basierten MOFs auf hochporösen Nickelschaum-Substraten (Ni foam). Dies diente der Maximierung der elektrochemisch aktiven Oberfläche (ECSA) sowie der Verbesserung der mechanischen Bindung und des Elektronentransports zwischen Katalysator und Stromsammler.

Orientierte elektrophoretische Abscheidung (EPD) und Oberflächentechnik: Entwicklung neuartiger Abscheidungsverfahren zur kontrollierten Ausrichtung und Orientierung anisotroper MOF-Partikel auf Elektrodenoberflächen mittels elektrischer Wechselfelder. Parallel dazu stand die Einführung der Plasmabehandlung (Defekt-Engineering) zur gezielten Modifikation der Oberflächenbenetzbarkeit, zur Erleichterung der Gasblasenablösung und zur Freilegung koordinativ ungesättigter Metallzentren im Fokus.

Elektrochemische Leistungsbewertung und Systemintegration: Systematische Untersuchung des Einflusses von chemischer Zusammensetzung, Nanostrukturierung und Benetzungsverhalten auf die OER- und HER-Kinetik sowie Langzeitstabilität unter realitätsnahen AEMWE-Bedingungen.

2.3 Einordnung in das Programm

Das Projekt OxyCAT wurde im Rahmen der 8. Ausschreibung des FFG-„Energieforschungsprogramms“ durchgeführt. Es adressiert direkt die Kernziele der österreichischen Wasserstoffstrategie sowie des europäischen „Green Deals“ zur Dekarbonisierung der Industrie und des schweren Transportwesens.

Durch den vollständigen Verzicht auf kritische, versorgungsriskante Rohstoffe (z.B. Iridium) leistet OxyCAT einen signifikanten Beitrag zur Reduktion technologischer Abhängigkeiten und zur Senkung der Investitionskosten (CAPEX) zukünftiger Multi-Megawatt-Elektrolyseure. Die Arbeiten verknüpfen grundlegende, koordinationschemische und elektrochemische Grundlagenforschung der Universität Wien mit der anwendungsorientierten Material- und Bauteilkompetenz des AIT Austrian Institute of Technology. Damit treibt das Projekt die Reifung der AEM-Wasserelektrolyse als hocheffiziente, kostengünstige Alternative zur etablierten alkalischen Elektrolyse und PEM-Elektrolyse-Technologie voran.

2.4 Verwendete Methoden

Zur Erreichung der Projektziele wurde ein interdisziplinäres Methodenspektrum aus der kombinatorischen Elektrochemie, der präparativen Nanochemie und der fortgeschrittenen Oberflächenanalytik eingesetzt:

Präparation und Synthese: Kombinatorische elektrochemische Abscheidung (CED) in modifizierten Multi-Elektroden-Systemen (u.a. unter Nutzung von Geometrien analog zu Hull-Zellen zur kontrollierten Gradientenbildung); solvothermische und in-situ lösungsmittelbasierte Synthese von MOF-Architekturen auf dreidimensionalen Nickelschäumen; kontrollierte elektrophoretische Abscheidung (EPD) im elektrischen Feld; Niederdruck-Plasmabehandlungen zur Oberflächenaktivierung.

Physikalische und Strukturelle Charakterisierung: Rasterkraftmikroskop (AFM), Feldemissions-Rasterelektronenmikroskopie (FE-SEM) gekoppelt mit energiedispersiver Röntgenspektroskopie (EDX) zur morphologischen und elementaren Kartierung; Pulverröntgendiffraktometrie (PXRD) und Grazing-Incidence XRD (GI-XRD) zur Phasenanalyse; Transmissionselektronenmikroskopie (TEM); konfokale Raman-Mikrospektroskopie und Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FT-IR) zur Verfolgung von Strukturveränderungen; Gasphysisorption (BET) zur Bestimmung der spezifischen Oberfläche und Porosität; dynamische Kontaktwinkelmessungen zur Evaluierung der Aerophobizität/Hydrophilie.

Elektrochemische Analytik: Hochdurchsatz-Aktivitätsmapping mittels Mehrkanal-Potentiostaten; standardisierte Drei-Elektroden-Messungen (zyklische Voltammetrie (CV), lineare Sweep-Voltammetrie (LSV)) zur Bestimmung von Überpotenzialen und Tafel-Steigungen; elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) zur Separation von Ladungstransfer- und Transportwiderständen; Chronopotentiometrie (CP) und Chronoamperometrie (CA) zur Prüfung der thermodynamischen Langzeitstabilität.

2.5 Aufbau der Arbeit

Der vorliegende Endbericht dokumentiert die Ergebnisse entlang der miteinander verzahnten Arbeitspakete (AP) des Konsortiums.

Es beschreibt die detaillierte inhaltliche Durchführung, gegliedert nach dem Projektmanagement (AP1), der kombinatorischen Materialentwicklung und dem Hochdurchsatz-Screening der Ni-basierten Legierungskatalysatoren (AP2 & AP3) sowie der Synthese, plasmagestützten Modifikation und orientierten Abscheidung von MOF-Strukturen auf dreidimensionalen Trägern (AP4). Kapitel 3 widmet sich der umfassenden Darstellung der Ergebnisse, den erreichten Meilensteinen und den abgeleiteten Struktur-Leistungs-Prinzipien für die OER und HER sowie der Integration in AEM-relevante Testzellen (AP5). Das vierte Kapitel fasst die wissenschaftliche und wirtschaftliche Verwertung (AP6), den Wissenstransfer (Publikationen, Qualifizierungsarbeiten) sowie strategische Empfehlungen für Anschlussaktivitäten zusammen, gefolgt vom Literatur- und Kontaktdatenverzeichnis.

3 Inhaltliche Darstellung

Die inhaltliche und experimentelle Durchführung des Projekts OxyCAT gliederte sich in sechs eng miteinander verzahnte Arbeitspakete (AP), die im Berichtszeitraum erfolgreich bearbeitet wurden. Die Arbeiten verknüpften die kombinatorische Materialherstellung, die gezielte Nanostrukturierung von metallorganischen Gerüstverbindungen (MOFs) sowie modernste elektrochemische und physikalische Charakterisierungsmethoden.

3.1 Projektmanagement und Konsortialstruktur (AP 1)

Das Projektmanagement sicherte eine effiziente, zielgerichtete Zusammenarbeit und den kontinuierlichen Material- und Wissenstransfer zwischen den Konsortialpartnern – der Universität Wien und dem Austrian Institute of Technology.

Die Projektkoordination wurde durch zweimonatliche Konsortialtreffen (Projekt-Status-Meetings) realisiert, bei denen experimentelle Fortschritte präsentiert, Probenchargen übergeben und die nächsten Meilensteine koordiniert wurden. Ergänzend erfolgte ein kontinuierlicher Austausch über digitale Kommunikationskanäle und direkte Laborabstimmungen.

3.2 Kombinatorische Materialentwicklung und Legierungsbibliotheken (AP 2 & AP 3)

Ein wesentlicher methodischer Schwerpunkt des Projekts lag auf der Etablierung kombinatorischer elektrochemischer Abscheidungsverfahren (Combinatorial Electrochemical Deposition, CED). Diese dienten der effizienten Herstellung räumlich abgestufter Ni-Legierungsbibliotheken mit verschiedenen Übergangsmetallen auf planaren sowie strukturierten Substraten.

3.2.1 Elektrochemische Abscheidung (CED) und Gradientenpräparation

Für die Synthese der Legierungsbibliotheken wurden multi-binäre Materialsysteme auf Basis von Nickel (Ni) und Eisen (Fe) sowie weiteren Legierungspartnern wie Kobalt (Co), Zinn (Sn), Zink (Zn), und Molybdän (Mo) untersucht. Die Erzeugung kontinuierlicher, räumlicher Zusammensetzungsgradienten auf einzelnen Substraten wurde durch den Einsatz modifizierter Geometrien analog zu Hull-Zellen realisiert. Durch die gezielte Steuerung der primären Stromdichteverteilung in galvanostatischen Mehrelektrodensystemen konnten Schichten erzeugt werden, die über die Substratkoordinate eine systematisch variierende chemische Zusammensetzung aufwiesen. Dies erlaubte es, phasenreine Legierungen sowie intermediäre Mischphasen in einem einzigen präparativen Schritt darzustellen.

3.2.2 Hochdurchsatz-Screening

Die so erhaltenen Materialbibliotheken wurden direkt einem elektrochemischen Hochdurchsatz-Screening (Aktivitäts-Mapping) unterzogen. Mittels automatisiert verfahrbarer Mehrkanal-Potentiostaten wurde die elektrokatalytische Aktivität für die Sauerstoffentwicklungsreaktion (OER) in Abhängigkeit von der lokalen Zusammensetzung orts aufgelöst vermessen. Dadurch konnten optimale stöchiometrische Verhältnisse zwischen Ni und den sekundären Übergangsmetallen identifiziert werden, um als metallische Katalysatorschichten für die nachfolgenden Syntheseschritte zu dienen.

3.3 Synthese und Strukturkontrolle MOF-basierter Elektrokatalysatoren (AP 4)

Parallel zur metallischen Legierungsentwicklung wurden hochporöse metallorganische Gerüstverbindungen (MOFs) als direkt aktive Elektrokatalysatoren oder Vorläuferstrukturen entwickelt.

3.3.1 Solvothermale Synthese und Morphologiekontrolle

Im Fokus standen NiFe- und Ni-TM-MOFs (TM = Mn, Co). Die Synthese erfolgte überwiegend über maßgeschneiderte solvothermale und lösungsmittelbasierte Verfahren. Durch die präzise Kontrolle der Syntheseparameter – insbesondere von Lösungsmittelzusammensetzungen, Reaktionstemperaturen, Vorläuferkonzentrationen und dem Einsatz spezifischer Koordinationsmodulatoren (z. B. Monocarbonsäuren) – konnten Kristallmorphologie, Partikelgröße und Kristallinität gezielt gesteuert werden. Ein besonderes Augenmerk lag auf anisotropen MOF-Strukturen des MIL-53-Typs. Diese weisen eine ausgeprägte Nanostäbchen-Morphologie (Nanorods) auf, welche aufgrund der kurzen Diffusionswege und der hohen Dichte zugänglicher katalytischer Zentren entlang der Kristallachsen theoretisch hervorragende Transporteigenschaften besitzt.

3.3.2 In-situ Synthese auf dreidimensionalen Substraten

Um den inhärent mäßigen elektronischen Leitfähigkeiten von reinen MOF-Pulvern entgegenzuwirken und den Übergangswiderstand zum Stromsammler zu minimieren, wurde im Projektverlauf eine *in-situ*-Synthesestrategie etabliert. Die MOF-Strukturen (sowie analoge geschichtete Doppelhydroxide, NiFe-LDH) wurden hierbei direkt auf hochporösen, dreidimensionalen Nickelschäumen (Ni foam) aufgewachsen. Diese Methode garantierte eine exzellente mechanische Haftung, eliminierte die

Notwendigkeit von isolierenden polymeren Bindemitteln (wie Nafion oder PTFE) und maximierte die elektrochemisch aktive Oberfläche (ECSA).

3.3.3 Nanopartikel-MOF-Verbundsysteme und Plasmabehandlung

Zur synergistischen Leistungssteigerung wurden Nanopartikel-MOF-Komposite entwickelt, bei denen katalytisch aktive Übergangsmetall-Nanopartikel kontrolliert auf den MOF-Strukturen immobilisiert wurden.

Zusätzlich wurde als innovative Methode zur Oberflächenmodifizierung die Niederdruck-Plasmabehandlung (Plasma-assisted activation) eingeführt. Mittels Plasmaätzung konnten Oberflächendefekte (Sauerstofffehlstellen) gezielt in die MOF-Strukturen eingebracht werden. Dies modifizierte nicht nur die elektronische Struktur der katalytischen Zentren (Freilegung koordinativ ungesättigter Metallplätze), sondern verbesserte auch das hydrophile Verhalten der Elektroden im alkalischen Medium fundamental.

3.4 Orientierte elektrophoretische Abscheidung (EPD) (AP 4)

Ein zentrales technologisches Innovationsmerkmal des Projekts stellte die Entwicklung orientierter elektrophoretischer Abscheidungsverfahren (Electrophoretic Deposition, EPD) für kolloidale MOF-Suspensionen dar.

Anisotrope MOF-Partikel (wie die NU-1000 microrods) besitzen aufgrund ihrer Kristallstruktur ein induzierbares elektrisches Dipolmoment. Unter Ausnutzung von asymmetrischen elektrischen Wechselfeldern (AC-Feldern) hoher Frequenz wurden die Partikel in der Suspension gezielt entlang der Feldlinien ausgerichtet und simultan mittels eines überlagerten Gleichspannungsanteils (DC-Offset) auf dem leitfähigen Substrat abgeschieden. Durch diese kontrollierte Elektrodenarchitektur gelang es, die Nanostäbchen senkrecht oder in definierten Winkeln zur Substratoberfläche anzuordnen.

3.5 Analytik und elektrochemische Leistungsbewertung (AP 5)

Alle hergestellten metallischen Legierungen, reinen MOFs, Komposite und orientierten Elektroden wurden einer lückenlosen physikalisch-chemischen und elektrochemischen Charakterisierungskette unterzogen.

3.5.1 Materialanalytische Charakterisierung

- **Morphologie und Elementverteilung:** Rasterkraftmikroskop (AFM), und Feldemissions-Rasterelektronenmikroskopie (FE-SEM) lieferten hochaufgelöste Bilder der Elektrodentopographie und der Partikelorientierung. Gekoppelte energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDX) ermöglichte das Mapping der Elementverteilung über die kombinatorischen Gradienten.
- **Kristallstruktur und Phasenreinheit:** Pulverröntgendiffraktometrie (PXRD) diente der Phasenidentifikation der MOFs. Für dünne Schichten und orientierte Abscheidungen wurde die Grazing-Incidence-Röntgendiffraktometrie (GI-XRD) eingesetzt, um Texturierungen und

Orientierungseffekte quantitativ zu bestimmen. Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) wurde zur strukturellen Analyse der Nanopartikel-Komposite herangezogen.

- **Spektroskopie und Oberflächenchemie:** Konfokale Raman-Mikrospektroskopie und Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FT-IR) wurden genutzt, um die Stabilität der organischen Linker sowie koordinative Veränderungen der Metallzentren *ex-situ* und nach elektrochemischer Belastung zu verfolgen.

3.5.2 Elektrochemische Charakterisierung und Störungsanalyse

Die elektrochemische Leistungsbewertung erfolgte in standardisierten Drei-Elektroden-Anordnungen in stark alkalischen Medien (0.1/1 M KOH oder NaOH). Mittels zyklischer Voltammetrie (CV) und linearer Sweep-Voltammetrie (LSV) wurden die materialspezifischen Überpotenziale (η) bei definierten Stromdichten (z. B. 10 mA cm^{-2}) sowie die Tafel-Steigungen zur kinetischen Beurteilung ermittelt. Die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) erlaubte die präzise Separation des Elektrolytwiderstands, des Ladungstransferwiderstands an der Katalysatoroberfläche und der Transportwiderstände durch anhaftende Gasblasen. Die thermodynamische und mechanische Langzeitstabilität wurde über zeitaufwendige Chronopotentiometrie- (CP) und Chronoamperometrie-Messungen (CA) validiert.

3.6 Systemintegration und Validierung (AP 5)

Über die grundlegende Materialcharakterisierung hinaus wurden die vielversprechendsten Katalysatorsysteme – insbesondere die *in-situ* auf Nickelschaum modifizierten NiFe-basierten Systeme sowie die Plasma-aktivierten Mn-basierten MOFs – hinsichtlich ihrer Skalierbarkeit und Integration in anwendungsnahe Bauteilkonzepte untersucht. Die Materialien wurden für den Einsatz in AEM-Wasserelektrolysezellen vorbereitet, um sie unter realen Durchflussbedingungen zu evaluieren. Hierbei standen die Stabilität der Katalysatorschichten gegen raue hydrodynamische Bedingungen (Elektrolytströmung), der kontinuierliche Stofftransport und die Minimierung des systemischen Spannungsabfalls durch optimierte Elektroden-Membran-Anbindungen im Vordergrund.

4 Ergebnisse und Schlussfolgerungen

Im Rahmen des Projekts OxyCAT wurden signifikante wissenschaftliche und technologische Durchbrüche bei der Entwicklung PGM-freier Elektrokatalysatoren erzielt. Durch die erfolgreiche Zusammenführung von kombinatorischer Materialentwicklung, maßgeschneiderter metallorganischer Gerüstchemie (MOFs), kontrollierter elektrophoretischer Partikelausrichtung und modernster Oberflächenanalytik konnten tiefe Einblicke in die Struktur-Leistungs-Beziehungen der alkalischen Wasserelektrolyse gewonnen werden.

Die wichtigsten quantitativen und qualitativen Projektergebnisse werden nachfolgend im Detail dargestellt.

4.1 Kombinatorische Abscheidung und Aktivitätsmapping (AP 2 & AP 3)

Die Etablierung der kombinatorischen elektrochemischen Abscheidung (CED) mittels modifizierter Hull-Zellen-Geometrien erlaubte die reproduzierbare Erzeugung kontinuierlicher Zusammensetzungsgradienten von Multimetall-Legierungssystemen auf einzelnen Trägersubstraten.

Das orts aufgelöste elektrochemische Aktivitätsmapping zeigte eine ausgeprägte Abhängigkeit der Kinetik der Sauerstoffentwicklungsreaktion (OER) vom stöchiometrischen Verhältnis der Übergangsmetalle. Als optimaler Bereich für binäre Systeme kristallisierten sich Ni-Fe-Zusammensetzungen mit einem Eisenanteil von 15 bis 25 Atomprozent heraus. Diese Probenbereiche zeichneten sich durch den geringsten ohmschen Widerstand und die höchste Dichte aktivierter Übergangsmetallzentren aus. Die CED-Plattform reduzierte den zeitlichen Aufwand für das Material-Screening im Vergleich zu klassischen sequenziellen Synthesemethoden um schätzungsweise 80 % und lieferte präzise Precursor-Konfigurationen für die nachfolgenden MOF-Phasenüberformungen.

4.2 Hocheffiziente OER-Anodenkatalysatoren auf Nickelschaum (AP 4 & AP 5)

Ein herausragendes technologisches Highlight des Projekts war die direkte, bindemittelfreie *in-situ*-Synthese von NiFe-basierten geschichteten Doppelhydroxiden (LDH) und MOF-Architekturen auf hochporösen, dreidimensionalen Nickelschäumen (Ni foam).

4.2.1 Elektrochemische Leistungsdaten

Die elektrochemische Charakterisierung in alkalischen Elektrolyten (1 M KOH) demonstrierte die hervorragende katalytische Aktivität dieser hierarchisch strukturierten 3D-Elektroden für die OER:

- **Überpotenzial:** Die optimierten NiFe-LDH/Ni-Foam-Katalysatoren erreichten die Benchmark-Stromdichte von 10 A cm^{-2} bei einem extrem niedrigen Überpotenzial (η) von lediglich **~220 mV**.
- **Kinetik:** Die ermittelte Tafel-Steigung lag bei **~34 mV dec⁻¹**, was auf eine beschleunigte Ladungstransferkinetik und einen hocheffizienten Reaktionsmechanismus an den bimetallic Zentren hinweist.
- **Langzeitstabilität von AEMWE:** Bei kontinuierlichen chronopotentiometrischen Langzeitmessungen über mehr als 100 Stunden bei 1,95 V unter realen Betriebsbedingungen mit AEMWE-Stromdichten von 1 A/cm^2 zeigten die NiFe-LDH/Ni-Schaumelektroden eine bemerkenswerte mechanische und chemische Stabilität bei einer vernachlässigbaren Degradationsrate.

4.3 Plasma-assistierte Aktivierung und der strategische HER-Shift (AP 4)

Bei der Untersuchung von Mangan-basierten MOF-Systemen (Mn-MOFs und MnNi-MOFs) führte das Projekt zu einer unerwarteten und wissenschaftlich höchst wertvollen Entdeckung. Während die Materialien für die OER mäßige Aktivitäten zeigten, induzierte die Einführung einer Niederdruck-

Plasmabehandlung (Plasma-assisted activation) eine fundamentale Veränderung der elektrokatalytischen Eigenschaften.

Die Plasmabehandlung führte zu einer kontrollierten Teilreduktion und zum gezielten Einbringen von Defektstrukturen (Sauerstofffehlstellen) in das metallorganische Netzwerk. Dies führte zu einer signifikanten Leistungssteigerung bei der **Wasserstoffentwicklungsreaktion (Hydrogen Evolution Reaction, HER)** an der Kathode. Die plasmaaktivierten MnNi-MOF-Systeme erreichten im alkalischen Medium ein bemerkenswert niedriges HER-Überpotenzial von **176 mV** bei 10 mA cm^{-2} . Diese Entdeckung erweiterte das OxyCAT-Portfolio erfolgreich von reinen Anodenmaterialien hin zu hocheffizienten, bifunktionellen Katalysatorkonzepten für die gesamte AEMWE-Zelle. Ein entsprechendes Manuskript zu dieser plasmaunterstützten Aktivierung befindet sich in der finalen Vorbereitung zur Publikation.

4.4 Orientierte elektrophoretische Abscheidung und Blasenmanagement (AP 4 & AP 5)

Durch den innovativen Einsatz asymmetrischer hochfrequenter elektrischer Wechselfelder im EPD-Prozess gelang es, anisotrope MIL-53-MOF-Nanorods gerichtet auf den Substraten abzuscheiden. Die physikalische Charakterisierung mittels Grazing-Incidence XRD (GI-XRD) und FE-SEM bestätigte eine bevorzugte vertikale Ausrichtung der Nanostäbchen senkrecht zur Elektrodenoberfläche.

Diese kontrollierte Orientierung modifizierte die Oberflächenmorphologie grundlegend:

- **Gesteigerte Zugänglichkeit:** Die spezifische Oberfläche (bestimmt über BET-Messungen an einem Anton Paar System) wurde im Vergleich zu unorientiert gegossenen Partikelschichten elektrochemisch signifikant besser ausgenutzt.
- **Minimierung von Transportverlusten:** Elektrochemische Impedanzspektroskopie-Messungen (EIS) unter realer Gasentwicklung bewiesen, dass die entstehenden Sauerstoff- und Wasserstoffblasen sich wesentlich schneller und bei kleineren Blasendurchmessern von der Elektrode ablösten. Dadurch wurde die gasinduzierte Blockierung aktiver Zentren minimiert und der ohmsche Spannungsabfall bei hohen Stromdichten drastisch reduziert.

4.5 Topologische Datenanalyse und Struktur-Leistungs-Link

Ein weiterer innovativer Meilenstein war die erfolgreiche Anwendung der **Topologischen Datenanalyse (TDA)** zur mathematischen Beschreibung der komplexen Oberflächenmorphologien der entwickelten Katalysatoren. In einer engen fächerübergreifenden Zusammenarbeit (Giuseppe Di Florio, Maddalena Corsini, Katrin Griesbeck, Andrea Atrei, Rachmat Adhi Wibowo) konnten Oberflächenstrukturen quantitativ erfasst und direkt mit den elektrochemischen Leistungsparametern korreliert werden. Diese TDA-Methodik erlaubt es erstmals, morphologische „Fingerabdrücke“ von Nanomaterialien zu erstellen und präzise Vorhersagen über deren Aktivität und Blasenablöseverhalten zu treffen. Die methodischen Grundlagen wurden Anfang 2026 erfolgreich auf dem *JACS Symposium Series* an der ETH Zürich präsentiert.

4.6 Methodischer Kompetenzaufbau und Wissenstransfer

Neben den unmittelbaren Materialdaten führte OxyCAT zu einem nachhaltigen Kompetenz- und Infrastrukturaufbau an den beteiligten Institutionen. Die Universität Wien etablierte tiefe Expertise im Bereich der strukturierten MOF-Elektroden und der fortschrittlichen Analytik koordinativer Netzwerke. Das AIT erweiterte seine Kapazitäten im Bereich kombinatorischer Hochdurchsatz-Elektrochemie und der industrienahen Skalierung von PGM-freien Elektroden.

Der erfolgreiche Wissenstransfer spiegelt sich auch in der Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses wider. Die im Rahmen des Projekts angefertigte und kurz vor dem Abschluss stehende Masterarbeit von **Katrin Griesbeck** („*NiFe and Nickel-Based Metal-Organic Framework Anode Catalysts for Low-Temperature Anion Exchange Membrane Water Electrolysis*“, mitbetreut durch Prof. Chin) dokumentiert die erfolgreiche Ausbildung spezialisierter Fachkräfte für den österreichischen Wasserstoffsektor.

Die wissenschaftliche Relevanz und die internationale Sichtbarkeit des Projekts wurden durch zahlreiche Beiträge auf führenden Fachkonferenzen (darunter die *MOF2024*, die *EuroMOF 2025* in Nizza sowie die *European Fuel Cells and Hydrogen (EFCH2) 2025* in Capri) untermauert. Ein herausragendes Zeugnis der wissenschaftlichen Exzellenz des Konsortiums ist zudem die hochrangige Veröffentlichung im Top-Journal ***Nature Sustainability*** zum Themenkomplex der nachhaltigen, MOF-basierten Katalyse.

5 Ausblick und Empfehlungen

Die im Rahmen von OxyCAT erzielten Ergebnisse demonstrieren eindrucksvoll, dass PGM-freie Elektrokatalysatoren auf Basis von bimetallicchen Übergangsmetallen, geschichteten Doppelhydroxiden (LDHs) und strukturierten metallorganischen Gerüstverbindungen (MOFs) ein technologisches Schlüsselpotenzial für die nächste Generation der Anionenaustauschmembran-Wasserelektrolyse (AEMWE) besitzen. Die methodische Triade aus kombinatorischer Materialentwicklung (CED), gezielter Defektchemie via Plasmabehandlung und kontrollierter Partikelausrichtung (EPD) hat sich als valider Innovationspfad erwiesen.

Für zukünftige Forschungs- und Transferaktivitäten werden basierend auf den Projektergebnissen die folgenden vier Kernempfehlungen ausgesprochen:

5.1 4.1 Skalierung und Erhöhung des Reifegrades (TRL-Uplift)

Im Projekt wurden die Materialsysteme erfolgreich von den fundamentalen physikalischen Grundlagen (**TRL 1**) bis hin zur laborbasierten Validierung funktioneller Elektrodenkomponenten (**TRL 2 bis TRL 3**) entwickelt. In Einzelfällen, wie bei den *in-situ* auf Nickelschaum aufgewachsenen NiFe-Systemen, wurde die Schnittstelle zu **TRL 4** (Validierung im relevanten Labor-Stack) initiiert.

Zukünftige Arbeiten müssen diesen Reifegrad-Uplift konsequent fortsetzen. Hierbei ist die Überführung von planaren und kleinformatischen 3D-Modellelektroden in technisch relevante Großflächen-Zellarchitekturen ($> 1 \text{ A cm}^{-2}$) zwingend erforderlich. Ein besonderer Schwerpunkt muss dabei auf der Bewertung unter industriellen, dynamischen Betriebsbedingungen (z. B. Kopplung mit fluktuierenden erneuerbaren Energiequellen) liegen, um beschleunigte Degradationsmechanismen, die strukturelle Langzeitstabilität der organischen MOF-Linker über mehrere hundert Betriebsstunden sowie die chemische Rekonstruktion der aktiven Phasen im Detail aufzuklären.

5.2 Systemintegration und Membran-Elektroden-Einheit (MEA)

Die elektrochemische Leistungsfähigkeit im realen Elektrolyseur hängt maßgeblich vom Transportwiderstand an den inneren Grenzflächen ab. Es wird empfohlen, die im Projekt entwickelten hydrophil/aerophoben Oberflächenstrukturen direkt in die Fertigungsprozesse von Katalysator-beschichteten Membranen (CCMs) oder porösen Transportschichten (PTLs) zu integrieren. Die Minimierung von stofftransportbedingten und ohmschen Verlusten bei hohen Stromdichten ($> 1 \text{ A cm}^{-2}$) erfordert eine optimierte mechanische und ionenleitende Anbindung zwischen den orientierten MOF-Strukturen und der Anionenaustauschmembran.

5.3 Digitalisierung der Materialentwicklung und datengetriebene Ansätze

Die erfolgreiche Etablierung der kombinatorischen elektrochemischen Abscheidungsplattform (CED) in Kombination mit der topologischen Datenanalyse (TDA) zur morphologischen Charakterisierung bildet eine ideale Startrampe für die digitalisierte Materialwissenschaft. Es wird empfohlen, diese Plattformen in zukünftigen Initiativen um Ansätze des maschinellen Lernens (Machine Learning) und automatisierte High-Throughput-Synthesen zu erweitern (Closed-Loop-Materialentwicklung). Die Ausweitung der CED-Bibliotheken auf komplexe Multikomponenten-Legierungen (z. B. High-Entropy Alloys) bietet erhebliche Chancen, die Materialoptimierung für nachhaltige Energietechnologien drastisch zu beschleunigen.

5.4 Sektorkopplung und Technologietransfer

Die im Projekt OxyCAT aufgebauten Methodenkompetenzen besitzen eine hohe Relevanz weit über die Wasserelektrolyse hinaus. Insbesondere das EPD-Verfahren zur makroskopischen Ausrichtung anisotroper Nanokristalle sowie die plasmaassistierte Oberflächenfunktionalisierung sollten gezielt auf benachbarte elektrochemische Anwendungsfelder übertragen werden. Hierbei stehen die selektive elektrochemische CO_2 -Reduktion (CO_2RR) zur Herstellung grüner Plattformchemikalien, die fortgeschrittene Batteriesensorik sowie neuartige metallorganische Verbundmembranen für Trennprozesse im Vordergrund.

Die im Konsortium verankerte enge Verzahnung von der akademischen Grundlagenforschung der Universität Wien bis zur anwendungsnahen Systemkompetenz des AIT stellt einen wertvollen Nukleus für zukünftige nationale und europäische Konsortialanträge (z. B. im Rahmen von Horizon Europe oder Folgeprogrammen des FFG/KLI.EN) dar.

6 Kontaktdaten

Assoc. Prof. Jia Min Chin

Institute of Functional Materials and Catalysis, Faculty of Chemistry, University of Vienna

Währinger Str. 42, 1090 Vienna

E-Mail: jiamin.chin@univie.ac.at

Projektpartner (Univie)

Assoc. Prof. Dr. Michael R. Reithofer

Institut für Anorganische Chemie, Universität Wien

Währinger Straße 42, 1090 Wien

E-Mail: michael.reithofer@univie.ac.at

Projektpartner (AIT)

Dr. Rachmat Adhi Wibowo

AIT Austrian Institute of Technology GmbH

Giefinggasse 4, 1210 Wien

E-Mail: rachmat.wibowo@ait.ac.at