Leitprojekt H_2Giga

Dresden, 27.03.2026

Prometh$_2$eus – Projektverbund zur optimierten Materialienentwicklung für die technische H_2-Erzeugung durch verbesserte Sauerstoffelektroden

Teilprojekt 3: Intermetallische Verbindungen als Elektrodenmaterialien für die Sauerstoffentwicklungsreaktion

Sachbericht zum Verwendungsnachweis - Teil I: Kurzbericht

Stand:	30.09.2025
Einreichungsdatum TIB (Teil I+II):	
Partnerin/Partner:	Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe
Autorinnen/Autoren:	I. Antonyshyn, J. Grin
Fördertitel:	68502
Laufzeit:	01.04.2021 bis 30.09.2025
Förderkennzeichen:	03HY105D
Disclaimer:	Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Gefördert durch:

Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt

Finanziert von der Europäischen Union NextGenerationEU

Gefördert durch:
Leitprojekt H_2Giga
Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt
Finanziert von der Europäischen Union NextGenerationEU

Teil I – Kurzbericht

Ursprüngliche Aufgabenstellung sowie wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Die effektive Umsetzung der Wasserelektrolyse in Kombination mit erneuerbaren Energiequellen erfordert hochaktive, robuste, wirtschaftlich rentable und umweltfreundliche Elektrokatalysatoren auf der Kathoden- und Anodenseite. **Intermetallische Verbindungen** mit klar definierter Kristallstruktur, bestimmter elektronischer Struktur und chemischer Bindung sind die vielversprechenden Materialien für katalytische Anwendungen. Solche Eigenschaften ermöglichen es entweder, die definierten Oberflächen und ihre Eignung für einen bestimmten Reaktionsweg vorherzusagen oder die kontrollierte Behandlung einer solchen Verbindung in Richtung der Bildung katalytisch-aktiver Schichten durchzuführen. Im Rahmen dieses Vorhabens sollten diesen Vorteile für die wissensbasierte Entwicklung von **Ni-haltigen OER-Elektrokatalysatoren** für die **alkalische Wasserelektrolyse** genutzt. Intermetallische Verbindungen werden entweder als Elektrokatalysatoren selbst oder als Präkursoren zur Bildung von OER-aktiven Schichten eingesetzt. Der wichtige Vorteil solcher Verfahren liegt in der direkten Verwendung intermetallischer Verbindungen als Elektroden (Modellsysteme), wodurch die Notwendigkeit entfällt, den Katalysator auf das Substrat aufzubringen, und somit unerwünschte Effekte im Zusammenhang mit der Stabilität und/oder einer eingeschränkten elektrischen Leitfähigkeit vermieden werden.

Ablauf des Vorhabens

Die **Synthese** von Ni-basierten Elektrodenmaterialien unter Verwendung verschiedener Verfahren (Festkörpersynthese, kontrollierte Oxidation von industriell verfügbaren Legierungen und vorab synthetisierten intermetallischen Verbindungen, Boronisierung von Ni-Substraten, usw.) wird von einer umfassenden **Charakterisierung** des Materials vor- und nach elektrochemischen Experimenten mittels volumen- und oberflächenempfindlicher Methoden (Röntgenbeugung (XRD), Lichtmikroskopie (LM), thermische Analyse (DSC), Rasterelektronenmikroskopie (SEM), Röntgen-Photoelektronenspektroskopie (XPS), Elementaranalyse (ICP-OES)) begleitet. Die Zusammenstellung von experimentellen Daten, den Ergebnissen quantenchemischer Berechnungen und der Analyse chemischen Bindung ermöglicht die Interpretation der katalytischen Ergebnisse sowie des chemischen Verhaltens der Elektrodenmaterialien unter OER-Bedingungen. Der Ablauf dieses Vorhabens wurde durch 9 Arbeitspakete strukturiert, die sich nacheinander ablösen und sich zeitlich teilweise überlappen, wobei das Projekt eine Gesamtlaufzeit von 4,5 Jahren hat. Für die Erfüllung dieser Aufgaben wurden fünf wichtige Meilensteine definiert und erfolgreich erreicht.

Wesentliche Ergebnisse

Um die wichtigsten wissenschaftlichen Aufgaben des Projekts zu realisieren, wurden zahlreiche Elektrokatalysatormaterialien synthetisiert und als OER-Elektrokatalysatoren untersucht. Um dieses Ziel zu erreichen, wurden drei verschiedene Ansätze erfolgreich eingesetzt:

(1) **Festkörpersynthese** von binären intermetallischen Verbindungen aus der Systemen **V-Ni**, **Nb-Ni** und **Ta-Ni**. Die Verbindungen mit unterschiedlichen Zusammensetzungen und Kristallstrukturen wurden hergestellt und anschließend als Elektroden für die elektrochemische Experimente eingesetzt. Unter diesen Materialien wurde die höchste OER-Aktivität für V-Ni-Verbindungen beobachtet und das interessante und unterschiedliche chemische Verhalten von VNi_2 und VNi_3 Verbindungen wurde untersucht. Im Fall von Nb-Ni ändert sich die OER-

Aktivität von der höchsten für $NbNi_3$ über eine mit elementarem Ni vergleichbare für die feste Lösung Nb_xNi_{1-x} (x = 0.09) bis hin zur OER-Inaktivität (oder schnellen Deaktivierung) der Verbindung Nb_6Ni_7. Die OER-Aktivität von Ta-Ni-Phasen wurde unter Verwendung einer Standard-3-Elektrodenzelle sowie der SECCM-Technik (in Zusammenarbeit mit TP7) untersucht.

(2) Die **kontrollierte Boronisierung** von Ni-haltigen Materialien in verschiedenen Formen (Platten, Schäume, Streckgitter) ermöglicht es, klar definierte Ni_3B-Schichten unterschiedlicher Dicke und Morphologie zu erhalten. Der Einfluss verschiedener Parameter (Temperatur, Kontaktzeit mit gasförmigem BBr_3, usw.) auf die erhaltenen Ni-B-Schichten wurde eingehend untersucht. Ausgewählte boronisierte Ni-Netze wurden unter industriell relevanten Bedingungen einem langfristigen beschleunigten elektrochemischen Test unterzogen und weisen eine der höchsten Leistungen aller im Rahmen des PrometH2eus-Verbundes untersuchten Elektrokatalysatoren auf (in Zusammenarbeit mit TP Koord).

(3) Die **kontrollierte Oxidation** von intermetallischen Verbindungen wurde sowohl für gekauftes Nitinol (NiTi) als auch für synthetisierte Zr-Ni intermetallischen Verbindungen durchgeführt. Die Abhängigkeit der auf den Elektrodenoberflächen gebildeten Oxidschichten von der verwendeten Temperatur und der Dauer der Oxidation wurde eingehend untersucht. Die OER-Performanz wird hauptsächlich durch die elektrische Leitfähigkeit der Oberflächenschichten kontrolliert.

Zusammenarbeit mit anderen (Forschungs-)Einrichtungen

Die **Zusammenarbeit** innerhalb von PrometH2eus bringt die Kooperationspartner beim Verständnis der katalytischen Eigenschaften neuer Materialien voran und ermöglicht eine effiziente Nutzung der in verschiedenen Einrichtungen verfügbaren Material- und Gerätebasis sowie der Vorteile ihrer wissenschaftlichen Expertise. Im Rahmen dieses Projekts wurde eine enge Zusammenarbeit mit folgenden Projektpartnern realisiert:

- Untersuchung der OER-Aktivität verschiedener Phasen innerhalb einer Probe unter Verwendung der elektrochemischen Rastermikroskopie (SECCM), wodurch die intrinsische elektrokatalytische Aktivität im Nanobereich unterschieden werden kann (Zusammenarbeit mit **TP7**, OER-Aktivität von Ni_2B- und Ni_3B-Phasen sowie deren Abhängigkeit von der gasförmigen Umgebung; Untersuchung der OER-Aktivität von Ta-Ni intermetallischen Verbindungen in Zweiphasenproben);
- erweiterte Charakterisierung der untersuchten Elektrodenmaterialien mittels anderer Techniken, z. B. Röntgenabsorptionsspektroskopie (XAS), um tiefenabhängige Einblicke in den chemischen Zustand der Oberfläche vor- und nach der OER zu gewinnen (in Zusammenarbeit mit **TP12**, XAS-Untersuchung zu Veränderungen des V-Ni-Elektrokatalysators unter OER-Bedingungen);
- elektrochemische Bewertung der Aktivität/Stabilität von entwickelte Elektrokatalysatoren unter einheitlichen Bedingungen, die für die industrielle Anwendung relevant sind (in Kooperation mit **TPKoord**, beschleunigte Belastungstests an boronisierten Ni-Netzen und deren Vergleich mit Elektrokatalysatoren anderer Partners sowie Referenzkatalysatoren).

Die enge Zusammenarbeit und der wissenschaftliche Austausch wurden auch systematisch innerhalb der AG1-Gruppe „Synthese“ (TP1-TP6, vierteljährliche Treffen), durch die Teilnahme an Treffen anderer AGs sowie durch die regelmäßige Teilnahme an den PrometH2eus- und H2Giga-Konferenzen umgesetzt.