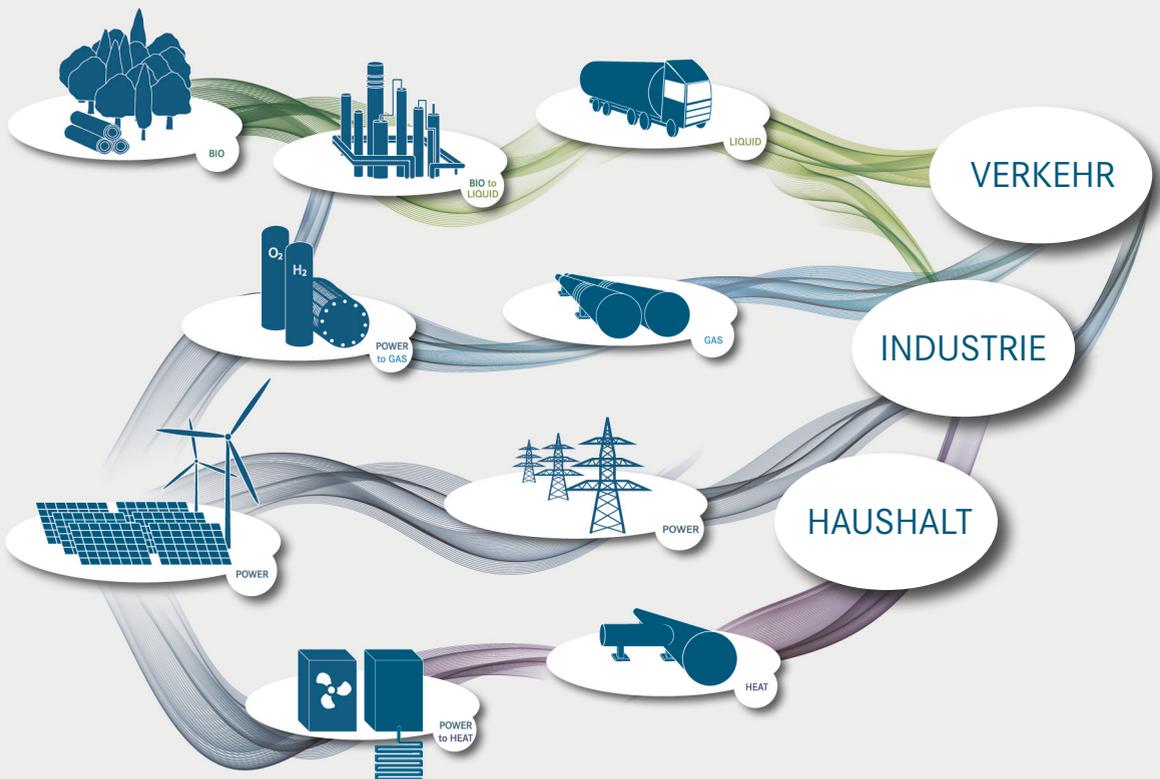


IEK-3 Report 2017

Sektorkopplung –
Forschung für ein integriertes Energiesystem



Energie & Umwelt /
Energy & Environment
Band / Volume 384
ISBN 978-3-95806-256-6

Forschungszentrum Jülich GmbH
Institut für Energie- und Klimaforschung
Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3)

IEK-3 Report 2017

Sektorkopplung –
Forschung für ein integriertes Energiesystem

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 384

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-256-6

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek.
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte Bibliografische Daten
sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Herausgeber
und Vertrieb: Forschungszentrum Jülich GmbH
Zentralbibliothek, Verlag
52425 Jülich
Tel.: +49 2461 61-5368
Fax: +49 2461 61-6103
E-Mail: zb-publikation@fz-juelich.de
www.fz-juelich.de/zb

Umschlaggestaltung: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Druck: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Copyright: Forschungszentrum Jülich 2017

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band / Volume 384

ISSN 1866-1793
ISBN 978-3-95806-256-6

Vollständig frei verfügbar über das Publikationsportal des Forschungszentrums Jülich (JuSER)
unter www.fz-juelich.de/zb/openaccess.



This is an Open Access publication distributed under the terms of the [Creative Commons Attribution License 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/),
which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Vorwort	2
1 Beiträge für internationale Konferenzen	5
1.1 Vorbereitung, Durchführung und Resultat der TRENDS 2015.....	6
1.2 Ausrichtung der Soft Matter and Neutrons GO Energy.....	9
2 Aus- und Weiterbildung	13
2.1 Ausbildung an Hochschulen.....	14
2.2 Beiträge für die Information, Weiterbildung und Qualifizierung.....	20
3 Wissenschaftlich-technische Berichte	25
3.1 Festoxid-Brennstoffzellen.....	26
3.2 Brenngaserzeugung und Systeme.....	43
3.3 Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen.....	54
3.4 Direktmethanol-Brennstoffzellen.....	68
3.5 Wasserelektrolyse.....	76
3.6 Verfahrens- und Systemanalyse.....	88
3.7 Physikalisch-Chemische Grundlagen / Elektrochemie.....	97
4 Besondere Ergebnisse	105
4.1 Lithiumbatterien für stationäre und mobile Anwendungen.....	106
4.2 Bewertung von Kohlendioxid als Rohstoff in der chemischen Industrie ...	110
4.3 Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystem für die Bordstromversorgung.....	115
4.4 Stabile Elektroden mit reduziertem Ir-Gehalt für die PEM-Elektrolyse.....	120
4.5 Festoxid-Brennstoffzellensystem mit integrierter Schutzgaserzeugung.....	123
4.6 PRECORS: Ein „Spin-off“ für korrosionsbeständige Beschichtungen.....	128
5 Ausblick auf neue FuE-Vorhaben	135
5.1 Festoxidzellen für reversiblen Anlagenbetrieb.....	136
5.2 Multiskalenmodellierung von Brennstoffzellen.....	140
5.3 Photolyse – Photoelektrische Wasserstoffherstellung.....	142
5.4 Versorgungssysteme für alternative Kraftstoffe.....	144
5.5 Neue Themen aus der Energiesystemanalyse und -integration.....	150
6 Zahlen, Daten und Fakten	155
6.1 Das Institut für Elektrochemische Verfahrenstechnik IEK-3.....	156
6.2 Abteilungskompetenz im Überblick.....	159
6.3 Publikationen, Technologietransfer und Ressourcen.....	163
6.4 Gremienarbeit.....	166
6.5 Beiträge zu Messen und Ausstellungen.....	172
6.6 Anfahrtsbeschreibung.....	175
6.7 Abkürzungsverzeichnis.....	178

Vorwort

Liebe Leser,

eine der zentralen Herausforderungen der Energiewende ist es, alle Energiequellen verlässlich in das bestehende System einzubinden. Das erfordert den Einsatz neuer und effizienter Technologien für das Umwandeln, Speichern und Verteilen von regenerativ erzeugtem Strom. Das IEK-3 steht seit Jahren an der Spitze dieser Bemühungen. Mithilfe einer neuen Förderung der Helmholtz-Gemeinschaft haben wir unsere Forschung in dieser Richtung in den Jahren 2015 und 2016 weiter vorangetrieben und intensiviert.

Mit zusätzlichen Mitteln aus der neu geschaffenen Helmholtz-Initiative „Energiesystem 2050“ arbeiten unsere Forscher an einer Systemanalyse, die sich eng an den technischen Instituten orientiert. Sie soll innovative technologische Ideen für das Energiesystem der Zukunft hervorbringen und bewerten, im Einklang mit den im Dezember 2015 auf der Weltklimakonferenz in Paris beschlossenen Zielen. Die zusätzlichen Mittel ermöglichten eine Erweiterung des Teams auf 15 Forscher – nahezu eine Verdopplung. Unsere Systemanalytiker erstellen und analysieren Energieszenarien für Deutschland, Europa und ausgesuchte, strategisch wichtige Gebiete weltweit. So wurde unter anderem ein neues Berechnungsverfahren für Gasnetze entwickelt, sowie ein Stromnetzmodell, welches erlaubt, Nachfrage und Einspeisung erneuerbarer Energien orts- und zeitaufgelöst zu betrachten. Diese Entwicklungen gewährleisten eine technologieneutrale Systemanalyse: Die im IEK-3 selbst erforschten Techniken werden zwar berücksichtigt, aber keinesfalls bevorzugt.

Der Fokus unserer Forschung – und das Gebiet mit den meisten Kapazitäten – ist jedoch die Hardware-Entwicklung elektrochemischer Komponenten. Die Schwerpunkte in diesem Bereich sind Elektrolyse – als alkalische und saure Niedertemperaturelektrolyse und Hochtemperaturelektrolyse – und Brennstoffzellen. Hier liegt der Fokus auf keramischen Hochtemperatur-Brennstoffzellen, Hochtemperatur-Polymer-Brennstoffzellen und der Entwicklung von auf Flüssigkraftstoff basierten Bordstrom-Systemen mit Brennstoffzellen.

Die Forschung an keramischen Hochtemperatur-Brennstoffzellen konnte einen besonderen Erfolg verzeichnen: die Entwicklung und experimentelle Verifizierung eines Schutzgas-Systems mit dazugehörigen An- und Abfahrzyklen. Dieses macht die bisher üblichen externen Schutzgasversorgungen mittels Flaschengas hinfällig – und entfernt damit eine Barriere zur erfolgreichen Kommerzialisierung der Brennstoffzelle. Gleichzeitig wurde durch die Entwicklung der elektrische Wirkungsgrad des Gesamtsystems auf 60 Prozent gesteigert.

Der "f-cell award – Innovationspreis Brennstoffzelle" ging in diesem Jahr nach Jülich. Drei Wissenschaftler des IEK-3 überzeugten die Jury in der Kategorie "research & development" mit ihrem Verfahren für die Sprühbeschichtung von metallischen Bipolarplatten, mit dem sich Graphenoxid-Schichten besonders kostengünstig herstellen lassen. Die Forscher konnten für ihr Verfahren zuvor bereits mehrere andere Preise gewinnen, und gründen nun ein eigenes Unternehmen.

Ich hoffe, diese ausgewählten Beispiele können Sie zum weiteren Lesen des Reports anregen. Wir freuen uns jederzeit mit Ihnen in Kontakt zu treten und so unsere Arbeit zu vertiefen oder weitere interessante Themen aufzunehmen.



Jülich, im August 2017

Detlef Polster





1

Tagungen

Beiträge für internationale Konferenzen

- Vorbereitung, Durchführung und Resultat der TRENDS 2015
- Ausrichtung der Soft Matter and Neutrons GO Energy

1.1 Vorbereitung, Durchführung und Resultat der TRENDS 2015

Unter dem Titel TRENDS – Transition to Renewable Energy Devices and Systems organisierte das IEK-3 vom 3. - 4. Dezember 2015 eine Expertenrunde in Aachen. Eine Gruppe von ca. 20 Wissenschaftlern diskutierte relevante Themen, die zur Wandlung unseres heutigen Energiesystems hin zu einer Energieversorgung, die auf nachhaltigen Primärenergiequellen basiert, beitragen können. Das Konzept der Expertenrunde war es, Kernthemen mit hoher Durchschlagkraft zu identifizieren und fehlende Bausteine zu benennen, die für die Umsetzung einer Reduktion von 80% der CO₂-Emissionen bis 2050 entscheidend sind. Thematisch zielte die Konferenz auf Kraftstoffe für den Verkehr und auf maßgebliche Antriebskonzepte. Im Verkehrsbereich nimmt die Elektrifizierung in Zukunft zu, so dass der Bordstromversorgung eine bedeutendere Rolle gegenüber heute zukommen wird. Seitens der Kraftstoffe wurde das Potenzial alternativer Kraftstoffe, deren Herstellpfade (siehe Abb. 1) und deren Kostenaspekte anhand einzelner Impulsvorträge diskutiert. Die wesentlichen Diskussionsinhalte sind im Folgenden abschnittsweise dokumentiert:

Eine Reduktion der CO₂-Emissionen fand im Transportsektor in den letzten Jahren nahezu nicht statt. Sektoren wie die Energiewirtschaft und industrielle Prozesse haben ihre CO₂-äquivalente Emissionen um 11,0 – 12,5% im Zeitraum 2007 – 2014 vermindert. Das Erreichen der Klimaziele erfordert u.a. auch neue Transportkonzepte. Dabei müssen spezifische Lösungen für den Personen- und Güterverkehr gefunden werden. Langfristig können Brennstoffzellenantriebe mit Wasserstoff betrieben und Batterie-elektrische Fahrzeuge im Personenverkehr eingesetzt werden. Im Gütertransport werden u.a. Diesel-Elektromotor-Hybrid-Antriebe mit Oberleitungen und LNG-basierte Verbrennungsmotoren in die Betrachtung mit aufgenommen. Ein Wandel im Transportsektor wird technologiegetrieben sein und führt zu massiven Änderungen in den Produktionslinien. Solche Technologien benötigen für ihre einzelnen Entwicklungsstufen Nischenanwendungen sowie attraktive Förder- und später entsprechende Geschäftsmodelle. Derzeit ist der verfügbare, fossile Kohlenstoff zu günstig und die CO₂-Zertifikate im Emissionshandel sind nicht teuer genug, um einen Wandel auf wirtschaftlicher Basis zu erzwingen.

Ein zunehmender Anteil an Batterie-elektrischen Fahrzeugen verlangt eine flächendeckende Ladeinfrastruktur. Ladesäulen für eine Flotte von E-Fahrzeugen wurden zum Beispiel im Ostallgäu installiert und getestet. Um die Summe aller Ladevorgänge mit dem Vorliegen einer entsprechenden Menge an erneuerbarem Strom zu decken, bedarf es eines intelligenten Lademanagements. Ansonsten fallen die Peaks für die Ladeleistung (6:00 – 7:30 Uhr) nicht mit der Hauptmenge erneuerbaren Stroms (9:00 – 15:00 Uhr) zusammen. Die Fahrzeugnutzer müssen ihre beabsichtigten Abfahrzeiten dem System melden. Damit lässt sich der Ladebedarf für eine kleine Flotte durch erneuerbaren Strom abdecken.

Um die Einführung der Elektromobilität voranzutreiben, benötigt es ein Zusammenwirken von Industrie und Forschung. Zum einen muss die Infrastruktur aufgebaut werden, zum anderen müssen die Kunden Batteriefahrzeuge annehmen. Dies bedarf aber neuer Fahrzeugkonzepte. Positiv zu wertende Entwicklungen sind der BMW i3 und der Übertrag des Streetscooters auf die Flotte der Deutschen Post. Seitens der Elektronik sind Forschungs- und Entwicklungsaufgaben: die Integration der Leistungselektronik in den Antrieb, modulare Antriebskonzepte, höhere Geschwindigkeiten der Batteriefahrzeuge und neue Materialien für Hochtemperatur-Halbleiter, Permanentmagnete und die Entwicklung von Hochvolt-Batterien (> 5 V).

Systeme zur Bordstromversorgung auf Basis von Brennstoffzellen weisen vor allem im niedrigen Lastbereich eine Reihe von Vorteilen wie eine höhere Systemeffizienz, geringere Emissionen und den leisen Betrieb gegenüber Verbrennungsmotoren oder Turbinen auf. Lkw-Anwendungen benötigen aber kompakte Systeme mit Leistungsdichten von 40 W/l, die zuverlässig kommerzielle Kraftstoffe wie Diesel in wasserstoffreiches Gas umwandeln können. Im maritimen Bereich und für Luftfahrtanwendungen werden gegenüber heute im Test befindlichen Systemen mit 3–10 kW_e deutlich höhere Leistungen benötigt, die zwischen 100–500 kW_e liegen. Insbesondere in dieser Leistungsklasse müssen noch Stacks entwickelt werden. Die Gesamtkosten für solche Systeme müssen reduziert werden.

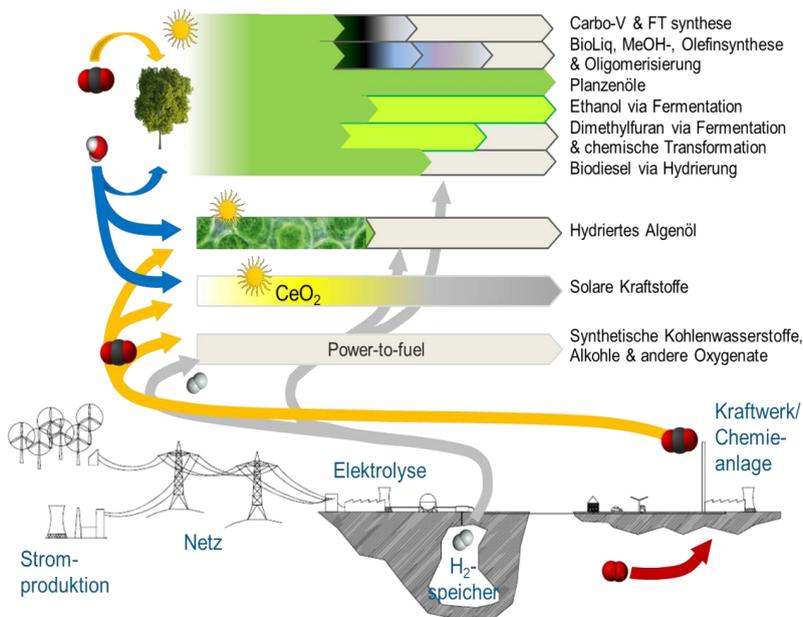


Abb. 1: Verschiedene Syntheserouten für BtL- und PtL-Kraftstoffe

Internationale Kraftstoffstrategien, die eine Reduktion der CO₂-Emissionen um 30-40 % bis 2030 und um 60-80% bis 2050 ermöglichen, scheinen zu fehlen. Finnland und Schweden gelten als Vorläufer bei der Einführung von erneuerbaren Kraftstoffen im Verkehrsbereich. Beide fokussieren auf den Einsatz von Biokraftstoffen. Weltweit sind Erdgas und Biokraftstoffe als alternative Kraftstoffe im Fokus. In Europa ist der Einsatz von Biokraftstoffen bei einem Anteil von 5% seit 2010 stagnierend. Alternative Technologien seien es neue Biokraftstoffe und –gase oder alternative Antriebstechniken wie Elektroantriebe mit Batterie oder Brennstoffzelle entwickeln sich eher langsam. Eine weltweite aber nach Regionen aufgeschlüsselte Analyse der Biomassepotentiale steht aus, ist aber für die Bewertung alternativer Potenziale notwendig.

Wasserstoff als Energieträger für den Transportsektor muss mittel- bis langfristig aus erneuerbaren Primärenergiequellen erzeugt werden. Mit dem Ausbau der Wind- und Solarenergie und deren fluktuierenden Charakter muss ein Übermaß an Erneuerbaren aufgebaut werden, um im Zusammenspiel mit einer geeigneten Speicherung eine Energieversorgung bis 2050 zu realisieren, die tatsächlich zu einer CO₂-Minderung um 80% führen

kann. Das vorgestellte Energiekonzept des IEK-3 sieht vor, dass in Deutschland 170 GW (onshore) und 59 GW (offshore) Windenergien bis 2050 installiert werden. Im Modell wird von jährlichen Betriebsstunden unter Nennlast von 2.000 h (onshore) und 4.000 h (offshore) ausgegangen. Nach Abzug der jährlich benötigten elektrischen Energie von 528 TWh verbleibt ein Überschuss von 293 TWh – vorausgesetzt die Netzkapazität wird berücksichtigt. Bei einem Wirkungsgrad von 70% lassen sich damit maximal 6,2 Millionen Tonnen Wasserstoff via Elektrolyse erzeugen. Würde $\frac{3}{4}$ der deutschen Fahrzeugflotte von 44 Millionen Pkw bis 2050 auf Brennstoffzellen-Antriebe umgerüstet, würden hierfür jährlich 2,9 Millionen Tonnen Wasserstoff benötigt. Eine Kostenanalyse schätzt den Wasserstoffpreis auf 16,5 ct/kWh bei einer installierten Elektrolyseleistung von 28 GW.

Die Hydrierung von Pflanzenölen ist eine Möglichkeit, Biomasse in verschiedene Kraftstoffe – vorzugsweise Diesel – umzuwandeln. Dabei werden alle in den Pflanzenölen vorhandenen Doppelbindungen durch Wasserstoff abgesättigt und der in den Säuregruppen enthaltene Sauerstoff wird unter Kohlendioxid- und Wasserbildung entfernt. Die finnische Firma Neste produziert mit diesem Prozess jährlich 2,5 Millionen Tonnen Kraftstoff. Die Ölbasis besteht aus pflanzlichen und tierischen Alt fetten (62 %), Pflanzenölen der 1. Generation wie Raps-, Palm- und Sojaölen und solchen wie Leindotter- und Jatrophaölen, die auf Grund ihrer Anbauflächen nicht in Konkurrenz zu Nahrungsmitteln stehen müssen. Die chemischen und thermodynamischen Eigenschaften sind mit synthetischen Kraftstoffen aus dem Fischer-Tropsch-Prozess nahezu identisch.

Bioöle lassen sich neben einer Vergasung auch direkt verflüssigen. Bekannt sind die Flashpyrolyse, die hydrothermale und die organische Solvolyse. Es entstehen Gase, Biokohle und zwei flüssige Phasen, eine wässrige und eine organische. Nach der Flashpyrolyse beträgt der Sauerstoffgehalt noch ca. 40% bei einem niedrigen Heizwert von 15 MJ/kg, nach der organischen Solvolyse 20% bei einem deutlich besseren Heizwert von 30 MJ/kg. Es folgt eine Aufbereitung der Bioöle mittels Hydrierung zur Kraftstoffherzeugung. Eine wesentlich elegantere Methode zur Kraftstoffherstellung gegenüber Vergasung und anschließender Fischer-Tropsch-Synthese stellt die selektive biochemische Synthese aus Biopolymeren dar. Das Exzellenzcluster „Tailor-Made Fuels from Biomass“ der RWTH Aachen erzeugt aus Zellulose und Hemizellulose über die Zwischenprodukte Lävulinsäure, Itakonsäure und Hydroxymethylfurfural Kraftstoffe wie Methyltetrahydrofuran.

Aufgabe von Bioraffinerien, die solche Prozesse im Fokus haben, muss es sein, alle Wasser- und Lösungsmittelströme zu rezyklieren. Die Trocknung von Abfallströmen und die Depositionierung fester Rückstände führt im Gegenzug zu einem erhöhten Energieaufwand, verbessert aber die Wasserbilanz der Kraftstoffherzeugung.

Eine weitere Möglichkeit der Kraftstoffherzeugung stellen Power-to-Fuel Prozesse dar. Hierbei wird regenerativ erzeugter Wasserstoff mit aus Industrieprozessen abgetrenntem Kohlendioxid zu Kraftstoffen kombiniert. Betrachtet werden Ether, Alkohole und Alkane. Insbesondere Ether wie Dimethylether und Polyoxydimethylether bieten Vorteile bezüglich der Emission von Stickoxiden und Partikeln bei der motorischen Verbrennung. Mit ca. 3 Millionen Tonnen Wasserstoff aus der Elektrolyse ließen sich ca. 7,5 Millionen Tonnen Kraftstoff in Form von Alkanschnitten erzeugen. Die Wirkungsgrade der Kraftstoffherzeugung liegen in Abhängigkeit vom Prozess und der chemischen Zielsubstanz zwischen 30 – 50%.

1.2 Ausrichtung der Soft Matter and Neutrons GO Energy

Am 8. und 9. Oktober 2016 fand der erste Jülicher Workshop “Soft Matter and Neutrons GO Energy” in Feldafing am Westufer des Starnberger Sees statt. 25 Wissenschaftler tauschten ihre Ideen aus, die auf ein interdisziplinäres Umfeld für die Themen „Weiche Materie und Neutronenforschung für nachhaltige Energieversorgung“ ausgerichtet waren. Die Veranstaltung wurde von Dr. Olaf Holderer und Dr. Rainer Bruchhaus, Jülich Centre for Neutron Science (JCNS) sowie Professor Werner Lehnert, Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3) organisiert und fand im GIZ Konferenzzentrum der Deutschen Gesellschaft für Internationale Zusammenarbeit statt.

Die Forderung nach einer nachhaltigen Versorgung mit ausreichend Energie stellt eine der großen Herausforderungen dar, der die Gesellschaft weltweit gegenübersteht. Wichtige Forschungsprojekte zielen deshalb darauf, eine “grüne” Energiebereitstellung und effiziente Energiespeicherung durch die Einbeziehung fortschrittlicher Technologien und Materialien zu ermöglichen. Jüngst haben “Soft Matter” Materialien eine hohe Attraktivität für die Nutzung in fortschrittlichen Batterien und Solarzellen sowie effizienten Brennstoffzellen erlangt. Dabei liefern Neutronen ein Schlüsselwerkzeug, um tiefere Einsichten in Struktur sowie Dynamik und demzufolge die Funktion von „Soft Matter“ basierten Technologien zu erlangen. Darüber hinaus liefern Methoden der Neutronenstreuung signifikante Beiträge für die Beantwortung offener Fragen auf dem Forschungsgebiet der Lithiumionenbatterien.

Die Motivation für die Ausrichtung des Workshop “Soft Matter and Neutrons GO Energy” war das Zusammenführen von wissenschaftlichen Experten, um die Kommunikation zwischen unterschiedlichen Kompetenzgemeinschaften zu verbessern und das Potenzial der Neutronenstreuung in diesem Feld vollständig zu erschließen. 25 Wissenschaftler nutzten den Workshop (siehe Abb. 2) für Diskussionen über die neuesten Entwicklungen auf dem Gebiet und erkundeten zukünftige Möglichkeiten für Zusammenarbeit und wissenschaftlichen Austausch.



Abb. 2: Gruppenbild der Workshop-Teilnehmer

Der Workshop bot Teilveranstaltungen für Batterien und Materialien für energiebezogene Anwendungen von Solarzellen, über neue Gummimischungen für Reifen bis hin zu Brennstoff-

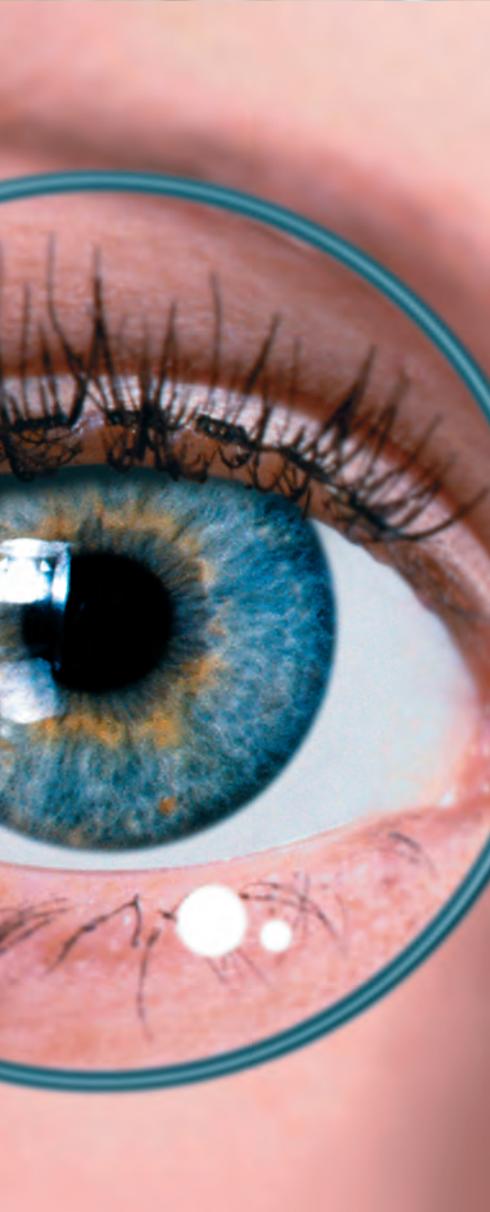
zellen. Die unterschiedlichen Teilveranstaltungen führten zu lebhaften Diskussionen, die deutlich anzeigten, dass energiebezogene Themen und Neutronenstreuung eine attraktive Kombination darstellen. Einige der während der Veranstaltung präsentierten Arbeitsergebnisse behandelten Neutronenradiographie und -tomographie als Lieferant neuer Einsichten in die Funktion von Batterien und Brennstoffzellen. Quasi-elastische Neutronenstreuung wurde als exzellentes Werkzeug vorgestellt, mit dem die Protonendiffusion in komplexen Multikomponentensystemen studiert werden kann. Ferner konnte gezeigt werden, dass SANS mit streifendem Einfall ein außergewöhnliches Werkzeug für das Studium von verdeckten Grenzflächen in beschichteten Strukturen darstellt.

Referent/in	Vortragstitel
Fr. Dr. W. Lüke	In-situ neutron radiography to characterize MEAs of dynamically operated HT-PEFCs
Dr. M. Höh	Investigation of Two-Phase Flow in Polymer Electrolyte Membrane Water Electrolysis using Neutron Radiography

Tab. 1: Referenten und Vorträge des IEK-3

Vom IEK-3 präsentierten Frau Dr. Wiebke Lüke und Herr Dr. Michael Höh auf der Veranstaltung ihre neuesten Ergebnisse zur Neutronenradiographie an Brennstoff- und Elektrolysezellen (siehe Tab. 1). Der erste Vortrag behandelte die Dynamik von Phosphorsäure innerhalb einer in Betrieb befindlichen Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle. Der zweite Vortrag befasste sich mit operando-Beobachtungen von Gasblasen in einem Polymerelektrolytelektrolyseur.





2

Bildung

Aus- und Weiterbildung

- Ausbildung an Hochschulen
- Beiträge für die Information, Weiterbildung und Qualifizierung

Neben der Wissensvermehrung auf den Gebieten zukunftsweisender Energieumwandlungstechnologien widmen sich zahlreiche wissenschaftliche Mitarbeiter des IEK-3 mit zielgruppenorientierter Aus- und Weiterbildung. Zum kontinuierlichen Aufbau des wissenschaftlichen Nachwuchses zählen Beiträge zur Ausbildung von Studenten an Universitäten und Fachhochschulen sowie zur fach- und projektorientierten Betreuung von Doktoranden. Darüber hinaus werden Fachkräfte für Labore und die mathematisch-technische Softwareentwicklung im Rahmen dualer Ausbildungsgänge am Institut betreut. Mit den Angeboten für Schüler ab der Jahrgangsstufe 10 liefern die involvierten Mitarbeiter energietechnisch orientierte Beiträge für den Schulbereich.

2.1 Ausbildung an Hochschulen

Die Lehre an Hochschulen ist im IEK-3 ein fundamentaler, zusätzlicher Bestandteil der Tätigkeiten ausgewählter, wissenschaftlicher Mitarbeiter neben der Forschungs- und Entwicklungsarbeit. Im Rahmen des Jülicher Modells verfügt das IEK-3 über eine gemeinsame W3-Berufung mit der RWTH Aachen, die durch Prof. Dr.-Ing. Detlef Stolten wahrgenommen wird. Dr. Martin Müller unterstützt Professor Stolten als Lehrbeauftragter bei der Durchführung von vorlesungsbegleitenden Übungen und mündlichen Diplomprüfungen. Darüber hinaus besitzt Prof. Dr. rer. nat. Werner Lehnert eine W2-Berufung an die RWTH Aachen, die er für die naturwissenschaftliche Fakultät wahrnimmt. Ein weiterer Lehrauftrag an der Justus-Liebig-Universität Gießen wurde von Privatdozent Dr. rer. nat. Carsten Korte bis SS 2016 erfüllt. Seit der Umhabilitation von Herr Dr. Korte wird dieser Lehrauftrag ab WS 2016 nun an der RWTH Aachen wahrgenommen. Zwei weitere W2-Berufungen mit der Fachhochschule Aachen Standort Jülich werden von Prof. Dr.-Ing. Ralf Peters und Prof. Dipl.-Ing. Ludger Blum ausgeübt. Dr.-Ing. Dipl.-Wirt.Ing. Thomas Grube unterstützt Professor Peters als Lehrbeauftragter bei der Durchführung von vorlesungsbegleitenden Übungen und schriftlichen Diplomprüfungen. Seit dem Wintersemester 2012/2013 nimmt Herr Dr.-Ing. Murat Peksen eine Lehrtätigkeit an der Fachhochschule Aachen Standort Jülich wahr. Darüber hinaus hat Herr Dr.-Ing. Martin Robinus zum Sommersemester 2016 die Lehrtätigkeit an der RWTH Aachen für Technische Energiesystemanalyse aufgenommen



<http://www.rwth-aachen.de/>



<http://www.uni-giessen.de/>



FH AACHEN
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

<http://www.fh-aachen.de/>

Abb. 3: Hochschulen mit Lehrbeiträgen von IEK-3-Wissenschaftlern

Abb. 3 liefert die Kontaktdaten zu den drei Hochschulen, an denen Wissenschaftler des IEK-3 lehren und den wissenschaftlichen Nachwuchs ausbilden.

Das Spektrum der gelehrt Themen reicht von der Vermittlung naturwissenschaftlicher Grundlagen und theoretischer Modellierungs- und Simulationsmethoden über technisches Detailwissen bis hin zur Charakterisierung technischer Anwendungen. Der Gesamtumfang der semesterweise durchgeführten, doppelstündigen Lehrveranstaltungen beläuft sich auf fünf Vorlesungen, drei Übungen und ein Blockseminar. Darüber hinaus wird in jedem Sommersemester ein halbtägiges Praktikum durchgeführt. Die Anzahl der pro Veranstaltung und Semester teilnehmenden Studenten beläuft sich auf bis zu 80 Studierende. Zusätzlich leisten die Wissenschaftler des IEK-3 einen nennenswerten Beitrag zur Betreuung von Studien-, Bachelor-, Master- und Doktorarbeiten. Bezogen auf den Berichtszeitraum 2015 und 2016 wurden 9 bzw. 4 Bachelor-, 15 bzw. 22 Master- und 9 bzw. 8 Doktorarbeiten erfolgreich abgeschlossen.

2.1.1 Lehrveranstaltungen von Hochschullehrern mit Berufung

Der folgenden Tab. 2 können die wichtigsten Koordinaten der von Hochschullehrern des IEK-3 ausgerichteten Lehrveranstaltungen entnommen werden.

Name	Thema	Art/Umfang Semester		Hochschule
Prof. Dr. D. Stolten	Grundlagen und Technik der Brennstoffzellen	V/2 Ü/2	WS	RWTH Aachen
Prof. Dr. W. Lehnert	Modellierung in der Elektrochemischen Verfahrenstechnik	V/2 Ü/2	WS	RTWH Aachen
Prof. Dr. R. Peters	Basics and applications of chemical reaction theory – simulation of dynamic processes in energy systems with MATLAB/Simulink	V/2 Ü/2	WS	FH Aachen Standort Jülich
Prof. L. Blum	Brennstoffzellen - Die Zukunft der dezentralen Energieversorgung!?	V/2	WS	FH Aachen Standort Jülich
	Fuel Cells – The Future for Dispersed Power Supply!?	V/2	WS	

Tab. 2: Lehrveranstaltungen von Hochschullehrern mit Berufungen

2.1.1.1 Grundlagen und Technik der Brennstoffzellen

Herr Prof.-Dr.-Ing. Detlef Stolten vertritt an der RWTH Aachen den Lehrstuhl für Brennstoffzellen. Die angebotenen Lehrveranstaltungen befassen sich mit der Umwandlung von regenerativen und fossilen Energieträgern zum Einsatz in Brennstoffzellen für den portablen, stationären und mobilen Bereich. Die verfahrens- und systemtechnischen Betrachtungen umfassen Hochtemperatur- und Niedertemperatur-Brennstoffzellen sowie die Erzeugung der brennstoffzellenspezifischen Brenngase. Diese Aspekte werden von physikalisch-chemischen Grundlagenbetrachtungen begleitet. Systemanalytische Studien der Energieverfahrenstechnik einschließlich Kostenabschätzungen dienen einer ganzheitlichen Betrachtung mit Blick auf eine zukünftige Markteinführung. Im Rahmen der bestehenden Kooperation mit

dem Forschungszentrum Jülich bietet der Lehrstuhl Studierenden die Möglichkeit zur Mitarbeit durch die Anfertigung von Studien- und Diplomarbeiten sowie durch projektbezogene Tätigkeiten als wissenschaftliche Hilfskraft.

2.1.1.2 Modellierung in der Elektrochemischen Verfahrenstechnik

Herr Prof. Werner Lehnert vertritt an der RWTH Aachen das Forschungs- und Lehrgebiet „Modellierung in der Elektrochemischen Verfahrenstechnik“. Die angebotene Vorlesung befasst sich mit der mathematischen Beschreibung von elektrochemischen Wandler-systemen. Neben der grundsätzlichen Herangehensweise an Modellierungsaufgaben werden verschiedene Modellierungsansätze vorgestellt. Am Beispiel von Nieder- und Hochtemperatur-Brennstoffzellen werden 1D-, 2D- und 3D-Modelle verschiedener Komplexität entwickelt und deren Gültigkeit diskutiert. Schwerpunkt der Anwendungsbeispiele ist die mathematische Beschreibung der Wechselwirkungen von Stoff- und Wärmetransport mit den elektrochemischen Prozessen. Ein besonderes Augenmerk liegt auf der Beschreibung von Prozessen in den porösen Komponenten von Brennstoffzellen.

2.1.1.3 Basics and applications of chemical reaction theory – simulation of dynamic processes in energy systems with MATLAB/Simulink

Herr Prof. Ralf Peters vertritt an der FH Aachen, Standort Jülich das Fachgebiet Energieverfahrenstechnik. Im Fach „Basics and Applications of Chemical Reaction Theory“ werden die Grundlagen der chemischen Verfahrenstechnik und dynamische Simulationen von Reaktionsapparaten miteinander verknüpft. In Vorlesung und Übung werden Brennstoffzellensysteme für den Fahrzeugantrieb mit Wasserstoff und in Kombination mit einer Brenngaserzeugung für die Bordstromversorgung basierend auf Diesel als Beispiele herangezogen. Die Veranstaltung ist für Studenten des Studiengangs Master of Science in Energy Systems verbindlich.

2.1.1.4 Brennstoffzellen – Die Zukunft der dezentralen Energieversorgung!?

Herr Prof. Ludger Blum vertritt an der FH Aachen, Standort Jülich das Fachgebiet Brennstoffzellentechnik. Im Bachelor-Studiengang „Energie- und Umwelttechnik“ sowie im Master-Studiengang „Energy Systems“ werden im Wahlpflichtfach „Brennstoffzellen für die dezentrale Energieversorgung“ Verständnis für Funktion, Aufbau, Verhalten, Vorteile und Nachteile der verschiedenen Brennstoffzellentypen sowie die Fähigkeit zur verfahrenstechnischen Auslegung von Brennstoffzellensystemen vermittelt. Die Lehrinhalte sind: Grundlagen der Brennstoffzelle, Brenngasbereitstellung, Wirkungsgrade, Funktion und Aufbau der verschiedenen Brennstoffzellentypen, Anforderungen an die Brennstoffzellenanlage, Verfahrenstechnik verschiedener Brennstoffzellenanlagen für unterschiedliche Anwendungen, Energiebilanzierung eines Brennstoffzellensystems und Stand der Anlagentechnik. Im Master-Studiengang nehmen durchschnittlich 20 – 30 Studenten das Veranstaltungsangebot wahr, im Bachelor-Studiengang durchschnittlich 10.

2.1.2 Lehrveranstaltungen von Lehrbeauftragten an Hochschulen

Der folgenden Tab. 3 können die wichtigsten Koordinaten der von Lehrbeauftragten des IEK-3 ausgerichteten Lehrveranstaltungen entnommen werden.

Name	Thema	Art/Umfang Semester		Hochschule
PD Dr. C. Korte	Physikalisch-Chemische Methoden zur Präparation und Charakterisierung von dünnen Schichten	S/2 Block	SS bis SS16	Justus-Liebig-Universität Gießen
	Physikalische Chemie I für Chemie (Lehramt) (V), Quantenmechanik	V/2 (Ü/1)	WS ab WS16/17	RWTH Aachen
Dr. M. Robinius	Technische Energiesystemanalyse	V/2 Block	SS ab SS16	RWTH Aachen
	Seminar Technische Energiesystemanalyse	S CP/5	WS ab WS16/17	RWTH Aachen
Dr. Martin Müller	Grundlagen und Technik der Brennstoffzellen	Ü/2	WS	RWTH Aachen
Dr. M. Peksen	Multiphysikalische Modellierung funktionaler Materialien und Komponenten	V/2	WS	FH Aachen Standort Jülich
Dr. T. Grube	Basics and Applications of Chemical Reaction Theory – Simulation of Dynamic Processes in Energy Systems with Matlab/Simulink	Ü/2	WS	FH Aachen Standort Jülich

CP: Credit Points

Tab. 3 Lehrveranstaltungen von Lehrbeauftragten an Hochschulen

2.1.2.1 Physikalisch-Chemische Methoden zur Präparation und Charakterisierung von dünnen Schichten

Privatdozent Dr. Carsten Korte hält an der Justus-Liebig-Universität Gießen im Fachbereich Biologie/Chemie eine Seminarveranstaltung. Das Seminar gibt eine grundlegende Einführung in die Präparation und Analyse dünner oxidkeramischer Schichten und deren Nutzung in technischen Anwendungen und richtet sich an alle interessierten Studentinnen und Studenten der Masterstudiengänge Chemie, Physik und Materialwissenschaft sowie an die Doktoranden der genannten Fachgebiete. Die wichtigsten Vakuumbedampfungsverfahren wie thermische Verdampfung, Sputtermethoden, chemische Gasphasenabscheidung (CVD), Molekularstrahlepitaxie (MBE) und Laserablation (PLD) werden behandelt. Ein besonderer Schwerpunkt liegt dabei auf der gepulsten Laserdeposition (PLD). Weitere Themen aus dem Bereich Präparation sind die Schichtmorphologie bestimmenden Wachstumsmodi für kleine und große Schichtdicken und deren Abhängigkeit von Oberflächenenergie und Oberflächendiffusion. Aus dem Bereich der analytischen Methoden werden die Röntgenbeugung (XRD, Polfiguren, Reflektometrie), die Elektronenmikroskopie (SEM, TEM) und die damit verbundenen Elektronenbeugungsverfahren (EBSD, SAED) vorgestellt. In

einer abschließenden Übung werden Beispiele aus der Literatur bearbeitet und gemeinsam diskutiert. An den in Blockform angebotenen Seminaren nahmen im Sommersemester 2015 und 2016 jeweils 4 Studenten teil.

2.1.2.2 Physikalische Chemie I, Quantenmechanik

Privatdozent Dr. Carsten Korte hält an der RWTH Aachen in der Fakultät, Mathematik, Informatik, Naturwissenschaften / Fachgruppe Chemie eine Vorlesung für den Lehramtsstudiengang Bachelor Chemie. Die Vorlesung Physikalische Chemie I aus dem Vorlesungsmodul Physikalische Chemie B wird im dritten Semester studiert. In der Vorlesung (2 SWS) und der dazugehörigen Übung (1 SWS, durchgeführt von Junior-Prof. F. Hausen / IEK-9) werden Kenntnisse auf den Gebieten „Aufbau der Materie“ und „Spektroskopie“ vermittelt. Dazu erwerben die Studierenden Grundkenntnisse der Quantenmechanik und lernen darauf aufbauend die spektroskopischen Verfahren der Chemie kennen sowie den Atomaufbau und die verschiedenen chemischen Bindungsformen. An der Vorlesung und dem Seminar im Wintersemester 2016/17 sind 29 Studenten angemeldet.

2.1.2.3 Technische Energiesystemanalyse

Herr Dr. Martin Robinius hält an der RWTH Aachen in Zusammenarbeit mit Herr Prof. Dr. Aaron Praktiknjo (Juniorprofessur für Energieressourcen- und Innovationsökonomik) eine Vorlesung und eine Übung zur Technischen Energiesystemanalyse. Die Kooperation erfolgt im Rahmen der Jülich Aachen Research Alliance (JARA), der Kooperation zwischen dem Forschungszentrum Jülich und der RWTH Aachen. Hier konnte in der Sektion ENERGY eine umfassende technische Expertise in den Bereichen Verfahrenstechnik, Maschinenwesen, Elektrotechnik, Geowissenschaften, Biotechnologie und Chemie gebündelt und die entsprechenden Forschungsinstitute für eine interdisziplinäre Zusammenarbeit gewonnen werden. Ausgelöst durch die zunehmenden Anforderungen an die Systemanalyse im Hinblick auf die umfassende Bewertung technologischer Innovationen, die für den wirtschaftlichen Wettbewerb mit konventionellen, im Markt befindlichen Technologien anstehen, kommt der Verschränkung von ingenieur- und naturwissenschaftlicher mit wirtschafts- und sozialwissenschaftlicher Kompetenz eine hohe Bedeutung zu. Dies soll den Studenten in angemessener Form im Rahmen der Lehrveranstaltungen näher gebracht werden.

2.1.2.4 Multiphysikalische Modellierung funktionaler Materialien und Komponenten

Rechnergestützte Modellierung ist für die Vorhersage und Simulation des multiphysikalischen Verhaltens von komplexen technischen Systemen zu einem wichtigen Werkzeug geworden. Daher ist das Ziel der Vorlesung von Dr. Peksen, die Studenten mit theoretischen und praktischen Kenntnissen der multiphysikalischen Modellierung vertraut zu machen. Dabei werden die erforderlichen Fähigkeiten zur Analyse technischer Probleme mit numerischen Simulationsprodukten vermittelt. Die Vorlesung umfasst die Methodik der Modellierung gekoppelter physikalischer Wechselwirkungen sowie die Simulation und Analyse von Werkstoffen und Bauteilen. Die Grundlagen der rechnergestützten Modellierung werden erläutert. Die Thermofluid-Festkörper-Kopplung wird mit fortgeschrittenen Techniken aufgeklärt. Das lineare und nicht-lineare Verhalten von Werkstoffen und Bauteilen unter thermofluidischer, statischer und dynamischer Belastung wird erklärt. Vertiefende

Modellierungsthemen werden behandelt. Die Vorlesung wird im Wintersemester für die Studierenden des Studiengangs Master of Science in Energy Systems als Wahlpflichtfach angeboten. Es wird erwartet, dass die Studenten eine schriftliche Prüfung und ein zusätzliches rechnergestütztes Projekt ablegen. Im Wintersemester 2015/2016 besuchten vier Studierende die angebotene Lehrveranstaltung.

2.2 Beiträge für die Information, Weiterbildung und Qualifizierung

Auf der Grundlage der multidisziplinären Kompetenzen und aufbauend auf den Erfahrungen der vergangenen Jahre führt das IEK-3 eine Vielzahl unterschiedlicher Veranstaltungen durch, wirkt an externen Veranstaltungen auf verschiedenen Ebenen mit oder arbeitet mit anderen Stellen vorbereitend, koordinierend bzw. beratend zusammen. Der Ausbau bei gleichzeitiger Schärfung dieser Aktivitäten ist Ziel bestehender und angestrebter Partnerschaften auf dem Gebiet der Information und Weiterbildung interessierter Zielgruppen.

2.2.1 Durchführung von Führungen, Seminaren und Praktika sowie von Informations- und Besichtigungsveranstaltungen

Die inhaltliche Ausrichtung von Veranstaltungen richtet sich nach den Erfordernissen und Wünschen der jeweiligen Zielgruppen. Dem zufolge reicht das Veranstaltungsspektrum von Informations- und Fortbildungsseminaren für Schüler, Studenten, Lehrer, Handwerker, Techniker, Ingenieure und Wissenschaftler bis hin zu Berufsfindungs- und Berufsorientierungspraktika für Schüler sowie Betriebs- und studienbegleitende Praktika für Studenten. Die Dauer der entsprechenden Veranstaltung kann bedarfsgerecht beginnend bei halbtägig auf mehrwöchig ausgedehnt werden. Die Tätigkeiten von Schülern oder Studenten während eines Praktikums können von der betreuten Begleitung durch technisch-wissenschaftliches Institutspersonals bis hin zur angeleiteten, selbständigen Bearbeitung ausgewählter praktischer Projekte reichen.

- Informations- und Besichtigungsveranstaltungen für Interessierte zum Thema „Jülicher FuE-Beiträge für die Brennstoffzellen- und Wasserstofftechnik“. Im Jahresdurchschnitt werden 60 Führungen mit im Mittel 20 Personen pro Führung von zwei Doktoranden des IEK-3 betreut.
- Berufsorientierungs- und Schülerpraktika für Schülerinnen und Schüler (2015: 1 Schülerpraktikant und 2016: 5 Schülerpraktikanten) aus Schulen der Region zum Thema „Fachberufe für die Brennstoffzellen- und Wasserstofftechnik“. Die labororientierten Betreuungsangebote decken ein breites, interdisziplinäres Themenspektrum ab und werden von den Schülerpraktikanten je nach Bedarf für eine oder zwei Wochen wahrgenommen.
- Eintägiges Experimentieren rund um die Brennstoffzelle im Rahmen der JuLab Forscherwoche „Energie – Forschen für die Zukunft“, die für 12 Schüler im Alter zwischen 14 und 17 Jahren in der Zeit vom 30.03. bis 2.04.2015 sowie für 10 Schüler im Alter zwischen 14 und 18 Jahren in der Zeit vom 21. bis 24.03.2016 stattfand.
- Eintägige, angeleitete Projektarbeit zu einem Brennstoffzellen-bezogenen FuE-Thema im Rahmen des JuLab Berufsfindungspraktikums 2015 unter dem Motto „Rund um die Welt der Brennstoffzelle“, das für 11 Schüler im Alter zwischen 14 und 17 Jahren in der Zeit vom 29.06. bis 3.07.2015 stattfand. Das ein Jahr später angebotene Praktikum unter dem Motto „Jülich bewegt“ wurde von 10 Schülern zwischen 14 und 17 Jahren besucht.

2.2.2 Mitwirkung an externen Veranstaltungen

Mit Übersichtsvorträgen und ausgesuchten Fachbeiträgen zum Themengebiet „Brennstoffzellen und Wasserstoff“ beteiligten sich zahlreiche Wissenschaftler des IEK-3 an einer Vielzahl externer Fortbildungs-, Workshop- und Schulungsveranstaltungen als eingeladene Fachreferenten und Experten.

- Fachkurse für Entwickler und Anwender mit Fachbezug zu Brennstoffzellen und Wasserstofftechnik im Rahmen der WBZU-Veranstaltungen in Ulm: Die Kurse wurden 2015 im März durchgeführt. Ein Wissenschaftler des IEK-3 lieferte jeweils zwei Fachreferate zu den Detailthemen „Lifetime Aspects of PEFC“ und „Hydrogen Supply“.
- Sommerschule „Erneuerbare Energien“ der Universität Bonn: Mit Studenten aus USA, Kanada und China führten zwei Wissenschaftler des IEK-3 im Juli 2015 Laborexperimente an Niedertemperatur-Brennstoffzellen durch. Im Juli 2016 beteiligten sich an einem vergleichbaren Experiment Studenten aus USA, Kanada, Japan, Korea und Singapur.
- Joint European Summer School JESS zum Thema „Brennstoffzellen-, Elektrolyse- und Batterie-Technologien“: Auf den Veranstaltungen jeweils in Athen/Griechenland berichtete im September 2015 und 2016 ein Wissenschaftler des IEK-3 in jeweils vier Referaten über neue Trends bei Elektrolyt-, Kathoden- und Anodenmaterialien, Zell- und Stack-Design sowie Zellfertigung für Niedertemperatur-Brennstoffzellen und Elektrolyseure.

2.2.3 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Der Aufbau, die Einrichtung und die Durchführung von Maßnahmen zur Aus- und Weiterbildung sowie zur Qualifizierung rund um das Themen „Brennstoffzellen- und Wasserstofftechnik“ entwickeln sich in dem Maße weiter, wie Anwendungen mit Brennstoffzellen und H₂-Infrastrukturen den Weg in den Markt finden. Diese Entwicklung wird durch das steigende Interesse bei der erzeugenden Industrie und bei relevanten Bildungseinrichtungen an Brennstoffzellen- und Wasserstoff-bezogener Fachkompetenz verstärkt. Um diesem Anspruch gerecht zu werden, haben sich spezielle Initiativen gebildet, die mit ihrer fachspezifischen Kompetenz und bereits verfügbaren Angeboten für eine Zusammenarbeit zur Verfügung stehen.

- Mitarbeit in der Initiative Qualifizierung Brennstoffzelle (IQ-BZ) bei den Bemühungen um eine Umsetzung von Informations- und Qualifizierungsmaßnahmen für Brennstoffzellen- und Wasserstofftechnologien
- Angebot und Vertrieb der CD-ROM „Brennstoffzelle“ durch das Bundestechnologiezentrum für Elektro- und Informationstechnik e.V., Oldenburg und die Vogel Industrie Medien GmbH, Würzburg mit dem Ziel der Informationsweitergabe, Akzeptanzsteigerung und Weiterbildung
- Unterstützung des jährlich von der EnergieAgentur.NRW durchgeführten Schülerwettbewerbs „Fuel Cell Box“ durch Begutachtung der theoretischen und praktischen Arbeitsergebnisse von 20 Schülerteams der finalen Wettbewerbsrunde. In Abb. 4 sind die siegreichen Schülerteams der Finalrunde 2015 und 2016 nach der Ehrung gemeinsam mit den Organisatoren zu sehen.



Abb. 4: Gruppenbilder der siegreichen Schülerteams der Wettbewerbe 2015 (links) und 2016 (rechts)

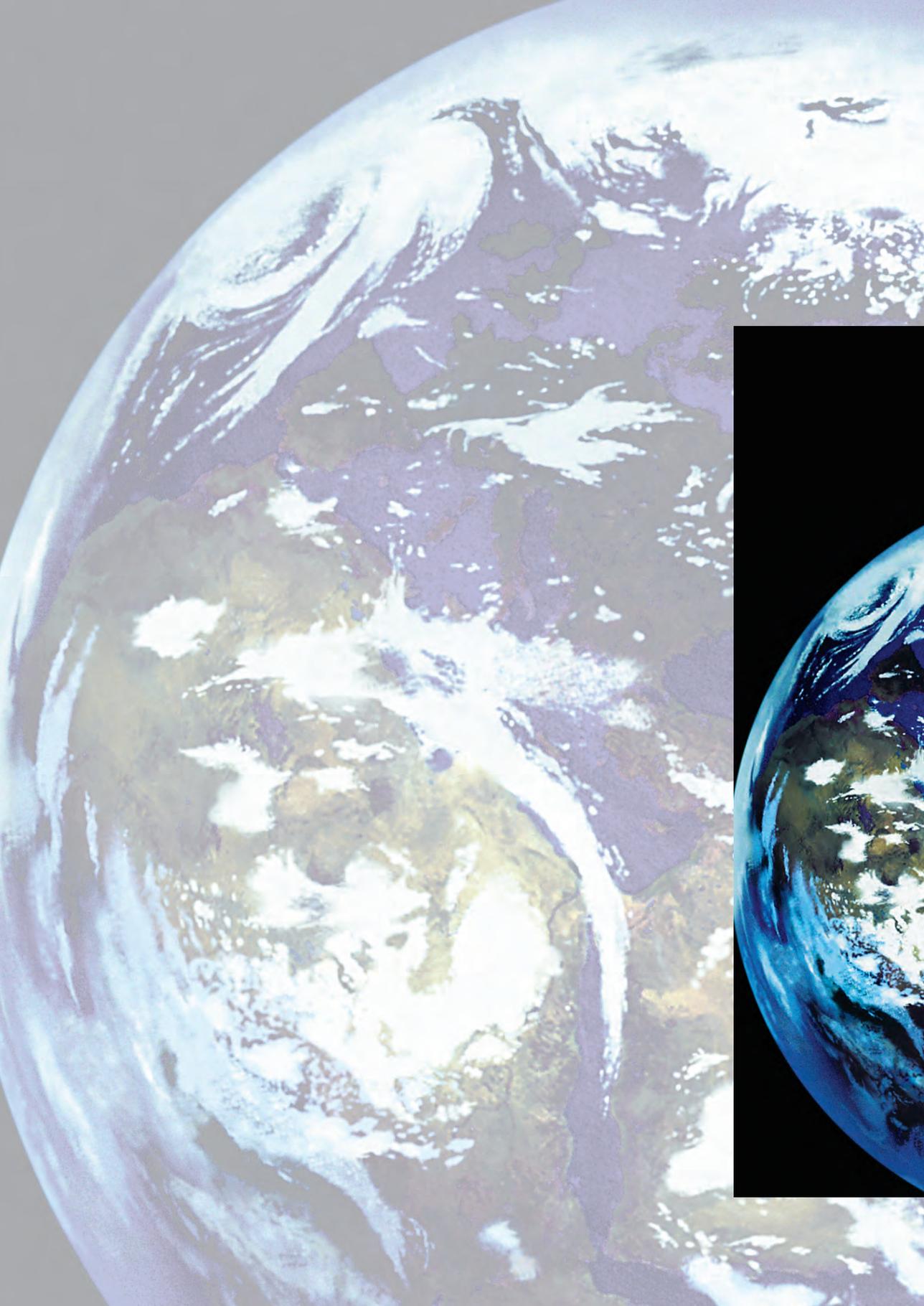
- Unterstützung des jährlich im Forschungszentrum Jülich durchgeführten Regionalwettbewerbs „Jugend forscht; Schüler experimentieren“ durch Begutachtung und Bewertung der theoretischen und praktischen Arbeitsergebnisse in den Disziplinen Technik, Arbeitswelt sowie Geo- und Raumwissenschaften.

2015 belegte Constantin Zborowska von der Willy-Brandt-Gesamtschule in Kerpen (links in Abb. 5) den ersten Platz bei Jugend forscht im Fachgebiet Geo- und Raumwissenschaften. Er überzeugte die Jury mit seinen Astronomie-Kenntnissen sowie seiner Arbeit zur Reproduktion des HR-Diagramms durch spektrale Untersuchung von Sternen der MKK-Klassifikation.

Marius Ziemke vom Städtischen Gymnasium Herzogenrath (rechts in Abb. 5) erreichte 2016 bei Jugend forscht im Fachgebiet Arbeitswelt den ersten Platz, indem er die Datenbrille „Google Glass“ mit bestehenden Systemen der Lagerhaltung kombiniert und damit den Lagerarbeitern die Möglichkeit gibt, gleichzeitig beidhändig zu arbeiten und über die Datenbrille Aufträge zu erhalten.



Abb. 5: Erstplatzierte der „Jugend forscht“ Regionalwettbewerbe 2015 und 2016: Constantin Zborowska (links) und Marius Ziemke (rechts)



Berichte

Wissenschaftlich-technische Berichte

- Festoxid-Brennstoffzellen
- Brenngaserzeugung und Systeme
- Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen
- Direktmethanol-Brennstoffzellen
- Wasserelektrolyse
- Verfahrens- und Systemanalyse
- Physikalisch-Chemische Grundlagen / Elektrochemie

3.1 Festoxid-Brennstoffzellen

3.1.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Im Rahmen des Programmthemas „Brennstoffzellen“ werden Zellen, Komponenten, Stacks und Systeme für die Hochtemperatur-Brennstoffzelle mit Festelektrolyt (SOFC) sowie für die Hochtemperatur-Elektrolyse mit Festelektrolyt (SOE) entwickelt. Dieses Thema ist strategisch auf die hocheffiziente Bereitstellung von elektrischer Energie für die mobile und stationäre Anwendung, sowohl dezentral als auch zentral, im Maßstab einiger Kilowatt bis mehrerer hundert Kilowatt ausgerichtet. Die Schwerpunkte der durchgeführten Arbeiten sind die Erhöhung der Leistungsdichte, lange Lebenszeiten, die Identifikation der Degradationsmechanismen im Stack und deren Vermeidung, fortgeschrittenes Design, sowie hochintegrierte Anlagentechnik. Die Entwicklungsarbeiten resultieren u.a. in verbesserten Werkstoffen für Zellen ebenso wie in thermomechanisch verbesserten Stacks, hochintegrierten Anlagenkomponenten und Demonstrationsanlagen. Wichtige flankierende Aktivitäten stellen die Modellierung mechanischer und thermischer Komponentenbelastungen sowie die Entwicklung und Charakterisierung von Komponenten für Brennstoffzellensysteme und deren Bewertung im Rahmen verfahrenstechnischer Analysen dar.

3.1.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.1.2.1 Tests mit Kassettenstacks

Als neuere Forschungslinie werden sogenannte Kassetten- oder Leichtbaustacks, die für den Einsatz in Fahrzeug-APUs (Auxiliary Power Units) vorgesehen sind, im sogenannten CS-Design entwickelt.

Mit Stack CS^V05-04 wird das neue CS^V-Design getestet. Abgesehen vom Deckblech (Ebene 5), das kathodenseitig mit MnO_x über WPS in Jülich beschichtet wurde, wurde die MCF (APS)-Schutzschicht erstmals durch den Projektpartner Turbo Coating (Italien) aufgebracht. Es wurden Zellen von SolidPower (Italien) verbaut. Die Ebenen 1 bis 4 zeigen gegenüber dem Vorgängerstack CS^V05-02 eine deutlich verbesserte Leistung, was offensichtlich auf die MCF (APS) Schutzschicht zurückzuführen ist. Der Vorgänger, der lediglich über eine MnO_x (WPS) Schutzschicht verfügte, zeigte eine vergleichbare Performance wie die ebenfalls mit MnO_x beschichtete Ebene 5. Nach einem Thermozyklus zeigten die Ebenen 1 bis 4 keine Leistungseinbuße, während Ebene 5 eine Abnahme von ca. 5% aufwies. Durch einen plötzlichen Einbruch der Zellspannung von Ebene 5 wurde der Lastbetrieb nach 1.428 h bei 0.5 A/cm² und 750 °C beendet. Die mittlere Alterung beträgt ca. 1 %kh⁻¹ (ohne Berücksichtigung von Ebene 5). Bei Raumtemperatur wird ein Kurzschluss zwischen Ebene 5 und Deckblech festgestellt. Die gesamte Betriebsphase ist in Abb. 6 dargestellt und die Kennlinien zu Beginn und am Ende in Abb. 7.

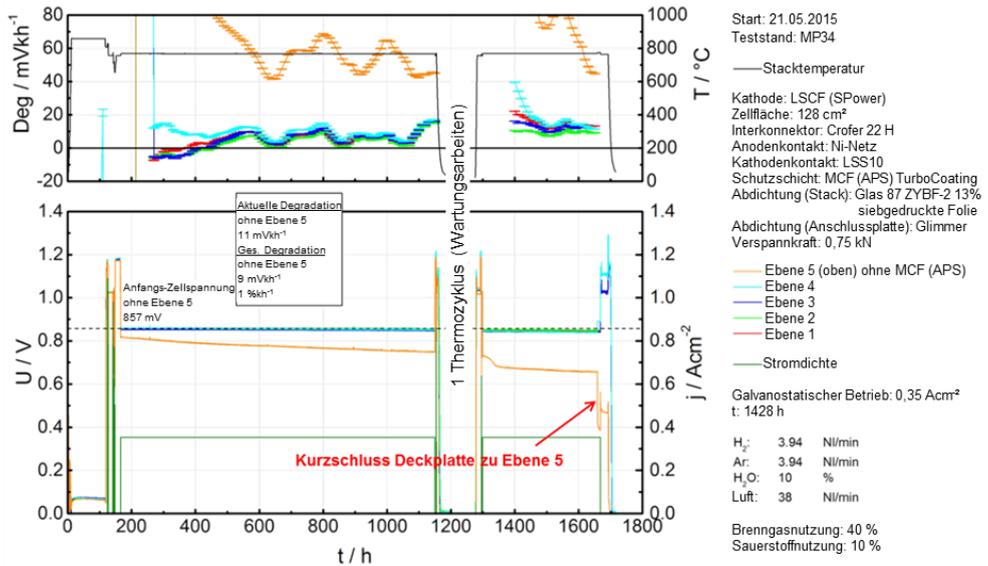


Abb. 6: SOFC-Stack CS^V05-04, Test No. SK 570: Lastbetrieb

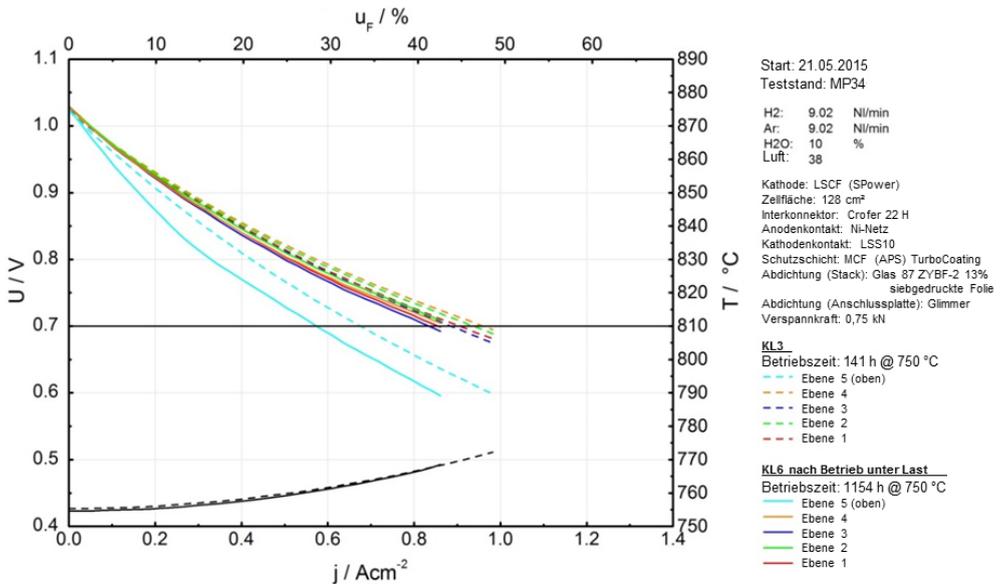


Abb. 7: SOFC-Stack CSV05-04, Test No. SK 570: Charakterisierung vor und nach Lastbetrieb

Bei der anschließenden Nachuntersuchung konnte als Ursache für den Kurzschluss ein Metallpartikel am Rand der Kassette identifiziert werden (siehe Abb. 8). Das Partikel stammt vom Laser-Schweißprozess der Kassettenschweißung.

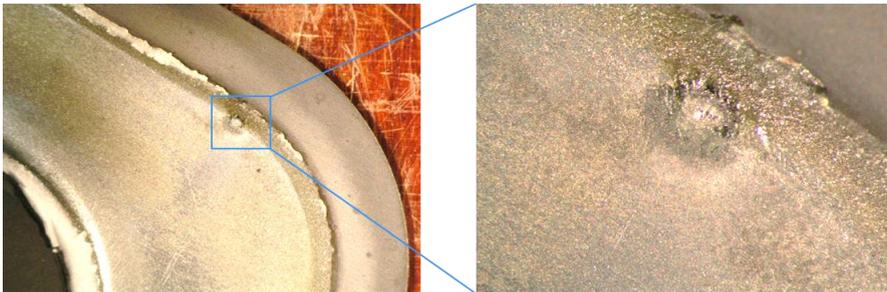


Abb. 8: Stack: CS^V05-04, Deckblech-Unterseite: Kurzschlussstelle zwischen Deckblech Unterseite und Kathodenseite der Kassette

Mit einem ersten 10-Ebenen Stack (Stacktest CS^V10-01) konnte ebenfalls eine gute Performance erzielt werden, allerdings hatte auch hier eine Ebene (Ebene 6) Kurzschluss, was laut Nachuntersuchung ebenfalls auf einen Metallpartikel am Rand der Kassette zurückzuführen war. Durch verbesserte Kontrolle der Fertigungsprozesse soll dies in Zukunft vermieden werden. Wegen eines gebrochenen Heizelements im Ofen MP36 musste der Stack in einen anderen Ofen (MP34) umgesetzt werden. Hier konnte er trotz Kurzschluss mehrere hundert Stunden betrieben werden (siehe Abb. 9). Ein Thermozyklieren war allerdings nicht möglich. Dieser Versuch soll wiederholt werden.

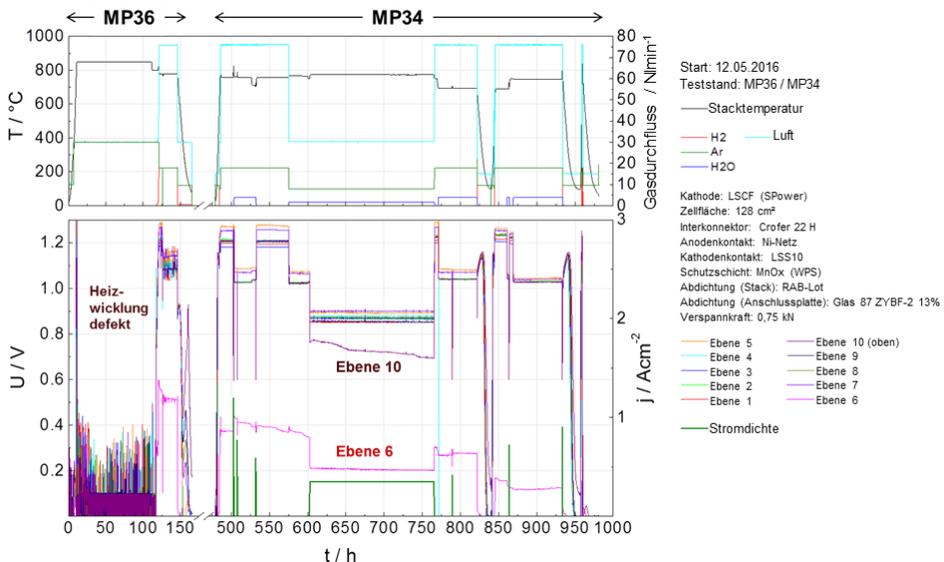


Abb. 9: Stacktest CS^V10-01: Langzeitverhalten

Eine bekannte Schwachstelle des Kassettendesigns ist die unzureichende Beständigkeit des für die Zellfügun verwendeten Silberlotes. Durch die beim CS^V-Design realisierten

konstruktiven Änderungen war es nun möglich, auch die Zellen mit Glaslot in den Rahmen einzulöten und die Metallteile anschließend zu verschweißen, ohne dass die Fügung beschädigt wird. Dies konnte in einem 3-Ebenen Dummy-Stack (CS^V03-01) erfolgreich gezeigt werden. Für diesen ersten Versuch waren Zellen ohne Kathode verwendet worden, weshalb keine elektrochemischen Tests durchgeführt werden konnten. Der Stack wurde insgesamt 53 Thermozyklen mit unterschiedlichen Heizraten unterzogen, inklusive mehrmaligen Ausbaus aus dem Teststand für Dichtigkeitsuntersuchungen (siehe Abb. 10). Über die gesamte Betriebszeit konnte keine nennenswerte Verschlechterung der Dichtigkeit festgestellt werden. Es ist ein 5-Ebenen-Stack in Vorbereitung, mit dem dann auch eine elektrochemische Charakterisierung durchgeführt werden kann.

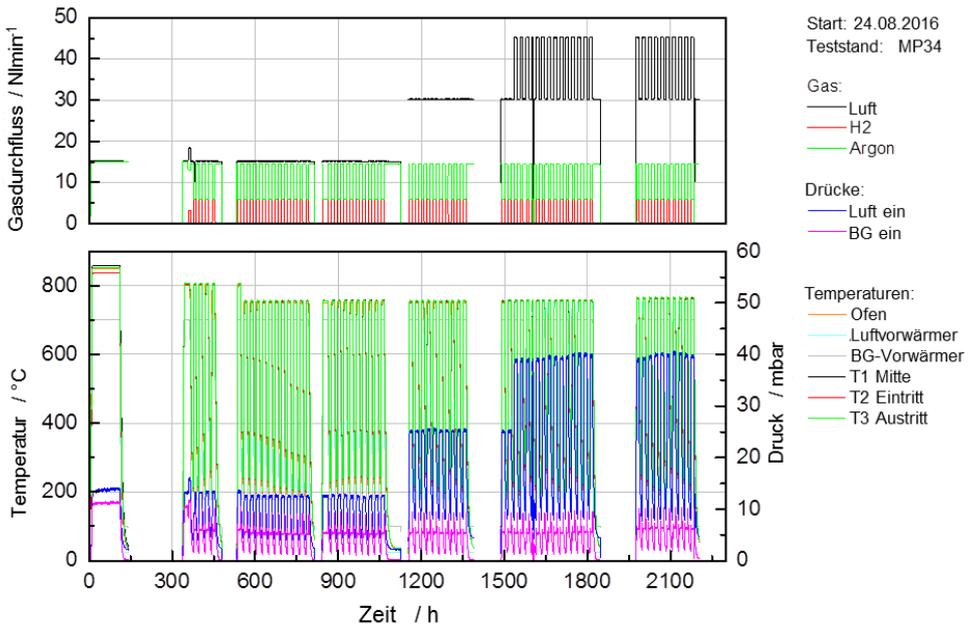


Abb. 10: CS^V03-01: Versuchsdaten über 53 Thermozyklen

3.1.2.2 Modellierung von Kassettenstacks

Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung eines multiphysikalischen Gesamtmodells zur Vorhersage des strukturellen Verhaltens eines SOFC-Kassettenstacks unter thermischer Belastung. Für die numerische fluiddynamische und thermomechanische Analyse eines SOFC-Stacks wurde ein dreidimensionales Gesamtmodell entwickelt. Dieses besteht aus zwei diskretisierten Einzelmodellen, einem fluiddynamischen Finite-Volumen-Modell und einem strukturellen Finite-Elemente-Modell, die numerisch gekoppelt sind. Mit dem Gesamtmodell, das einen zwei-Zeller-Stack beschreibt, kann das Deformationsverhalten der Struktur unter thermomechanischen Lastbedingungen beschrieben werden. In Abb. 11 ist der Aufbau eines Stackes dargestellt.

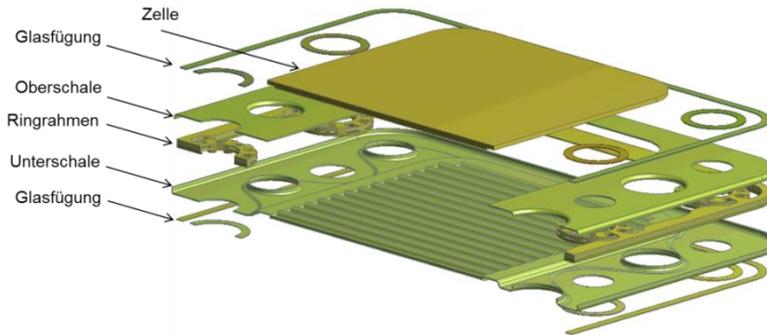


Abb. 11: Explosionszeichnung der Kassette

Die im Stack auftretenden räumlichen Temperaturfelder und Temperaturgradienten wurden mittels gekoppelter fluiddynamischer Analyse berechnet. Dies ist beispielhaft in Abb. 12 dargestellt.

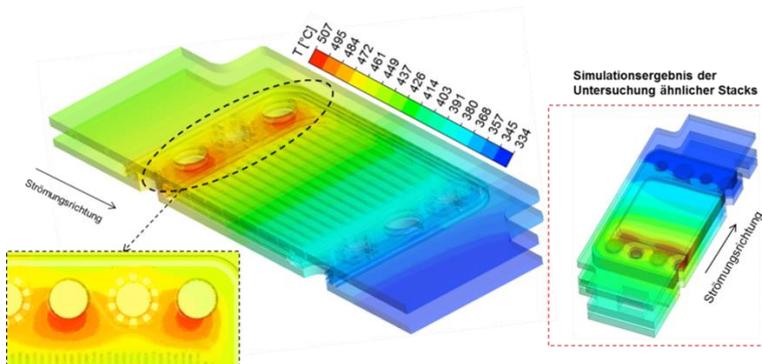


Abb. 12: Temperaturverteilung im Stack

Um die quasi-statische Berechnung durchzuführen, wurde die Temperatur als thermische Last auf das strukturmechanische FE-Modell übertragen. Die gekoppelte fluiddynamische Simulationsberechnung zeigt, dass das aufgestellte Modell für die Untersuchung des zeitabhängigen thermischen Stack-Verhaltens gut geeignet ist. Das fluiddynamische Modell kann eingesetzt werden, um die räumliche Temperaturverteilung im Stack in den verschiedenen stationären und transienten Prozessphasen zu bestimmen. Die ermittelten Temperaturprofile dienen als thermische Last und definieren damit einen Teil der erforderlichen Randbedingungen, die für die Durchführung der thermomechanischen Analyse auf Basis der FEM benötigt werden. Die Ergebnisse der fluiddynamischen Berechnungen zeigen, dass infolge des großen Temperaturgradienten der Einströmbereich der heißen Gase eine gefährdete Zone darstellt, in der hohe Spannungen zu erwarten sind. Die Modellvalidierung auf Basis der experimentellen Daten bestätigt die ermittelten Simulationsergebnisse.

Auf Basis dieser Modelle wurden die Prozessphasen: Aufheizen, Betrieb und Abkühlen untersucht. Bei einer Rampe von 7 K/min von 50 °C auf 750 °C ergibt sich eine Aufheizzeit von 6000 s (1,67 h). Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass, wie in Abb. 13 dargestellt, die höchsten Spannungen während der Aufheizphase auftreten.

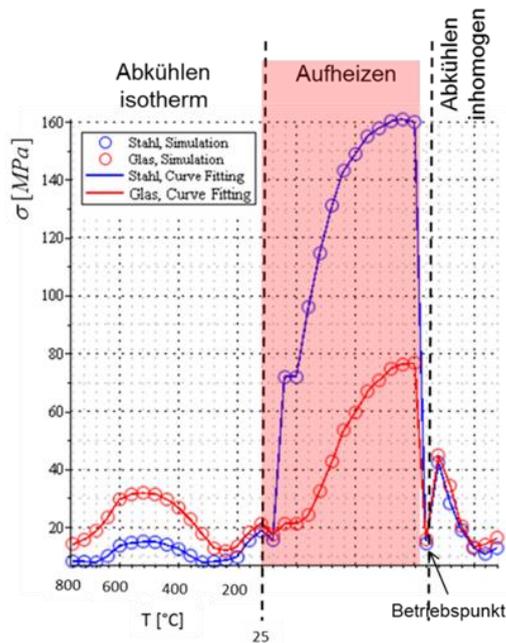


Abb. 13: Verlauf der Spannung über die thermische Last während eines Prozesszyklus

3.1.2.3 Langzeittests im F10-Design

Im Oktober 2015 hatte der aus zwei Zellen bestehender Short Stack F1002-97 mit Wasserstoff bei einer Stromdichte von $0,5 \text{ Acm}^{-2}$ eine Betriebszeit von 70.000 Stunden erreicht. Mit diesem neuen Rekordwert löste der Stack aus dem Jahr 2007 den bisherigen Rekordhalter ab: Eine Rohrzelle der Siemens Westinghouse Power Corporation (SWPC), die ca. 69.000 Stunden in Betrieb war.

Über die gesamte Laufzeit wies der Stack eine geringe Alterung von ca. 0,6% pro 1000 Betriebsstunden auf, was sich in einer Absenkung der Spannung und dem damit verbundenen Leistungsverlust zeigt (siehe Abb. 14). Inzwischen ist der Stack mehr als 83.000 h in Betrieb.

Der weiterentwickelte 4-Ebenen Short Stack F1004-21 aus dem Jahr 2010 mit einer verbesserten Schutzschicht auf der Kathodenseite konnte über 34.500 h betrieben werden (siehe Abb. 14). Während dieser Zeit betrug die mittlere Alterung $0,3\%/kh$. Allerdings beschleunigte sich ab ca. 28.000 h die Alterung vor allem bei einer Ebene, so dass der Versuch abgebrochen werden musste. Die Nachuntersuchung ergab, dass Mangan aus der Kontaktschicht durch den Elektrolyten bis zur Anodenseite diffundiert war und dabei den Elektrolyten mechanisch zerstört hatte. Diese Ergebnisse lieferten wichtige Informationen für

die Werkstoffauswahl und den Aufbau zukünftiger Stacks. Der 4-Ebenen Short Stack F1004-67, bei dem die Mangan-haltige Kontaktschicht durch LSCF ersetzt wurde, ist inzwischen seit ca. 15.000 h mit 0,25% Alterung pro 1000 h in Betrieb (siehe Abb. 14).

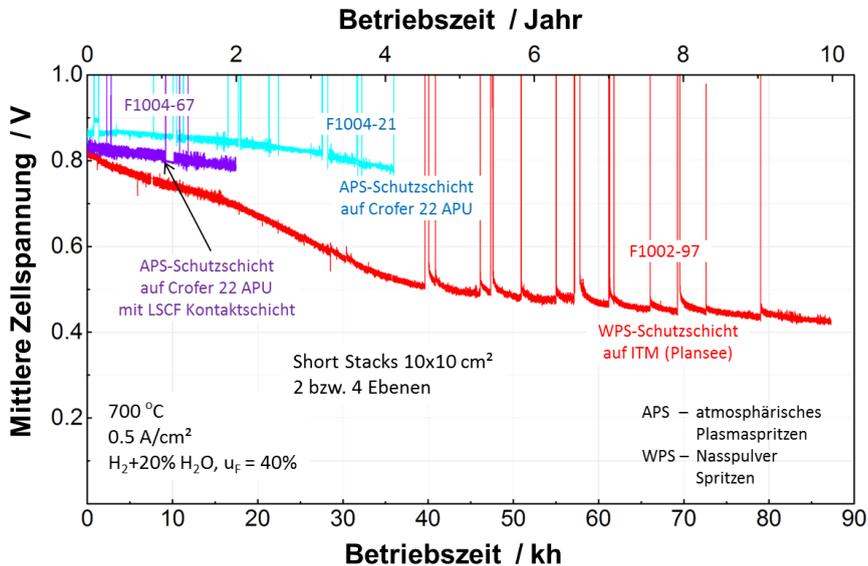


Abb. 14: Langzeitverhalten der Stacks F1002-97, F1004-21 und F1004-67

3.1.2.4 SOE – Hochtemperaturelektrolyse

Ein Solid-Oxide-Electrolysis- (SOE-) Stack bestehend aus Brennstoffelektroden-gestützten Zellen (ASCs im Brennstoffzellenmodus) wurde im F10-Design (F1002-165) aufgebaut. ASCs basieren auf Ni/8YSZ (8 Mol-% Yttriumoxid-stabilisiertem Zirkonoxid) mit einer LSCF-Luftelektrode ($\text{La}_{0.58}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-5}$) und 8YSZ-Elektrolyt. Eine Gadolinium-dotierte Ceroxid- (GDC) ($\text{Ce}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{O}_{1.9}$) Sperrschicht wurde zwischen 8YSZ und LSCF mittels physikalischer Gasphasenabscheidung (PVD) aufgebracht.

Der Stack wurde in einer Ofenumgebung sowohl im Brennstoffzellen- als auch im Elektrolyse-Modus zwischen 700 und 800 °C mit 50% befeuchtetem Wasserstoff charakterisiert (siehe Abb. 15). Der Elektrolysebetrieb wurde zuerst bei drei Temperaturen (700, 750 und 800 °C) mit einer Stromdichte von $-0,5 \text{ Acm}^{-2}$ und einer Dampfnutzungsrate von 50% durchgeführt. Die Betriebszeit jeder Periode betrug mehr als 500 h. Der Langzeit-Elektrolyse-Betrieb wurde dann bei 800 °C mit der gleichen Stromdichte und Dampfnutzungsrate durchgeführt. Die mögliche Auswirkung der reversiblen Betriebsweise auf die Alterung im SOE-Modus wurde durch den zwischenzeitlichen Betrieb des Stacks im Brennstoffzellenmodus für mehr als 1000 h untersucht. Der Spannungsverlauf im anschließenden Elektrolysebetrieb lässt allerdings keine Veränderung des Langzeitverhaltens erkennen. Für die Degradationsanalyse wurde die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) mit anschließender Analyse der Verteilungsfunktion der Relaxationszeiten (DRT) durchgeführt. Nach mehr als 13.000 h Betrieb zeigte der Stack eine durchschnittliche Spannungsdegradation von 0,7%/kh (siehe Abb. 16).

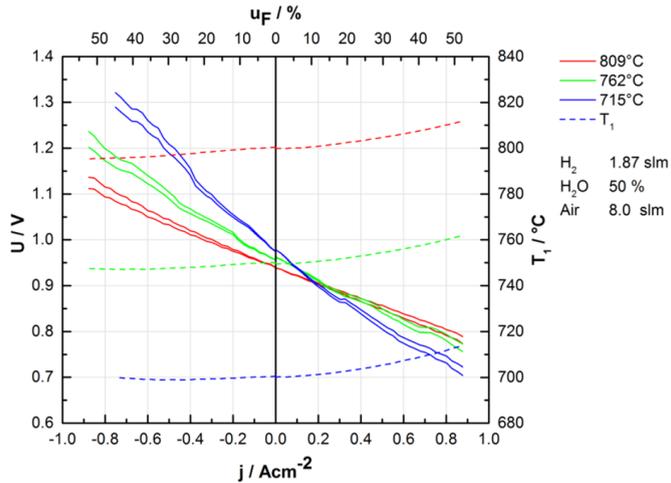


Abb. 15: Stackcharakteristik (SOFC und SOEC) mit 50% befeuchtetem H₂ bei Ofentemperaturen von 715 °C, 762 °C und 809 °C.

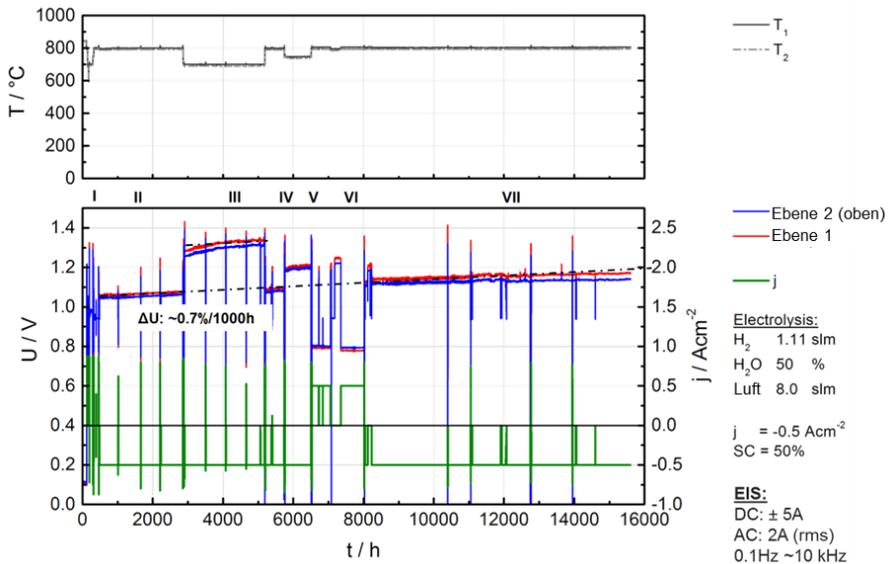


Abb. 16: Stack F1002-165: Langzeitverhalten im Elektrolyse (Phasen I, II, III, IV, VII) und im Brennstoffzellenmodus (Phasen V, VI) (H₂O:H₂ = 1:1, Elektrolyse: -0.5 Acm⁻², 50% Dampfnutzung; Brennstoffzellenmodus: +0.5 Acm⁻², 50% Brennstoffnutzung)

Basierend auf den Ergebnissen aus Einzelzellmessungen sowie früheren DRT-Studien mit F-Design-Shortstacks (0,1-10 kHz) konnten die drei mittels DRT beobachteten Prozesse, die in Abb. 17 zu erkennen sind, identifiziert werden. Sie sind in Tab. 4 aufgelistet. Ein weiterer Prozess, der in der Tabelle nicht aufgeführt ist, konnte bei den Versuchen zwischen 0,1 Hz

und 1 Hz beobachtet wurde, wenn der Sauerstoffpartialdruck unter 5% liegt. Dieser Prozess entspricht der Gasdiffusion in der Lufterlektrode.

Die Analyse zeigte, dass die Degradation in erster Linie auf den Anstieg des ohmschen Widerstands zurückzuführen ist. Eine kleine Zunahme der Lufterlektrodenpolarisation konnte ebenfalls festgestellt werden.

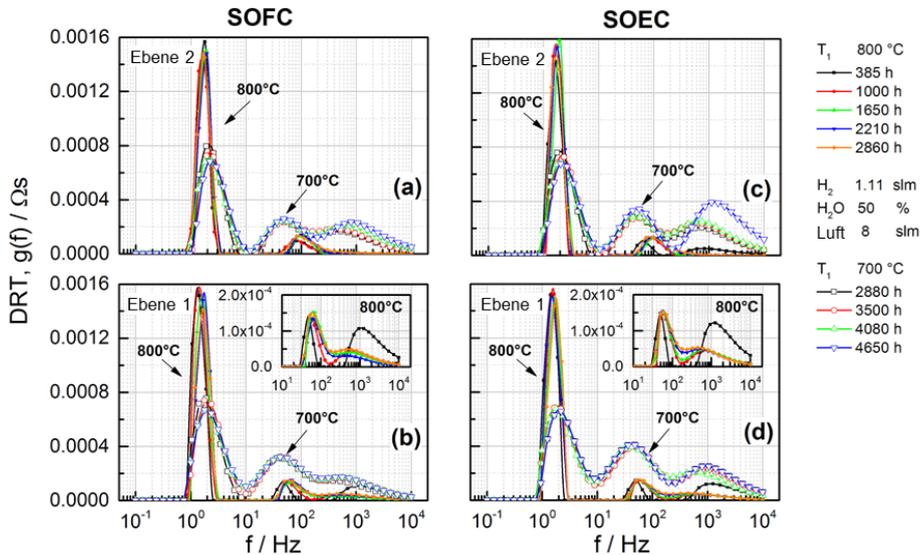


Abb. 17: Berechnete Verteilungskurven für beide Elektrodenschichten bei 800 °C und 700 °C im SOFC und SOE Modus unter Benutzung des Realteils der Impedanzspektren;
 (a) Ebene 2 im SOFC Modus; (b) Ebene 1 im SOFC Modus; (c) Ebene 2 im SOEC Modus; und (d) Ebene 1 im SOEC Modus.

Prozess	Frequenzbereich	Physikalischer Prozess
I	1-10 Hz	Gasdiffusion im Substrat (Brenngaselektrode) Überlappung mit Gasnutzungsimpedanz
II	10-300 Hz	Chemischer Oberflächenaustausch von O ₂ und O ²⁻ Diffusion in der Struktur der Lufterlektrode („Bulk diffusion“)
III	200-1000 Hz	Überlagerte Prozesse (inclusive Gasdiffusion), gekoppelt mit Ladungsaustauschreaktionen und Ionen-transport im YSZ (der Funktionsschicht der Brenngaselektrode)

Tab. 4: Prozesse, die bei Stack F1002-165 mittels DRT analysiert wurden

3.1.2.5 Systemtechnik

5 kW System mit Anodenabgasrezirkulierung

Die Rückführung von Anodenabgas innerhalb eines SOFC-Systems hat zwei wesentliche Vorteile. Zum einen wird unbenutzter Brennstoff vom Stackauslass zum Stackeinlass zurückgeführt. Daher kann die Menge an frischem Kraftstoff, die in das System eingespeist wird, reduziert werden. Dies erhöht die Brennstoffausnutzung des Systems und ermöglicht einen elektrischen Wirkungsgrad von mehr als 60%. Zweitens kann der rezirkulierte elektrochemisch erzeugte Dampf für den Dampfreformierungsprozess verwendet werden. So ist im Betrieb eine externe Dampferzeugung nicht mehr notwendig. Eine Herausforderung stellt dabei die hohe Anodenabgastemperatur von mindestens 700 °C dar, die die Verwendung von handelsüblichen Gebläseeinheiten verbietet. Daher wird in der Literatur die Verwendung von Ejektoren diskutiert. Es gibt auch Ansätze, Hochtemperaturgebläse zu entwickeln oder kommerzielle Gebläse in Kombination mit einem Wärmetauscher zu verwenden.

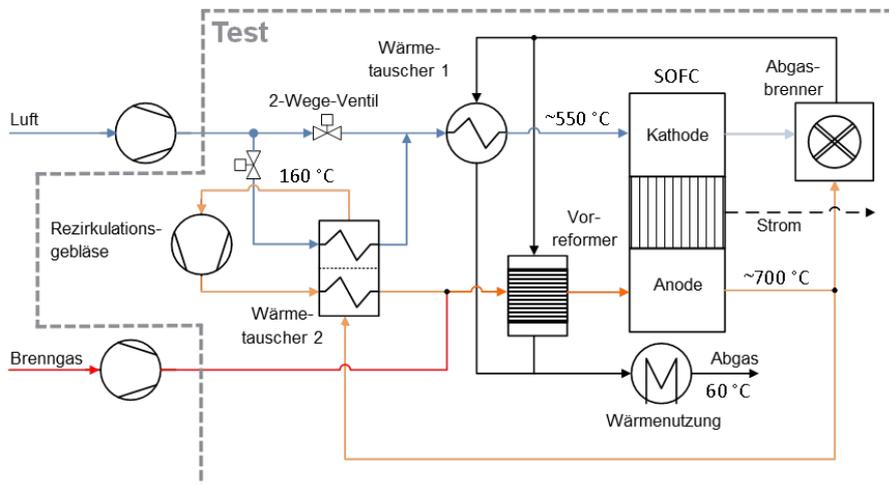


Abb. 18: Fließbild des SOFC Systems

Es wurde ein SOFC-System mit einer Anoden-Abgas-Rezirkulationsschleife aufgebaut. Die Anoden-Abgasrückführungsschleife umfasst Wärmetauscher und ein Niedertemperatur-gebläse, das bei Temperaturen bis zu 200 °C arbeitet. Mit diesem System wurden Versuche durchgeführt, um den Einfluss der Rezirkulationsrate und der Brennstoffausnutzung auf den Systembetrieb zu analysieren. Während der Tests wurde die Brennstoffnutzung des Systems auf 90 bis 93% eingestellt, während die Rezirkulationsrate zwischen 73 und 82% variierte. Die Testergebnisse zeigen, dass Änderungen der Rezirkulationsrate beispielsweise die Zellspannungen, die kathodenseitige Kühlluftmenge und die elektrische Effizienz beeinflussen. Grundsätzlich verringern bei hoher Stromdichte hohe Rezirkulationsraten die Zellspannungen sowie die Kühlluftmenge. Der höchste elektrische Wirkungsgrad wurde mit einer hohen Systembrennstoffnutzung, einer niedrigen Rezirkulationsrate und infolgedessen einer hohen Stackbrennstoffnutzung erreicht.

Das Fließbild des analysierten SOFC-Systems ist in Abb. 18 zu sehen. Innerhalb des Prüfstandes wurde das gesamte System mit Ausnahme des Luft- und des Brenngasgebläses getestet.

Der gesamte Prüfstand ist in Abb. 19 abgebildet. Die Hochtemperaturkomponenten (Wärmetauscher 1, Vorreformer, SOFC und Abgasbrenner) sind in einem Modul integriert, dem sogenannten "Integrated Module". Der Rezirkulationsteil befindet sich vorne und umfasst eine Elektronikbox, einen Wärmetauscher 2, zwei 2-Wege-Ventile, ein Umluftgebläse und ein Messgerät für die Rezirkulationsrate.



Abb. 19: Rezyklereinheit mit 5 kW Integriertem Modul im System

Die Auswirkungen der Anoden-Abgasrückführung auf den elektrischen Wirkungsgrad sind in Abb. 20 dargestellt. Die durchgezogenen Linien stellen den gemessenen Wirkungsgrad dar. Dieser umfasst die gemessene Leistungsabgabe des Stacks und den gemessenen Leistungsbedarf des Rezirkulationsgebläses. Die gestrichelten Linien zeigen die Effizienz eines kompletten Systems, einschließlich Luftgebläse (angenommener Wirkungsgrad 27%), zusätzlichem elektrischem Leistungsbedarf des Systems (angenommen mit 50 W) und Wechselrichter (angenommener Wirkungsgrad 94%). Die Temperaturen zeigen die durchschnittliche Stackmassentemperatur für jeden Test.

Bei einem konstanten Strom von 90 A und einer konstanten Systembrennstoffnutzung von 90% (linke Abbildung) erhöht eine Verringerung der Rezirkulationsraten den elektrischen Wirkungsgrad auf bis zu 64%. An diesem Punkt ist der berechnete System-Nettowirkungsgrad ca. 59%. Abb. 20 zeigt auch den Wirkungsgrad bei einer Systembrennstoffnutzung von 93%. Bei der gleichen Rezirkulationsrate ist der Wirkungsgrad höher als bei einer Systembrennstoffnutzung von 90%. Daraus kann man folgern, dass die höchsten Wirkungsgrade bei hoher Systembrennstoffnutzung und niedrigen Rezirkulationsraten erreicht werden. Abb. 20 zeigt auch die elektrischen Wirkungsgrade bei verschiedener DC-Stackleistung. Durch eine Erhöhung der Stacktemperatur und eine Verringerung der Rezirkulationsrate ist ein nahezu konstanter elektrischer Wirkungsgrad über einen breiten Leistungsbereich erreichbar. Die höchste Gleichstromleistung betrug

4 kW. Dieser Messpunkt korrelierte mit einer mittleren Stacktemperatur von 762 °C, einer Rezirkulationsrate von 73% und ergab einen gemessenen Wirkungsgrad von 60%.

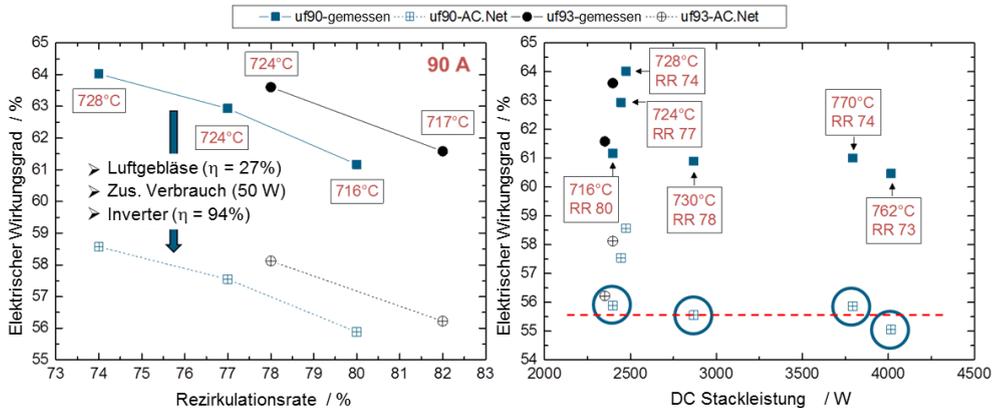


Abb. 20: Elektrischer Wirkungsgrad bei unterschiedlichen Rezirkulationsraten und einem konstanten Strom von 90 A (links) / Elektrischer Wirkungsgrad bei unterschiedlicher DC-Stackleistung und unterschiedlichen Rezirkulationsraten (rechts)

Das System wurde für mehr als 2.000 h getestet und hat folgende Ergebnisse gezeigt:

- Eine Anoden-Abgasrückführung in Verbindung mit dem Jülicher "Integrated Module" ist realisierbar.
- Die entwickelte Recycling- und Regelungsstrategie funktioniert gut.
- Hohe Rezirkulationsraten führen zu einem reduzierten Kühlluftbedarf des Stacks.
- Der Stack kann Anodengaseintrittstemperaturen von 500 °C tolerieren.
- Höchste elektrische Wirkungsgrade werden bei hoher Systembrennstoffnutzung in Verbindung mit niedrigen Rezirkulationsraten erreicht
- Konstante Wirkungsgrade sind über einen weiten Leistungsbereich möglich (mit Temperaturerhöhung im Betrieb)
- Elektrische Nettowirkungsgrade über 60% sind erreichbar (mit neuem Stack)

5 kW Systemtest mit Wasserstoff und hoher Brenngasnutzung

Zur Untersuchung des Verhaltens eines SOFC Stacks in Systemumgebung beim Betrieb mit Wasserstoff und hoher Brenngasnutzung (was auch ein Betriebszustand im rSOC-Betrieb sein kann) wurde ein 5 kW Stack (F²⁰³⁶⁻⁰⁸) in die 20 kW Anlage in Kombination mit dem Integrierten Modul eingebaut.

Dieser Stack wurde aus zwei Substacks mit jeweils 18 Zellebenen (Zellgröße 20x20 cm²) aufgebaut. Damit sollte auch das Substack Konzept für die nächste Generation der 15 kW Stacks erprobt werden.

Die einzelnen Substacks wurden zunächst im Ofen einzeln gefügt und charakterisiert. Die Kennlinien beider Substacks, gemessen mit Wasserstoff mit 20 % Befeuchtung, sind in Abb. 21 für eine Ofentemperatur von 700 °C dargestellt. Beide zeigen ein sehr vergleichbares Verhalten, so dass sie ohne Probleme als ein Gesamtstack betrieben werden

können. Zur Überprüfung, ob ein Betrieb bei hoher Brenngasnutzung möglich ist, wurden beide Sub-Stacks auch für einige Stunden bei Brenngasnutzungsgraden von 40, 70 und 80 % betrieben. Abb. 22 zeigt den zeitlichen Verlauf für Substack S2. Bei 80 % Brenngasnutzung und $0,5 \text{ Acm}^{-2}$ liegen die Zellspannungen bei 800 bis 830 mV und verlaufen sehr stabil.

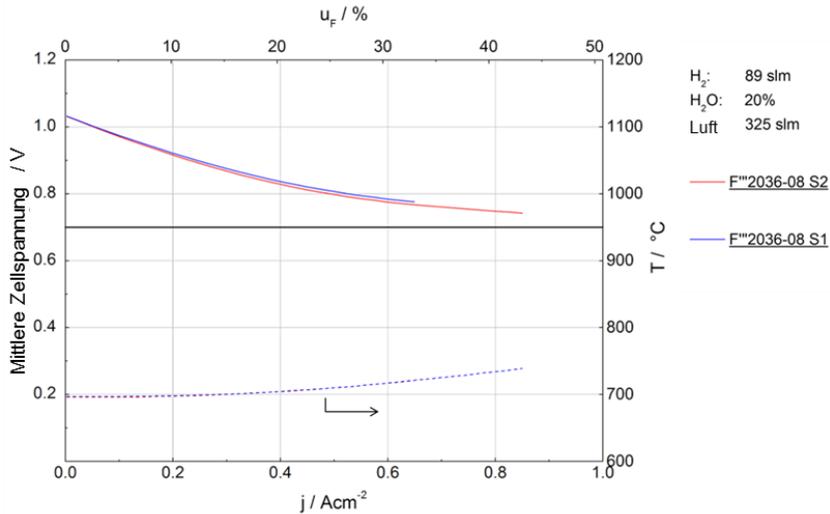


Abb. 21: F²⁰³⁶⁻⁰⁸: Performance von Submodul S1 und S2 bei 700 °C im Ofen

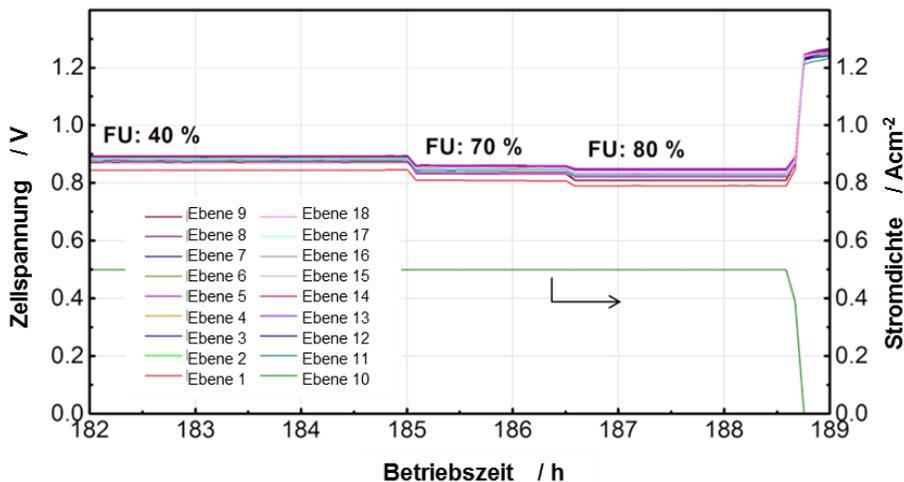


Abb. 22: F²⁰³⁶⁻⁰⁸ S2: Stackverhalten als Funktion der Brenngasnutzung bei Betrieb mit trockenem Wasserstoff bei 700 °C im Ofen

Da die 20 kW Anlage und die dafür entwickelten Komponenten des integrierten Moduls (Luftvorwärmer, Vorreformer und Nachbrenner) verwendet werden sollten, wurde der Stack

im Gegenstrom betrieben. Die Kathodenluft wurde auf ca. 520 °C vorgewärmt. Der Wasserstoff wurde im abgasbeheizten Vorreformer (der hier nur als Wärmetauscher arbeitete) auf ca. 300 °C vorgewärmt. Mit diesen Temperaturen treten die Gase in den Stack ein. Um die Luftmenge auf einen Luftüberschussfaktor von ca. 5 zu beschränken, was aus Gründen des Wirkungsgrads und des zulässigen Überdrucks im Stack erforderlich ist, muss mit einem Temperaturunterschied zwischen Luft-Einlass und Luft-Auslass von mindestens 200 K gefahren werden. Abb. 23 zeigt den Temperaturverlauf in einer Interkonnektor in der Mitte des Stacks. Die Thermoelemente stecken in 10 mm tiefen Bohrungen, so dass die Temperatur am Rand der Zellen gemessen wird. Ergebnisse von Stackmodellierungen lassen erwarten, dass die Maximaltemperatur in der Mitte ca. 20 K höher liegt. Die Temperatur am Rand der Zelle liegt am Lufteintritt bei ca. 630 °C und am Luftaustritt (= Brenngaseintritt) bei ca. 810 °C. Der Stack wurde bei 0,5 Acm² bei einer Brenngasnutzung von 80 % betrieben. Die Verläufe von Leistung, Temperatur und mittlerer Zellspannung sind in Abb. 24 dargestellt. Die Leistung liegt mit anfangs 4,9 kW bei einer mittleren Zellspannung von 760 mV etwas unter den aus den Vorversuchen erwarteten Werten. Dies ist auf die in großen Bereichen des Stack unter 650 °C liegende Temperatur zurückzuführen. Es ist ein Abfall der Spannung von ca. 1,8%/kh zu beobachten. Die Ursache hierfür muss bei der Post-Test Analyse geklärt werden.

Auf Grund einer Störung in der Anlagenperipherie kam es zu einer unkontrollierten Abschaltung, bei der eine Zelle beschädigt wurde. Deshalb musste der Versuch nach ca. 1.170 Betriebsstunden beendet werden.

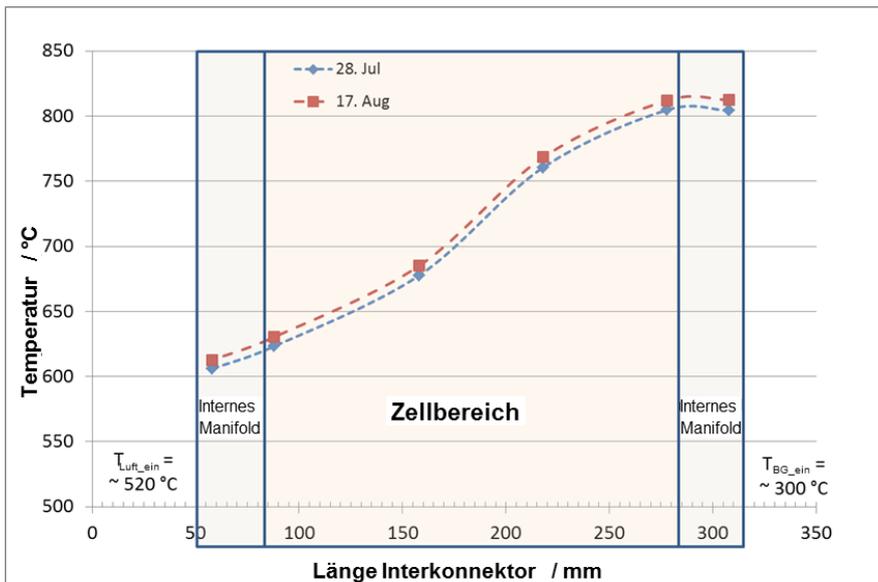


Abb. 23: F2036-08: Temperaturverteilung in eine Zellebene in der Mitte des Stacks bei 5 kW DC-Leistung (gemessen 10 mm tief im Interkonnektor)

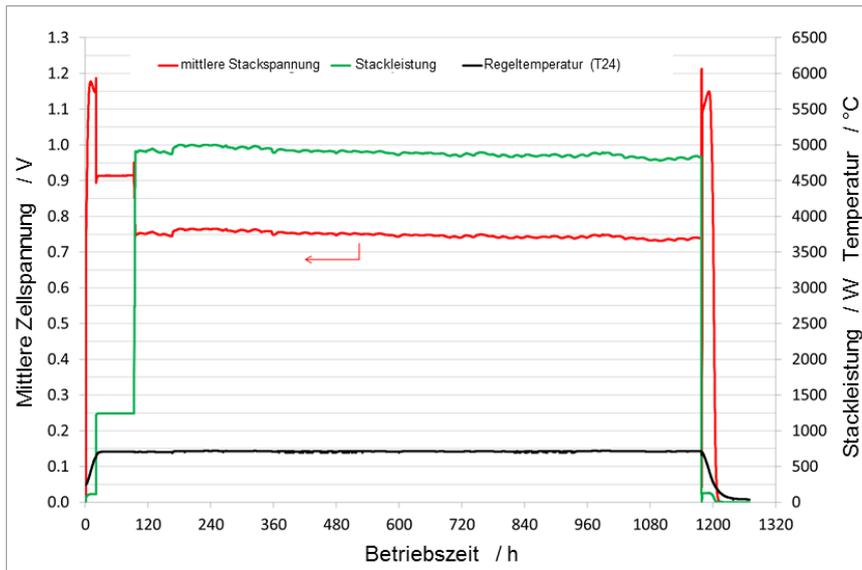


Abb. 24: F2036-08: Verhalten mit Wasserstoff und 80% Brenngasnutzung bei 0,5 Acm⁻² als Funktion der Betriebszeit

3.1.3 Mitarbeiter und Tätigkeitsfelder

Name	Telefon-Nr. (02461-61-) e-mail Adresse	Tätigkeitsfeld
Prof. L. Blum	6709 l.blum@fz-juelich.de	Leiter der Abteilung Festoxid-Brennstoffzellen
A. Al-Masri	3774 a.al-masri@fz-juelich.de	Simulation von SOFC-Stacks, CFD und FEM
R. Deja	5291 r.deja@fz-juelich.de	Anlagensimulation, Entwicklung und Test von SOFC-Anlagenkomponenten
M. Engelbracht	4652 m.engelbracht@fz-juelich.de	Anlagensimulation, Entwicklung und Test von SOFC-Anlagenkonzepten
Dr. Q. Fang	1573 q.fang@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe Messtechnik SOFC, Elektrochemie, Test und Analyse
M. Frank	1573 ma.frank@fz-juelich.de	Anlagensimulation, Entwicklung und Test von rSOC-Anlagenkonzepten
I. Hoven	4053 i.hoven@fz-juelich.de	Elektrotechnik, Messdatenerfassung und Anlagensteuerung
Dr. V.N. Nguyen	8393 v.n.nguyen@fz-juelich.de	Chemische Verfahrenstechnik; Entwicklung und Test von Anlagenkomponenten

Fr. U. de Haart	5170 u.de.haart@fz-juelich.de	Test von SOFC-Stacks und Versuchsauswertung
Dr. M. Peksen	8732 m.peksen@fz-juelich.de	Simulation von Stacks und HT-Anlagenkomponenten, CFD und FEM
Ro. Peters	4664 ro.peters@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe Systemtechnik SOFC, Komponentenentwicklung, Anlagenauslegung, Anlagenbau und –test
Y. Yan	5487 y.yan@fz-juelich.de	SOFC, Elektrochemie, Imedanzmesstechnik, Test und Analyse

3.1.4 Wichtige Veröffentlichungen und Patente

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

Fang, Q., Berger, C.M., Menzler, N.H., Bram, M., Blum, L.

Electrochemical characterization of Fe-air rechargeable oxide battery in planar solid oxide cell stacks

Journal of Power Sources 336 (2016) 91-98

Peters, R., Deja, R., Engelbracht, M., Frank, M., Nguyen, V.N., Blum, L., Stolten, D.

Efficiency analysis of a hydrogen-fueled solid oxide fuel cell system with anode off-gas recirculation

Journal of Power Sources 328 (2016) 105-113

Blum, L., de Haart, L.G.J., Malzbender, J., Margaritis, N., Menzler, N.H.

Anode-Supported Solid Oxide Fuel Cell Achieves 70 000 Hours of Continuous Operation *Energy Technology* 4 (8) (2016) 939-942

Nguyen, V.N., Deja, R., Peters, R., Blum, L.

Methane/steam global reforming kinetics over the Ni/YSZ of planar pre-reformers for SOFC systems

Chemical Engineering Journal 292 (2016) 113-122

Engelbracht M., Peters, Ro., Blum, L., Stolten D.

Analysis of a Solid Oxide Fuel Cell System with Low Temperature Anode Off-Gas Recirculation

Journal of The Electrochemical Society, 162 (9) (2015) 982-987

Blum L., Batfalsky P., Fang Q., de Haart L. G. J., Malzbender J., Margaritis N., Menzler N. H., Peters Ro.

SOFC Stack and System Development at Forschungszentrum Jülich

Journal of The Electrochemical Society, 162 (10) (2015) 1199-1205

Fang, Q., Blum, L., Peters, Ro., Peksen, M., Batfalsky, P., Stolten, D.

SOFC stack performance under high fuel utilization

International Journal of Hydrogen Energy 40 (2015) 1128-1136

Nguyen, V.N., Blum, L.

Syngas and Syngas from H₂O and CO₂: Current Status

Chem. Ing. Tech. (2015) 87, No. 00, 1–23

Engelbracht M., Peters, Ro., Blum, L., Stolten D.

Comparison of a fuel-driven and steam-driven ejector in solid oxide fuel cell systems with anode off-gas recirculation: Part-load behavior

Journal of Power Sources 277 (2015) 251-260

Fang Q., Blum L., Menzler N. H.

Performance and degradation of solid oxide electrolysis cells in stack

Journal of The Electrochemical Society, 162 (8) (2015) 907-912

Peters, Ro., Deja, R., Blum, L., Nguyen, V.N., Fang Q., Stolten, D.

Influence of operating parameters on overall system efficiencies using solid oxide electrolysis technology

International Journal of Hydrogen Energy 40 (2015) 7103-7113

Peksen, M., Al-Masri, A, Peters, Ro., Blum, L., Stolten, D.

3D multiscale-multiphysics SOFC modelling status at the Institute of Electrochemical Process Engineering

ECS Transactions, 68 (1) (2015) 2861-2866

Peksen, M.

Numerical thermomechanical modelling of solid oxide fuel cells

Progress in Energy and Combustion Science 48 (2015) 1-20

Peksen, M.

3D CFD/FEM analysis of thermomechanical longterm behaviour in SOFCs: Furnace operation with different fuel gases

Journal of Hydrogen Energy 40 (2015) 12362-12369

Peksen, M., Meric, D., Al-Masri, A, Stolten, D.

A 3D multiphysics model and its experimental validation for predicting the mixing and combustion characteristics of an afterburner

Journal of Hydrogen Energy 40 (2015) 9462-9472

Wichtige Patente

Patentanmeldungen:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
M. Engelbracht	1.2760	Verfahren zur Herstellung eines Schutzgases

Erteilte Patente:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
Dr. W. A. Meulenber.	1.2366	Membran-Kraftwerk und Verfahren zum Betreiben eines solchen
Dr. M. Peksen	1.2474	Brennstoffzellenmodul

3.2 Brenngaserzeugung und Systeme

3.2.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Die Verfügbarkeit von Wasserstoff bildet die Grundlage für den Einsatz von Brennstoffzellen in mobilen und stationären Anwendungen. Für Pkw, Busse und Fahrzeugflotten im Zulieferverkehr besteht die Möglichkeit Elektromotoren in Kombination mit wasserstoffbetriebenen Brennstoffzellen einzusetzen. Die Infrastruktur für den zukünftigen Energieträger Wasserstoff muss aber noch aufgebaut werden. Wasserstoff ist zukünftig aus regenerativem und solarem Strom via Elektrolyse bereitzustellen. Mit einem Drucktank bei 700 bar kann eine Reichweite von ca. 350 – 400 km erreicht werden. Für LKW-, Schiffs- und Flugzeuganwendungen reichen solche Reichweiten nicht aus. Auf Grund der schlechten Speichereigenschaften von flüssigem und gasförmigem Wasserstoff im Vergleich zu heutigen Kraftstoffen wie Benzin, Kerosin und Diesel sind flüssige Kraftstoffe für den oben genannten Anwendungsbereich zu bevorzugen. Dabei ist das gesamte Tanksystem mit seinen massen- und volumenspezifischen Leistungsdichten für die Analysen zu betrachten. Die genannten Energieträger werden derzeit zumeist aus dem fossilen Primärenergieträger Rohöl hergestellt. Langfristig lässt sich ein Teil der heute benötigten flüssigen Energieträger aus Biomasse und über die Synthese aus Kohlendioxid und Wasserstoff herstellen.

Kohlendioxid aus industriellen Abgasen und regenerativ erzeugter Wasserstoff bilden die Basis für die Produktion von Elektrokraftstoffen – oft als *Power-to-Fuel* bezeichnet. Mögliche Kraftstoffe sind n-Alkane aus der Fischer-Tropsch-Synthese, Alkohole, diverse Ether und n-Alkane, Cycloalkane und Aromaten aus einer Oligomerisierung. Damit gelingt eine weitere Integration erneuerbarer Energien in den Verkehrssektor – neben der durch Wasserstoff für Brennstoffzellenfahrzeuge – und eine Reduktion der Erdölabhängigkeit. Regenerativer Wasserstoff kann somit auch Eingang in den Güter- und Personentransport mit Schiffen, Flugzeugen und LKW finden. Synthetische Kraftstoffe ermöglichen des Weiteren eine Verbesserung der Motoreffizienz und eine Reduktion der limitierten Emissionen.

Brennstoffzellen stehen für Antriebe in maritimen Anwendungen und im Luftverkehr nicht in den erforderlichen Leistungsklassen größer als 1 MW_e zur Verfügung. Im Lkw-Sektor eingesetzte Dieselmotoren sind im Fahrbetrieb sehr effizient und weisen eine hohe massen- und volumenspezifische Leistungsdichte auf. Im Leerlauf wird eine Leistung von 3 – 5 kW_e aber nur zum Betrieb der Klimaanlage oder einer elektrischen Heizung und für die Stromversorgung elektrischer Geräte benötigt. Dieselmotoren weisen unter diesen Lastbedingungen nur Wirkungsgrade zwischen 10 – 15 % auf, etwas günstiger sind spezielle Stromaggregate - kleine Verbrennungsmotoren mit 20 – 30 %. In der Luftfahrt werden für die Bordstromversorgung auf dem Rollfeld und zum Teil am Gate Hilfsturbinen bei Wirkungsgraden von ca. 20 % betrieben.

Im IEK-3 sind die Arbeiten auf dem Gebiet der Brenngaserzeugung auf die Reformierung von Mitteldestillaten, die Entschwefelung von Kerosin, und die Systementwicklung für die Bordstromversorgung in Kombination mit der HT-PEFC fokussiert. Die Reformerentwicklung wird aber auch für die Hochtemperatur-Brennstoffzelle SOFC durchgeführt. Alle Arbeitsbereiche werden durch ein entsprechendes Modelling unterstützt. Wichtige Werkzeuge sind CFD-Simulationen auf dem institutseigenen Cluster und Systemsimulationen mit dem Programm Simulink zur Optimierung des dynamischen Verhaltens bei Lastwechseln und für die Anfahrstrategie.

3.2.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.2.2.1 Katalysatoren für die autotherme Reformierung

In einer im Jahr 2015 abgeschlossenen Dissertation wurden unterschiedliche Katalysatoren ($\text{Rh}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\text{Rh}/\text{La-Al}_2\text{O}_3$, Rh/CeO_2 , $\text{Rh}/\text{Gd-CeO}_2$, Rh/ZrO_2 and $\text{Rh}/\text{Y-ZrO}_2$ sowie Pt, Ru, Ni, PtRh und PtRu auf $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$) synthetisiert, umfassend mit gängigen Methoden (TPD, TPR, TPO, N_2 -Adsorption, TGA, TEM) charakterisiert und umfangreich in der autothermen Reformierung von biogenen oder konventionellen Dieselkraftstoffen experimentell untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass auf Rh basierende Katalysatoren die höchste katalytische Aktivität und Stabilität aufwiesen. Von den erzielten Ergebnissen wurde ein generelles Schema für verschiedene Mechanismen der Desaktivierung der Katalysatoren abgeleitet, das 2016 im Journal of Power Sources veröffentlicht wurde (vgl. Abb. 25). Sintering-Effekte, kohlenstoffhaltige Ablagerungen (Fouling) und Solid-State-Reaktionen wurde als wesentliche Gründe für die Katalysatordesaktivierung identifiziert. Ein Schwerpunkt der Experimente zur Charakterisierung der frischen und gealterten Katalysatorproben lag dabei auf deren temperaturprogrammierter Reduktion. Bei diesen Experimenten ist der Verbrauch an Wasserstoff, dem Reduktionsmittel, ein Maß für die Fähigkeit der Katalysatoren, Elektronen abzugeben und aufzunehmen. Diese Fähigkeit ist Grundvoraussetzung für ihre katalytische Aktivität. Bei diesen Experimenten zeigten die frischen und gealterten Rh-haltigen Proben die mit Abstand besten Redox-Eigenschaften, was sich sehr gut mit Ihren herausragenden katalytischen Aktivitäten und Stabilitäten korrelieren ließ.

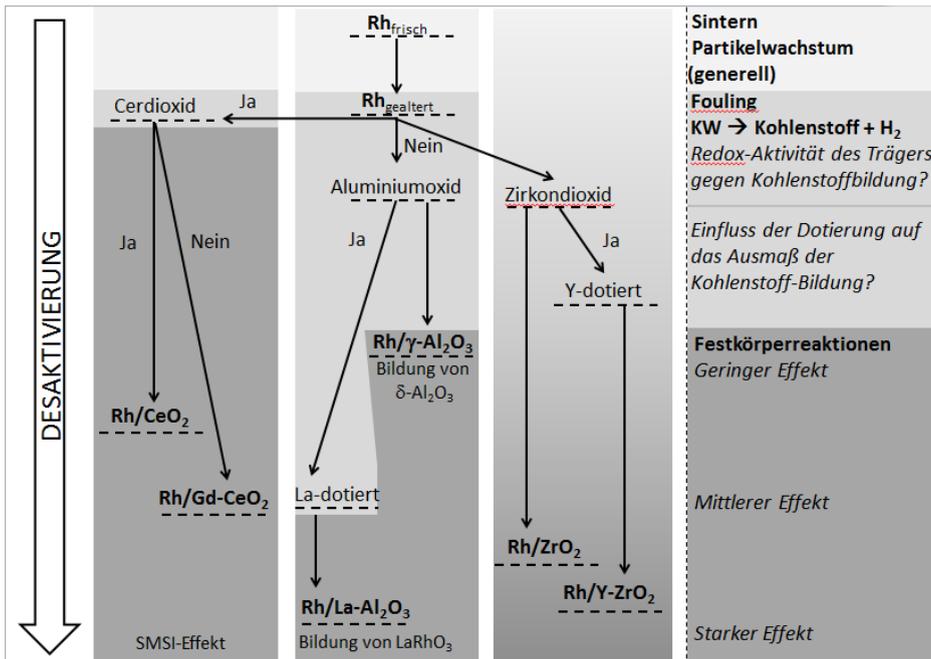


Abb. 25: Schema für Desaktivierungsrouten und –mechanismen von unterschiedlichen Katalysatortypen für die autotherme Reformierung von flüssigen Kohlenwasserstoffen

3.2.2.2 Diesel-Einspritzsystem

Im Rahmen des vom Land NRW geförderten Projektes ADELHEID wurde ein schnellschließendes Ventil der Fa. GSR Ventiltechnik und eine Dieselpumpe der Fa. Thomas Magnete an Hand der Spezifikationen für eine 28 kW_{th} Dieselreformer entwickelt und gebaut. Abb. 26 zeigt Ergebnisse von Sprühbilduntersuchungen, die mit der gewählten Anordnung der Kraftstoffeinspritzvorrichtung bestehend aus der Pumpe, einem Reservoir, einem Druckregler, dem schnellöffnenden/ schließenden Magnetventil und der Dralldruckdüse vor dem Einbau der Anordnung in den ATR AH2 erzielt wurden. Die Bildfolge in Abb. 26 wies bei 13300 fps einen Zeitabstand von jeweils 75 μ s.

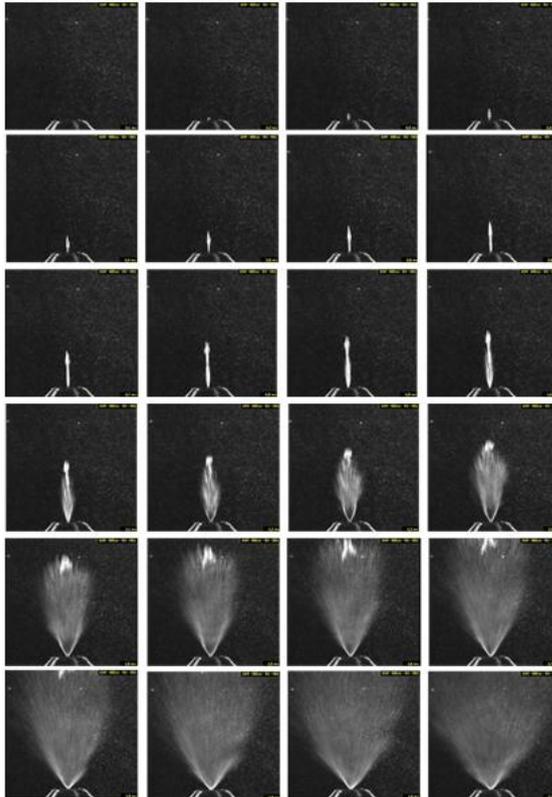


Abb. 26: Bildabfolge eines Videos aufgenommen mit der Hochgeschwindigkeitskamera bei einer Bildrate von 13300 fps während des Pulsbetriebs der Kraftstoffeinspritzvorrichtung. Die Dralldruckdüse ist untenliegend. Es wird der Aufbau des Sprühbilds gezeigt.

Der Aufbau des Sprühbilds dauerte 1,5 - 2 ms. Wichtig ist, dass das Auftreten eines Flüssigkeitsstrahls nach weniger als 1 ms nahezu verschwunden ist. Damit konnte die Entwicklung der Pumpe und des Magnetventils in Kombination mit der technischen Anordnung erfolgreich umgesetzt werden. Für die Qualität des Sprühbilds ist ein konstanter Betriebsdruck von 40 – 50 bar ideal. Für die Messungen in Abb. 26 wurde ein Speicherdruck von 50 bar eingestellt. Die Wiederholrate liegt bei 16 2/3 Hz entsprechend 60 ms pro Takt. Die effektiv minimale Last lag bei 10 %. Die theoretisch mögliche Last von 5 % ließ sich nicht

ansprechen. 10 % Last waren nur bedingt zu nutzen, da der Sprüh nicht gut abgesetzt wurde.

3.2.2.3 Reformarentwicklung

Allen Generationen eines autothermen Reformers, die in den vergangenen Jahren im IEK-3 entwickelt wurden, ist gemeinsam, dass sie mit einer Dralldruckdüse zur Einspritzung von kaltem Dieselkraftstoff ausgestattet sind. Sie alle haben eine Verdampferkammer, in der der Kraftstoff verdampft wird und mit überhitztem Wasserdampf sowie einem Teil der Luft vermischt wird. Während des Brennstoffzellensystembetriebs kommt der Dampf vom katalytischen Brenner. Er wird in einem Überhitzer auf die benötigte Temperatur von mehr als 400 °C gebracht, indem die Abwärme des Produktgasstroms des Reformers genutzt wird. Der andere Teil des Volumenstroms an Luft wird über den Luftkranz in den Reformer geleitet. In der Mischkammer wird Luft mit dem Wasserdampf und dem verdampften Kraftstoff vermischt. Die zentrale Komponente in jedem Reformierungsapparat des IEK-3 ist der Katalysator. Er besteht in den meisten Fällen aus bimetallic RhPt-Spezies, die auf einen $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-CeO}_2$ -Washcoat aufgebracht sind, der wiederum auf ein monolithisches Cordierith-Substrat beschichtet worden ist.

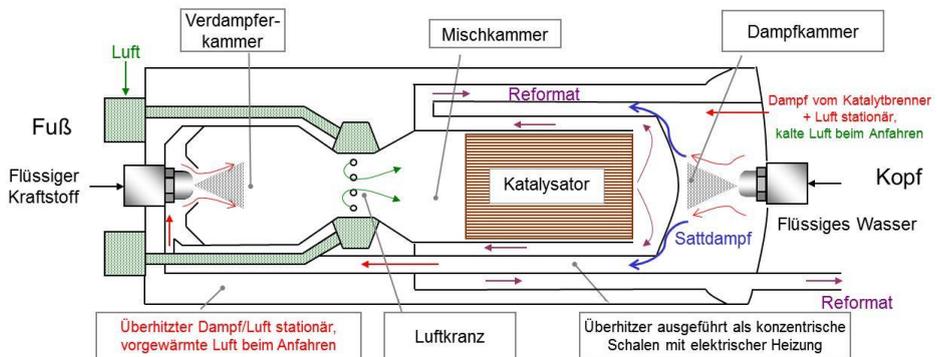


Abb. 27: Prinzipieller Aufbau der jüngsten Reformergeneration des IEK-3, des ATR 12

Die jüngste Entwicklung des IEK-3, der ATR 12, Abb. 27 ist eine Weiterentwicklung des ATR AH2. Die Verbesserungen des ATR AH2 im Vergleich zu älteren Reformergenerationen liegen in einer zusätzlichen Dralldruckdüse zur Einspritzung von kaltem Wasser und einer dazugehörigen Dampf- und Reformatkammer. Dadurch konnte eine externe, verfahrenstechnische Komponente (Mischer) für die Dampfzufuhr eingespart werden. Zusätzlich wurde die Querschnittsfläche des Überhitzers im ATR AH2, durch den ein erheblicher Teil der Luft zum Reformer geleitet wird, vergrößert, während gleichzeitig seine Länge verringert wurde. Dadurch konnte der Druckverlust über den Überhitzer stark reduziert werden. Diese Vorteile bezüglich der Auslegung des autothermen Reformers sind nicht entscheidend, wenn nur der Betrieb des Reformers alleine betrachtet wird. Sie spielen erst dann eine Rolle, wenn sie aus der Perspektive des Brennstoffzellensystems gesehen werden, da sie die parasitären Verluste verursacht durch den Luftkompressor verringern und das Systemlayout stark vereinfachen. Beim ATR 12 wurde dieser Weg, wichtige technische Anforderungen aus der Sicht des Brennstoffzellensystems zu berücksichtigen, bei Design und Konstruktion

konsequent fortgesetzt. Die technische Ausführung des Überhitzers wurde substantiell modifiziert und weiter verbessert. Die bisher verwendete Rohrwendel zur Übertragung der Abwärme des Reformats auf den Massenstrom an Sattedampf wurde ersetzt durch konzentrische Schalen, in die Turbulenzeinlagen zur Verbesserung der Wärmeübertragungseigenschaften eingebracht wurden. Diese Modifikation hatte eine weitere Verringerung des Druckverlustes in diesem Teil des Reformers und eine Homogenisierung der Medienströme zum Ziel, wenn diese in die Verdampferkammer eintreten. Die konzentrischen Schalen bieten außerdem genügend Platz, um einen elektrischen Heizdraht zu integrieren. Diese Modifikation bietet die Möglichkeit, den Reformier schnell und autonom anzufahren.

3.2.2.4 An- und Abfahrstrategien

Auf der Basis von experimentellen Ergebnissen in der Literatur wurde der Startvorgang des ATR AH2 im Hinblick auf die Bildung unerwünschter Nebenprodukte wie Ethen, Ethan, Propen oder Benzol untersucht. Diese Substanzen hatten sich in der Vergangenheit als Vorläufer für kohlenstoffhaltige Ablagerungen auf der Katalysatoroberfläche erwiesen, die ihrerseits die katalytische Aktivität verringerten. Abb. 28 zeigt die eingestellten Medienströme und die daraus resultierenden Konzentrationen während eines konventionellen Startvorgangs. Er begann, indem ein hoher Volumenstrom an Luft mit einer Temperatur von 450 °C und ein Massenstrom an Wasserdampf ($T = 350\text{ °C}$) in die Verdampfungskammer und die Mischkammer des Reformers geleitet wurden. Als nächstes wurde der Volumenstrom an Luft stark auf $2\text{ m}^3/\text{h}$ verringert, während gleichzeitig ein Massenstrom an Wasserdampf von $3,2\text{ kg/h}$ eingestellt wurde. Beide Maßnahmen wurden ergriffen, um „Hotspots“ in Folge zu hoher Sauerstoffkonzentrationen während der Kraftstoffzugabe zu vermeiden. Im nächsten Schritt wurde Dieseldieselkraftstoff in einer Menge zugegeben, die 50% Reformierlast entspricht.

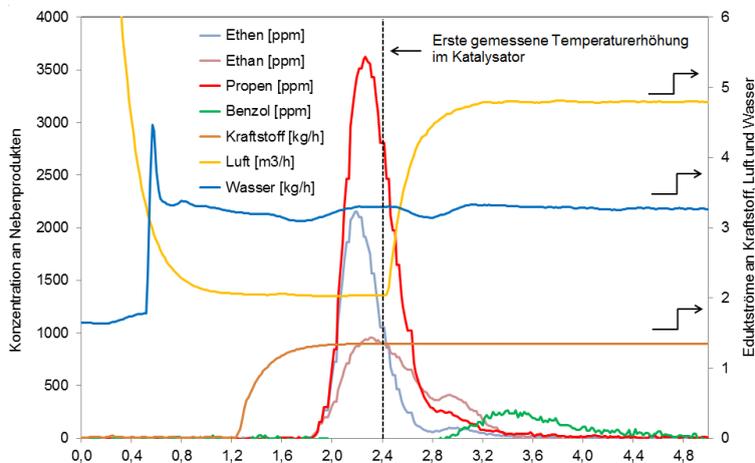


Abb. 28: Konzentrationen an Ethen, Ethan, Propen und Benzol im Reformat des ATR AH2, Massenströme an Diesel und Wasser, Volumenstrom an Luft während des konventionellen Startvorganges

Die Abb. 28 zeigt, dass es während dieses Startvorgangs zur Bildung von erheblichen Mengen an Nebenprodukten kam. So betragen die Konzentrationen an Ethen und Propen

beispielsweise 2100 ppmv bzw. 3600 ppmv. Als Konsequenz wurde der Startvorgang in aufwändigen Versuchsreihen schließlich dahingehend modifiziert, dass der Volumenstrom an Luft nicht mehr stark auf 2 m³/h, sondern nur noch auf 4 m³/h verringert wurde. Das entspricht annähernd dem Volumenstrom im stationären Betriebszustand des ATR AH2 bei 50% Last. Dadurch konnte die Bildung der oben beschriebenen Nebenprodukte fast vollständig vermieden werden. Ein ähnliches Vorgehen wurde auch auf den Abfahrvorgang angewandt.

3.2.2.5 Wasser-Gas-Shiftreaktor

Es wurden Experimente unter stationären Bedingungen durchgeführt, um die Aktivität und Stabilität von zwei kommerziellen Katalysatoren für die Wasser-Gas Shiftreaktion zu analysieren. Abb. 29 zeigt die Ergebnisse dieser Untersuchungen unter Hochtemperatur-Shift-Bedingungen bei einer Eintrittstemperatur von 410 °C. Beide Katalysatoren zeigten über die 24 h Betriebsdauer einen nahezu konstanten CO-Umsatz, der nahe am thermodynamischen Gleichgewicht lag. Die durchschnittlichen Umsätze betragen 53,2 % für Katalysator A und 55 % für Katalysator B. Der CO-Umsatz wurde ebenfalls in den ersten und in den letzten zwei Betriebsstunden einzeln ausgewertet. Der Unterschied zwischen den Drei- und Vierecken informiert über einen stabilen oder instabilen Betrieb.

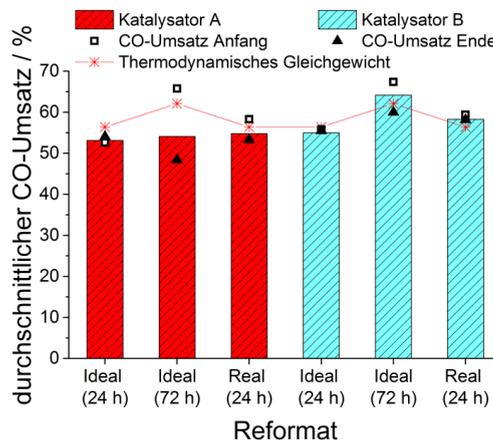


Abb. 29: CO-Umsatz bei stationärem Betrieb unter HTS-Bedingungen mit idealem und realem Reformat. Vergleich zwischen Katalysator A und B.¹

Wie aus der Abb. 29 zu erkennen ist, arbeiteten beide Katalysatoren bei idealem Reformat sehr stabil. Werden die Ergebnisse für Katalysator A im 24 h- und 72 h-Test miteinander verglichen, so ergeben sich unterschiedliche Aussagen. Dies kann zwar zum einen aus dem geringfügig unterschiedlichen Temperaturniveau und zum anderen aus der divergierenden Betriebsdauer herrühren, ist aber auch auf die Probenvariabilität zurückzuführen. Bei realem

¹ D. Krekel, Betriebsstrategien für Brenngaserzeugungssysteme zur Anwendung in HT-PEFC-Hilfsstromaggregaten, Diss. RWTH Aachen, Tag der mündlichen Prüfung: 09.12.2016.

Reformat zeigte sich für Katalysator A ein durchschnittlicher CO-Umsatz von 54,8 %. Bei diesem Versuch deaktivierte der Katalysator von anfänglich 58,3 % auf 53,3 %. Trotzdem zeigte das reale Reformat keinen signifikanten Einfluss auf die Katalysatorstabilität. Katalysator B erreichte einen durchschnittlichen Umsatz von 58,3 % bei nahezu gleichbleibender Aktivität über den Betriebszeitraum. Im Vergleich zu idealem Reformat deutet dies auf einen vernachlässigbar kleinen Einfluss der 220 ppmv höherer Kohlenwasserstoffe hin. Bei den Versuchen mit realem Reformat konnte die Hydrierung von Alkenen zu Alkanen beobachtet werden. Diese Nebenreaktionen scheinen Katalysator B unter den getesteten Bedingungen nicht negativ beeinflusst zu haben. Katalysator B zeigte unabhängig von der Reformatqualität einen nahezu stabilen Betrieb. Allerdings arbeitete der Katalysator bei kleinen Änderungen in der Betriebstemperatur und über einen Zeitraum von 24 h stabiler als über 72 h. Demgegenüber ist das Degradationsverhalten von Katalysator A aufgrund der verstärkten Probenvariabilität schwieriger zu interpretieren.

3.2.2.6 PEFC-Systementwicklung mit Schwerpunkt Fuel Processor

Im Rahmen des von der EU geförderten Projektes FCGEN (Fuel Cell Based Power Generation) wurde in einem internationalen Konsortium das Ziel verfolgt, ein Brennstoffzellensystem auf Basis einer PEFC und der autothermen Reformierung von Standard-Dieselmotorkraftstoff im Labor aufzubauen und zu testen. Ein wichtiger Teil eines solchen Systems ist der Fuel Processor, dem die Aufgabe zukommt, einen wasserstoffreichen Gasstrom (Reformat) mit ausreichend hoher Qualität zu erzeugen, der dann in die Anode der Brennstoffzelle geleitet werden kann. Qualitätsanforderungen waren dabei zum einen, dass die Konzentration an so genannten "Non-Methane Hydrocarbons NMHCs (Ethen, Ethan, Propen, Benzol etc.)" im Reformat idealerweise Null ist. Außerdem sollte die Konzentration an CO kleiner als 25 ppmv und die von Schwefel kleiner als 1 ppmv sein. Zusätzlich sollte der molare Strom an Wasserstoff groß genug sein, um in der Brennstoffzelle eine elektrische Nettoleistung von mindestens 3 kW zu erreichen. Designaspekte wie Gewicht, Volumen und Kosten mussten dabei gewissenhaft mitbetrachtet werden. Das IEK-3 hat in diesem Projekt das den Fuel Processor betreffende Workpackage geleitet und wissenschaftlich geführt. Für den Fuel Processor bedurfte es der folgenden Hauptkomponenten: Der autotherme Reformer ist die Schlüsselkomponente des Fuel Processings, da dort in einer Reaktion aus Dieselmotorkraftstoff, Luft und Wasserdampf das wasserstoffhaltige Reformat erzeugt wird. Der katalytische Brenner hat zwei Funktionen. Einerseits muss er alle brennbaren Bestandteile des Abgases aus der Anode (H_2 , CO, CH_4) in CO_2 und H_2O umwandeln. Andererseits ist er so entworfen worden, dass er mittels eines internen Wärmeaustauschers die Reaktionswärme der Verbrennung auf den Massenstrom an Wasser übertragen kann. Dadurch entsteht Satttdampf, der im internen Wärmeaustauscher des Reformers überhitzt wird. Während intensiver Tests für FCGEN konnte im IEK-3 experimentell nachgewiesen werden, dass beide Reaktoren ihre beschriebenen Funktionen verlässlich erfüllten. In Strömungsrichtung hinter dem Reformer befindet sich die H_2S -Falle zur Verringerung der Schwefelkonzentration im Reformat auf weniger als 1 ppmv. Weiter in Strömungsrichtung sind die Reaktoren für die Wasser-Gas-Shift Reaktion und die präferentielle Oxidation von CO verbaut. Beide Reaktoren haben im Zusammenspiel die Funktion, die Konzentration an CO im Reformat auf unter 1 ppmv zu verringern. Experimentelle Tests im Rahmen von FCGEN konnten dies bestätigen.



Abb. 30: FCGEN-System mit einer elektrischen Leistung von 3-5 kW, links ist der Brennstoffzellenteil zu sehen, rechts der Fuel Processor

Die oben stehende Abb. 30 zeigt auf der rechten Seite den vollständigen Fuel Processor nach seiner Montage und Inbetriebnahme. Auf der linken Seite sind die Brennstoffzelle und ihre Peripherie zu sehen. Die experimentelle Erprobung aller Komponenten des Brennstoffzellensystems in Wechselwirkung miteinander hat einen erfolgreichen Betrieb des gesamten Systems zeigen können. Der Reformer lieferte ein Reformat mit der oben beschriebenen erforderlichen Qualität. Das Brennstoffzellensystem erbrachte eine elektrische Leistung im Bereich von 3 kW.

3.2.3 Mitarbeiter und Tätigkeitsfelder

Name	Telefon-Nr. (02461-61-) e-mail Adresse	Tätigkeitsfeld
Prof. Dr. R. Peters	4260 ra.peters@fz-juelich.de	Leiter der Abteilung Brenngaserzeugung und Systeme
Dr. J. Pasel	5140 j.pasel@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe Chemie der Brenngaserzeugung
Dr. R. C. Samsun	4616 r.c.samsun@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe Systemtechnik der Bordstromversorgung
A. Tschauder	4547 a.tschauder@fz-juelich.de	Reaktorentwicklung, Reformierung, Systemauslegung
J. Meißner	4306 j.meissner@fz-juelich.de	Katalytische Verbrennung, CO- Feinreinigung
S. Schemme	2779 s.schemme@fz-juelich.de	Zukünftige Kraftstoffe, Verfahrens- und Systemanalyse der Elektrokraftstoffe
M. Decker	5322 ma.decker@fz-juelich.de	Zukünftige Kraftstoffe, Flüssige Energieträger für Schiffe, Flugzeuge und LKW
S. Weiske	5322 s.weiske@fz-juelich.de	Zukünftige Kraftstoffe, DME- Syntheseverfahren, Reaktormodellierung

3.2.4 Wichtige Veröffentlichungen, Dissertationen und Patente

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

Pasel, J.; Wohlrab, S.; Rotov, M.; Lohken, K.; Peters, R.; Stolten, D.
Routes for deactivation of different autothermal reforming catalysts
Journal of Power Sources 325 (2016) 51-63

Dolanc, G.; Pregelj, B.; Petrovčič, J.; Pasel, J.; Kolb, G.
Control of autothermal reforming reactor of diesel fuel
Journal of Power Sources 313 (2016) 223-232

Liu, Y.; Lehnert, W.; Janßen, H.; Samsun, R.C.; Stolten, D.
A review of high-temperature polymer electrolyte membrane fuel-cell (HT-PEMFC)-based auxiliary power units for diesel-powered road vehicles
Journal of Power Sources 311 (2016) 91-102

Meißner, J.; Pasel, J.; Peters, R.; Samsun, R. C.; Tschauder, A.; Stolten, D.
Elimination of by-products of autothermal diesel reforming
Chemical Engineering Journal 306 (2016) 107-116

Samsun, R.C.; Krupp, C.; Baltzer, S.; Gnörich, B.; Peters, R.; Stolten, D.
A battery-fuel cell hybrid auxiliary power unit for trucks: Analysis of direct and indirect hybrid configurations
Energy Conversion and Management 127 (2016) 312-323

Krekel, D.; Samsun, R.C.; Pasel, J.; Prawitz, M.; Peters, R.; Stolten, D.
Operating strategies for fuel processing systems with a focus on water-gas shift reactor stability
Applied Energy 164 (2016) 540-552

Samsun, R.C.; Krupp, C.; Tschauder, A.; Peters, R.; Stolten, D.
Electrical start-up for diesel fuel processing in a fuel-cell-based auxiliary power unit
Journal of Power Sources 302 (2016) 315-323

Meißner, J.; Pasel, J.; Samsun, R. C.; Peters, R.; Stolten, D.
Start-Up and Load-Change Behavior of a Catalytic Burner for a Fuel-Cell-Based APU for Diesel Fuel
Fuel Cells 15, 1 (2015) 15–26

Pasel, J.; Samsun, R. C.; Tschauder, A.; Peters, R.; Stolten, D.
A novel reactor type for autothermal reforming of diesel fuel and kerosene
Applied Energy 150 (2015) 176–184

Pasel, J.; Samsun, R. C.; Peters, R.; Stolten, D.
Fuel cell systems with reforming of petroleum-based and synthetic-based diesel and kerosene fuels for APU applications
International Journal of Hydrogen Energy 40 (2015) 6405–6421

Krekel, D.; Samsun, R.C.; Pasel, J.; Prawitz, M.; Peters, R.; Stolten, D.
Investigation of operating parameters in conjunction with catalyst deactivation of the water-gas shift reactor in a fuel cell system
ECS Transactions 65 (1) (2015), 99–114.

Veröffentlichungen in Büchern

Peters, R.

Fuel Processing for Utilization in Fuel Cells,

in Hydrogen Science and Engineering : Materials, Systems, Processes and Technologies, First Edition. Stolten, D.; Emonts, B., (Eds.), 2016, Wiley-VCH, Weinheim, p. 173-216

Samsun, R.C.

Global development status of fuel cell vehicles

in Fuel Cells: Data, Facts, and Figures, First Edition. Stolten, D.; Samsun, R.C.; Garland, N., (Eds.), 2016, Wiley-VCH, Weinheim, p. 39-60

Samsun, R.C.

Fuels for APU applications

in Fuel Cells: Data, Facts, and Figures, First Edition. Stolten, D.; Samsun, R.C.; Garland, N., (Eds.), 2016, Wiley-VCH, Weinheim, p. 185-196

Peters, R.

Reforming Technologies for APUs,

in Fuel Cells: Data, Facts, and Figures, First Edition. Stolten, D.; Samsun, R.C.; Garland, N., (Eds.), 2016, Wiley-VCH, Weinheim, p. 208-224

Samsun, R.C.

PEFC for APU applications

in Fuel Cells: Data, Facts, and Figures, First Edition. Stolten, D.; Samsun, R.C.; Garland, N., (Eds.), 2016, Wiley-VCH, Weinheim, p. 225-234

Peters, R.

Heutige und zukünftige Kraftstoffe für Brennstoffzellen in der Luftfahrt, in Brennstoffzellen in der Luftfahrt

in Brennstoffzellen in der Luftfahrt. Peters, R. (Ed.), 2015, Springer Vieweg, Berlin, p. 7-100

Pasel, J.

Technische Entwicklung, Bau und Test von Brenngaserzeugungskomponenten

in Brennstoffzellen in der Luftfahrt. Peters, R. (Ed.), 2015, Springer Vieweg, Berlin, p. 181-234

Meißner, J; Tschauder, A.

Reaktorentwicklung und Konstruktion

in Brennstoffzellen in der Luftfahrt. Peters, R. (Ed.), 2015, Springer Vieweg, Berlin, p. 235-280

Samsun, R.C.

Entwicklung und Charakterisierung eines Gesamtsystems

in Brennstoffzellen in der Luftfahrt. Peters, R. (Ed.), 2015, Springer Vieweg, Berlin, p. 281-332

Peters, R. und Westernberger, A.

Brennstoffzellensysteme als Bestandteil eines multifunktionalen Systems,

in Brennstoffzellen in der Luftfahrt. Peters, R. (Ed.), 2015, Springer Vieweg, Berlin, p. 333-404

Peters, R.; Meißner, J.; Pasel, J.; Samsun, R.C.; Stolten, D.

Verbundvorhaben ELFA Effiziente Luftfahrzeuge, Brennstoffzellensysteme zur

Energieeffizienz, BREZEN - Teilprojekt: Kerosinaufbereitung,

Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, Band 302, 2016.

ISBN 978-3-95806-114-9

Dissertationen

Löhken, K.

Aktivitätsuntersuchungen und Methoden zur Regeneration von Katalysatoren für die autotherme Reformierung von Dieselkraftstoffen

Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, 288 (2015), ISBN 978-3-95806-093-7

Krupp, C.

Computerunterstützte Auslegung eines Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystems für die Bordstromversorgung

Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, 309 (2015), ISBN 978-3-95806-124-8

Wichtige Patente

Erteilte Patente:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
Dr. Z. Pors	1.2272	Verfahren zum Verdampfen eines flüssigen Kraftstoffs sowie eine Mischkammer zur Durchführung dieses Verfahrens
Prof. R. Peters	1.2188	Verfahren zur Aufarbeitung von Kraftstoff

3.3 Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen

3.3.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Hochtemperatur-Polymerelektrolyt Brennstoffzellen (HT-PEFC) basierend auf phosphorsäuredotierten Polybenzimidazol-Membranen, haben eine Arbeitstemperatur von 150 °C - 180 °C. Aufgrund des hohen Temperaturniveaus haben sie eine hohe CO-Toleranz, was sie für den Betrieb in Kombination mit Reformern prädestiniert. Im Gegensatz zu Nafion basierten Polyerelektrolyt-Brennstoffzellen (PEFC) ist, ein angepaßter Strömungsverteiler in den Zellen vorausgesetzt, eine externe Befeuchtung der Gase nicht erforderlich, um die protonische Leitfähigkeit der Membran sicherzustellen. Ein weiterer Vorteil der HT-PEFC-Technologie ergibt sich aus dem großen Temperaturunterschied zwischen dem Stack und der Umgebungstemperatur; die Kühlung kann deutlich kompakter gestaltet werden als bei klassischen PEFC-Systemen.

Bei allen Vorteilen muß jedoch verhindert werden, daß die Säure aus der Membran ausgetragen wird; Betriebsbedingungen bei denen flüssiges Wasser in den Zellen entstehen kann, sollten vermieden werden. Ein Betrieb im niedrigen Temperaturbereich ist somit zu vermeiden, was durch die Betriebsstrategien und die spezifischen Einsatzbereiche berücksichtigt werden muss.

Parallel zu den Zell- und Stackentwicklungen werden im IEK-3 insbesondere physikalisch-chemische Wechselwirkungen innerhalb der Membran-Elektroden-Einheiten (MEA) untersucht. Bei der Zell- und Stackentwicklung gab es einen Innovationsschub; weg von graphitischen, hin zu metallischen Bipolarplatten (Abb. 31).

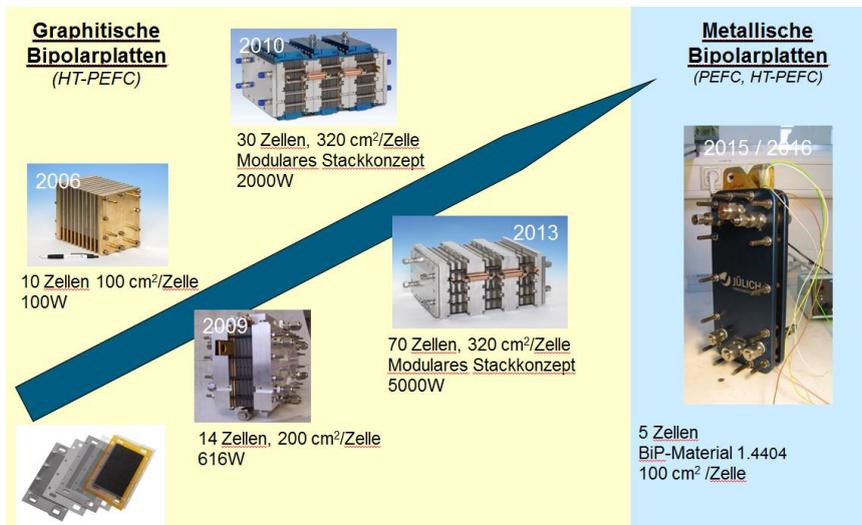


Abb. 31: HT-PEFC Stackentwicklung im IEK-3. Auf der linken Seite sind Stacks mit graphitischen und auf der rechten Bildhälfte der Stack mit metallischen Bipolarplatten abgebildet

Als wesentliche Schwerpunkte haben sich in den letzten Jahren darüber hinaus Modellierung und Simulation noch stärker als bisher herauskristallisiert. Zur Beschreibung von HT-PEFC

Zellen und kompletten Zellstapeln wurden Modelle auf Basis des Open Source Simulationstools OpenFOAM entwickelt. Detaillierte Simulationen des Stofftransportes in porösen Gasdiffusionslagen wurden mit dem im IEK-3 entwickelten Lattice-Boltzmann Softwaretool JULABOS durchgeführt. Analytische Brennstoffzellenmodelle zur Beschreibung von Impedanzphänomenen komplettieren diese Aktivitäten.

Eine Erweiterung der F&E Aktivitäten in Richtung zur klassischen PEFC zeichnete sich ebenfalls in den Jahren 2015 und 2016 ab. Der Schwerpunkt liegt hier auf der experimentelle Untersuchung und der mathematischen Beschreibung von Zweiphasenströmungsphänomenen sowohl in den Strömungskanälen als auch in den porösen Zellkomponenten.

Insgesamt zeigte sich, dass die enge Kopplung von Experiment und Modellierung/Simulation einen wesentlichen Erkenntnisfortschritt in der PEFC Forschung und Entwicklung brachte.

3.3.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.3.2.1 HT-PEFC Stackentwicklung

Im Bereich der Stackentwicklung wurde ein Übergang von graphitischen zu metallischen Bipolarplatten vollzogen. Durch diesen Schritt konnte das Gewicht eines Stacks um 70% und das Volumen um 40% reduziert werden. Diese Arbeiten wurden im Rahmen des vom BMWi geförderten Projektes „Robuste Bipolarplatten für HT-PEFC (RoBiPo)“ mit dem Förderkennzeichen 03ET2030F gemeinsam mit den Industriepartnern Enmotion, Gräbener, Wickeder Westfalenstahl, Diacon und Polyprocess durchgeführt.

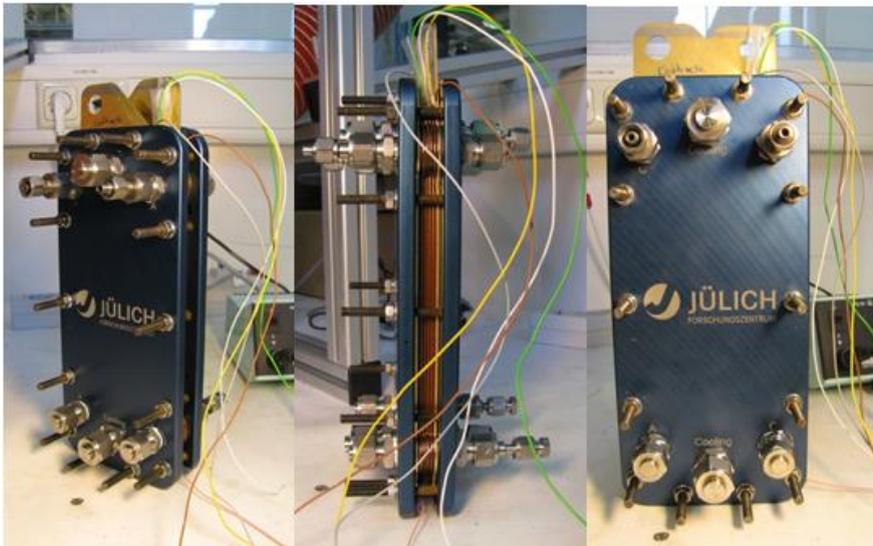


Abb. 32: Außenansichten des 5-Zellen-Teststacks mit Kabeln für Einzelzellspannungsabgriffe

Für den Funktionsnachweis der im Rahmen dieses Projektes entwickelten metallischen Bipolarplatte wurde im IEK-3 ein Stack aufgebaut. Auslegung, Design und Herstellung der erforderlichen weiteren Stackkomponenten erfolgten ebenfalls in Jülich. Es wurden ebene,

rechteckige Endplatten aus Aluminium mit einer Dicke von 10 mm produziert. Die Verspannung des Stacks erfolgt mittels 14 um den Umfang verteilten Zuganker, die in die eine Endplatte hineingeschraubt und über die zweite Endplatte mittels Muttern und Tellerfedern definiert belastet werden. In Abb. 32 ist der fertig assemblierte Stack in mehreren Ansichten vor dem Einbau in den Teststand dargestellt. Als weitere Elemente sind die Verschraubungen in den Endplatten zum Anschluss der Gas- und Kühlmittleitungen sowie die farbigen Kabel zum Abgriff der Einzelzellspannungen erkennbar.

Abb. 33 zeigt weitere Fotos zu der Einbausituation des Stacks in den Teststand (Hersteller: Fa. Hydrogenics) des IEK-3. Ein Teil der Leitungen ist bereits mittels Glasfasermatten thermisch isoliert. Kabel für die angeschlossene Messtechnik (Temperaturen, Spannungen) sowie die dickeren Lastkabel sind erkennbar.

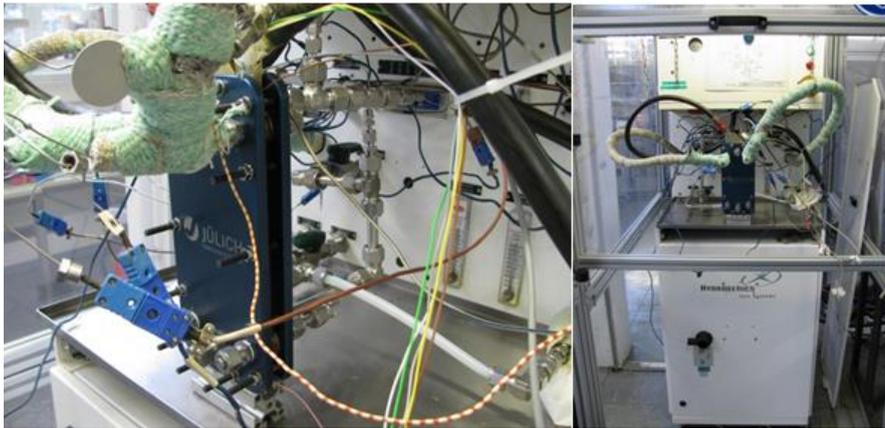


Abb. 33: Einbau des Stacks in den Teststand, Stack und Teile der Leitungen sind hier wärmetechnisch noch nicht isoliert

Nach dem Aufheizen des Stack auf die Nennbetriebstemperatur von 160 °C mittels umgepumptem Kühlmittel (Fragotherm S-15-A der Fa. Fragol, Polyglykolbasis) wurden die vorgeheizten Gase (Wasserstoff und Luft) zugeführt. Ca. eine Stunde nach Erstinbetriebnahme wurde eine erste Polarisationskurve ermittelt. Das Ergebnis ist in Abb. 34 dargestellt. Die gewählten Betriebsparameter sind der nebenstehenden Legende, ebenfalls Abb. 34, zu entnehmen. Im Diagramm sind die Polarisationskurven für alle fünf Zellen im Stack separat dargestellt. Zunächst ist auffällig, dass die Spannungen der Zellen Nr.1 und Nr. 5 (Randzellen) signifikant niedriger sind als die anderen drei. Eine mögliche Erklärung ist, dass der Stack bei diesen Messungen thermisch nicht isoliert ist und die Randzellen durch eine zusätzliche Wärmeabfuhr über die Aluminiumendplatten bei einer niedrigeren Temperatur betrieben wurden. Im Mittel wurde im Wasserstoff/Luft-Betrieb bei einer Stromdichte von 0,5 A/cm² eine Zellspannung von 0,55 V erreicht. Bei 0,9 A/cm² betrug die mittlere Zellspannung etwa 0,45 V. Das entspricht einer spezifischen Leistung von etwa 0,4 W/cm². Für einen HT-PEFC-Stack ist dies ein sehr guter Wert.

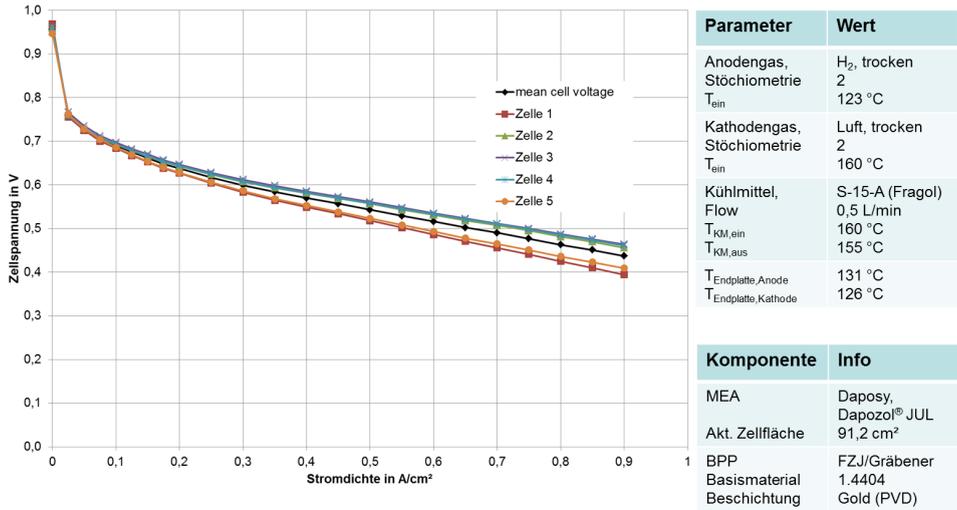


Abb. 34: Polarisationskurven im Wasserstoff/Luft-Betrieb für alle 5 Einzelzellen im Stack, direkt nach Einbau und 1-stündiger Einfahrphase

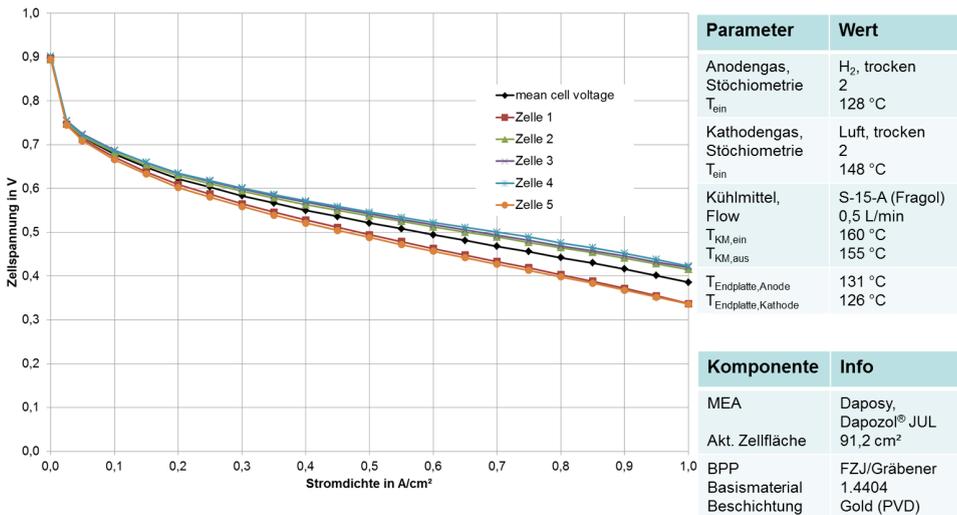


Abb. 35: Polarisationskurven im Wasserstoff/Luft-Betrieb für alle 5 Einzelzellen im Stack, nach 25 Betriebsstunden

Nach einem Stackbetrieb von etwa 25 h bei konstanter Stromdichte von 0,2 A/cm² wurde eine weitere Polarisationskurve im Wasserstoff/Luft-Betrieb ermittelt. Abb. 35 zeigt die Ergebnisse. Die Spannungsniveaus sind insgesamt etwa 20 bis 40 mV geringer als in der

ersten Polarisationskurve. Die maximale Leistungsdichte von $0,38 \text{ W/cm}^2$ wurde bei 1 A/cm^2 gemessen.

Anschließend wurde das Brenngas auf ein Diesel-basiertes synthetisches Reformat umgestellt. Das Reformat bestand zu 32 % aus Wasserstoff, mit einem Kohlenmonoxidanteil von 1 %. Der Rest ist Stickstoff. Stickstoff repräsentiert bei diesem synthetischen Reformat die Summe aller in echtem Reformat in ähnlichen Anteilen vorhandenen Inertgasen (H_2O , N_2 und CO_2). Durch die hohe Wasserstoffverdünnung, die Anwesenheit von 1 % CO und die Trockenheit des Gases stellt dieses Brenngas ein „Worst-Case-Reformat“ dar. Die Polarisationskurven nach einer Stackbetriebsdauer von 43 h sind in Abb. 36 dargestellt. Wie zu erwarten, verlaufen die Strom/Spannungskennlinien signifikant unterhalb der Kurven für den Wasserstoffbetrieb. Bei $0,5 \text{ A/cm}^2$ werden im Mittel noch $0,45 \text{ V}$ je Zelle erreicht. Bei $0,65 \text{ A/cm}^2$ unterschreitet die erste Zellspannung das vorgegebene Limit von $0,35 \text{ V}$, bei dem die Polarisationskurve automatisch beendet wird. Die mittlere spezifische Zelleistung in diesem Betriebspunkt beträgt $0,25 \text{ W/cm}^2$. Für einen ersten Stacktest ist dies ein sehr vielversprechendes Ergebnis.

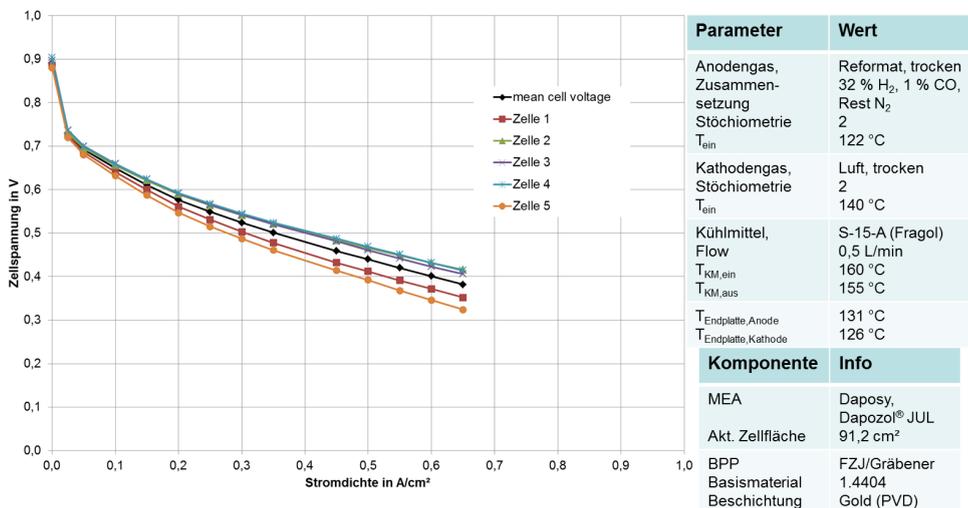


Abb. 36: Polarisationskurven im Reformat/Luft-Betrieb für alle 5 Einzelzellen im Stack, nach 43 Betriebsstunden

Nach den ersten Leistungscharakterisierungen in Form der oben dargestellten Polarisationskurven-Messungen für den Wasserstoff/Luft- sowie Reformat/Luft-Betrieb wurde der Shortstack in einen Dauerbetrieb bei konstanter Stromdichte von $0,2 \text{ A/cm}^2$ versetzt. Die weiteren Betriebsbedingungen sowie der zeitliche Spannungsverlauf der fünf Zellen ist in Abb. 37 dargestellt.

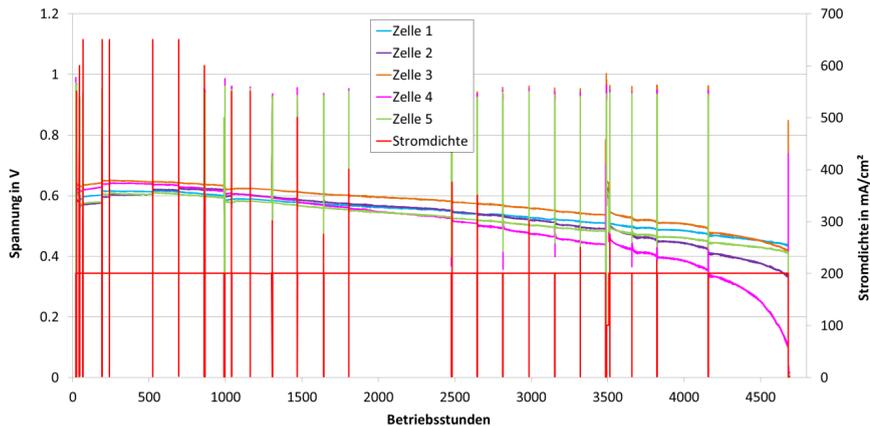


Abb. 37: Langzeittest des 5-Zellen-Shortstacks, H₂ / Luft-Betrieb, $\lambda_A = \lambda_C = 2$, $T_{\text{coolant,in}} = 160 \text{ °C}$, $i = 0,2 \text{ A/cm}^2$

Die senkrechten Linien im Diagramm markieren die Zeitpunkte, zu denen Polarisationskurven aufgenommen wurden. Es lassen sich bei den Spannungsverläufen unterschiedliche Bereiche erkennen:

- Bis etwa 200 Betriebsstunden nahm die Zellspannung im Mittel ausgehend von etwa 0,6 V um ca. 50 mV zu. In diesem Anfangsbereich des Stackbetriebes erfolgt eine Umverteilung der Phosphorsäure im Bereich der MEA-Komponenten, was die protonische Leitfähigkeit und damit die Zellperformance verbessern kann.
- Der weitere zeitliche Verlauf der Zellspannungen ist durch einen kontinuierlichen Abfall geprägt. Nach 2500 Betriebsstunden beträgt die mittlere Zellspannung noch etwa 0,55 V.
- Auffällig ist der unterschiedlich stark ausgeprägte zeitliche Spannungsabfall für die fünf einzelnen Zellen. Die Zellen Nr. 1 und Nr. 5 (Randzellen) beginnen bei einer vergleichsweise geringen Spannung, was sich durch die erhöhte Wärmeabfuhr der Randzellen und eine dadurch etwas geringe Zelltemperatur erklären lässt. Der Gradient des Spannungsabfalls bis zum Betriebsende ist für diese zwei Zellen aber am geringsten. Am Betriebsende haben Zelle Nr. 1 und Zelle Nr. 5 die höchsten Spannungen.
- Das Betriebsende des Shortstacks ist nach 4700 h erreicht. Auslöser für das Beenden des Dauerversuchs ist das Erreichen einer Zellspannung von 0,1 V (Zelle Nr. 4). Der Spannungsabfall von Zelle Nr. 4 ist mit Abstand am höchsten. Hierfür gibt es zunächst keine plausible Erklärung. Eine Post-Mortem-Analyse kann Hinweise liefern.

3.3.2.2 CFD Simulation

Auch wenn eine externe Befeuchtung der Gase bei HT-PEFCs nicht notwendig ist, so ist die Leitfähigkeit der phosphorsäuredotierten PBI Membran dennoch von der Feuchte abhängig (IEK-3 Report 2015). Der Wassergehalt des Elektrolyten Phosphorsäure ist eine Funktion des Wasserdampfpartialdruckes in den Strömungskanälen und bestimmt den ohmschen Widerstand der Zelle. Die Verteilung des Produktwassers auf Anode and Kathode erlaubt zusätzlich Rückschlüsse auf den Zustand des Elektrolyten während des Brennstoffzellenbetriebs. Deshalb wurde im Rahmen eines vom Land NRW geförderten Projektes (FLEXSIM, Fördernummer: 313-EF-2019A) ein Simulationspaket entwickelt,

welche die numerische Strömungssimulation von Brennstoffzellen unter Berücksichtigung der Wasserverteilung erlaubt. Abb. 38 (links) zeigt eine typische HT-PEFC Einzelzelle, welche zur grundlegenden Charakterisierung im IEK-3 verwendet wird. Sie besitzt eine aktive Zellfläche von ca. 17 cm². Die Gasverteilung wird auf Anodenseite und Kathodenseite durch eine sogenannte dreifache Mäanderstruktur realisiert. Abb. 38 (rechts) zeigt diese Mäanderstruktur sowie einen Ausschnitt des Simulationsgitters des Luftkanals mit GDL.

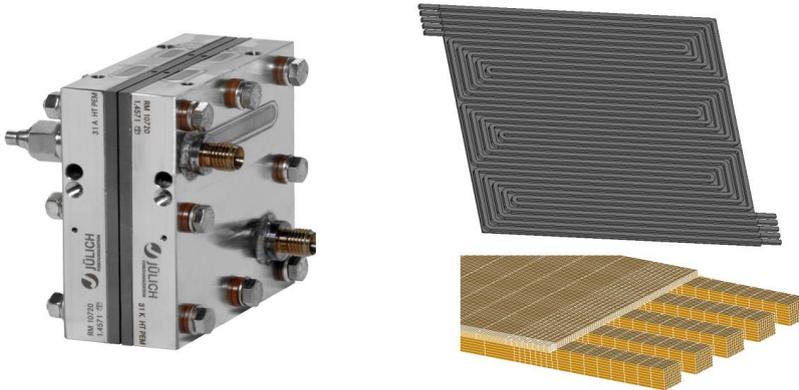


Abb. 38: HT-PEFC Einzelzelle (links) und mäanderförmiger Strömungsverteiler sowie Ausschnitt aus dem Simulationsgitter des numerischen Strömungsmodells (rechts)

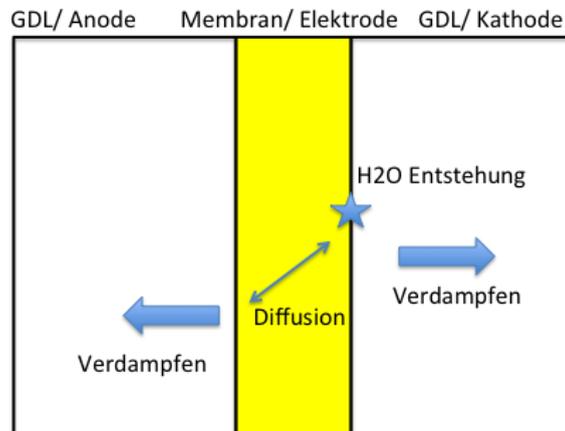


Abb. 39: Schema der Wasserverteilung in einer HT-PEFC

Die elektrochemischen Reaktionen finden im Rahmen des Modells flächenbezogen an der Grenzfläche zwischen Anode und Kathode statt. Die Modellierung der Wasserverteilung umfasst die folgenden Schritte: Berechnung der lokalen Menge an Produktwasser, Diffusion innerhalb des Elektrolyten, Verdampfung an der Grenzfläche des Katalysators zum Anoden- bzw. Kathodenraum. Diese Prozesse sind in Abb. 39 schematisch dargestellt.

Die Kopplung der numerischen Strömungssimulation mit der Elektrochemie und dem Modell der Wasserverteilung liefert Ergebnisse mit räumlich aufgelöster Verteilung von Stromdichte und Gasspezies. Abb. 40 zeigt als Beispiel die Verteilung des normalisierten Massenstroms (Massenbruch) an gasförmigem Wasser an der Grenzfläche des Katalysators an Anode und Kathode bei einem ausgewählten Betriebspunkt. Wasser wird elektrochemisch an der Kathode gebildet. Es ist deutlich zu erkennen, dass aufgrund der Diffusion durch den Elektrolyten eine ähnliche Wasserdampfverteilung auch an der Anode zu beobachten ist.

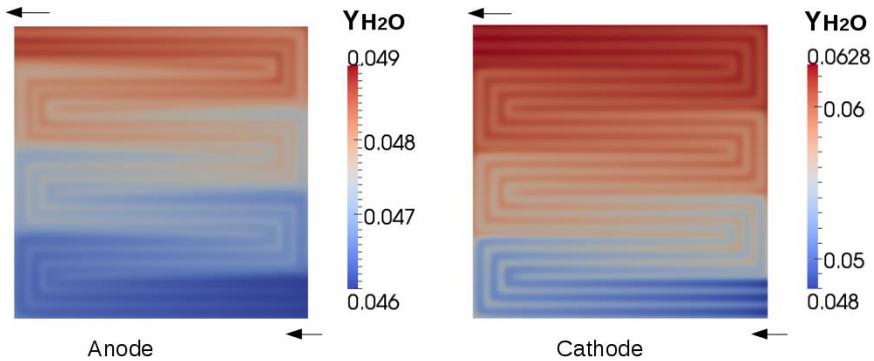


Abb. 40: Lokale Verteilung des Massenbruchs von Wasserdampf (160 °C, 101325 Pa, Stöchiometrie Luft/H₂ = 2/2)

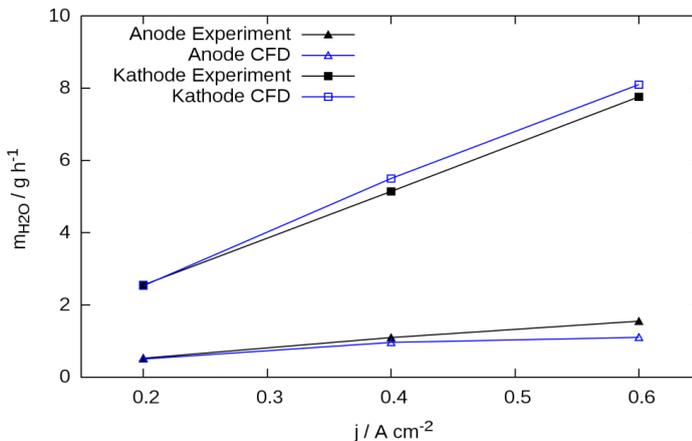


Abb. 41: Massenstrom an Wasserdampf an Anoden- und Kathodenseite als Funktion der Stromdichte - Vergleich zwischen Simulation und Experiment

Ein Vergleich mit dem Experiment zeigt, dass die Verteilung des Wassers im Abgasstrom von Anode und Kathode sehr gut reproduziert werden kann (s. Abb. 41).

Die Simulationsläufe wurden auf der JARA HPC Infrastruktur durchgeführt. Die notwendige Rechenzeit als Funktion der Rechnerkerne ist in Abb. 42 an einem Beispiel dargestellt. Die Skalierung zeigt, dass es nicht sinnvoll ist die Zahl der verwendeten Prozessoren in diesem

Beispiel über 700 zu erhöhen. Diese Simulationen wurden im Rahmen des JARA-HPC Projektes JARA0070 der RWTH Aachen durchgeführt.

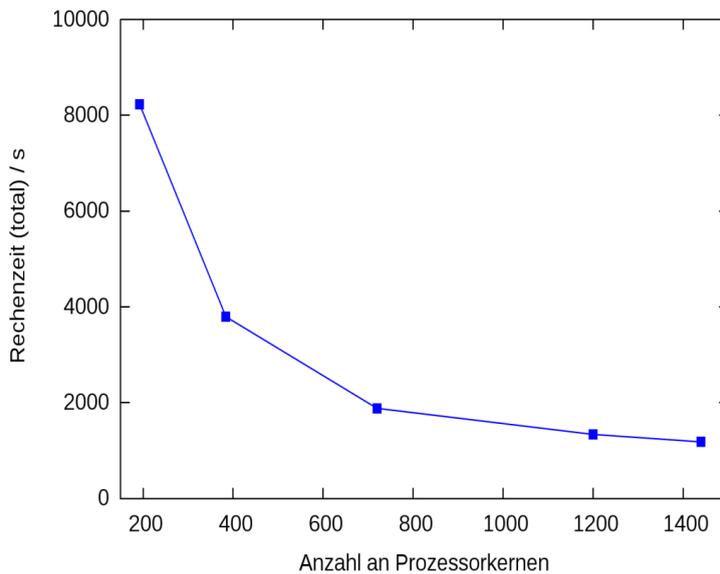


Abb. 42: Tatsächliche Rechenzeit als Funktion der verwendeten Prozessor-Kerne

3.3.3 Mitarbeiter und Tätigkeitsfelder

Name	Telefon-Nr. (02461-61-) e-mail Adresse	Tätigkeitsfeld
Prof. Dr. W. Lehnert	3915 w.lehnert@fz-juelich.de	Leiter der Abteilung Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen
Prof. Dr. M. Andersson (Gast)	9074 m.andersson@fz-juelich.de	CFD mit OpenFOAM, Volume of Fluid
Prof. Dr. S. Beale	8856 s.beale@fz-juelich.de	CFD mit OpenFOAM, Zell- und Stackebene
Fr. Y. Cai	6484 y.cai@fz-juelich.de	Elektrochemische Halbzellenuntersuchungen
Q. Cao	1923 q.cao@fz-juelich.de	CFD mit OpenFOAM auf Zellebene
D. Froning	6676 d.froning@fz-juelich.de	Lattice-Boltzmann Simulationen in porösen Komponenten

B. Hussain	8626 m.hussain@fz-juelich.de	Beschichtung von metallischen Bipolarplatten
P. Irmischer	9803 p.irmischer@fz-juelich.de	Stackmechanik
Dr. H. Janßen	5082 h.janssen@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe HT-PEFC Stackentwicklung
A. Kulikovskiy, PhD, DSci	5396 a.kulikovskiy@fz-juelich.de	Entwicklung analytischer und numerischer Brennstoffzellenmodelle
Fr. S. Krönauer	9576 s.kroenauer@fz-juelich.de	Beschichtung von metallischen Bipolarplatten
Fr. S. Lee	1923 s.lee@fz-juelich.de	CFD mit OpenFOAM auf Zellebene
R. Li	96924 r.li@fz-juelich.de	Korrosion von metallischen Bipolarplatten
Y Lin	9036 y.lin@fz-juelich.de	HT-PEFC Membranen
Sh. Liu	8626 Shu.liu@fz-juelich.de	HT-PEFC Elektroden
Y. Rahim	6029 y.rahim@fz-juelich.de	HT-PEFC Stack
Dr. U. Reimer	3537 u.reimer@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe HT-PEFC Modellierung und Simulation
Y. Shi	1902 y.shi@fz-juelich.de	PEFC Wassermanagement
Fr. B. Schumacher	5406 b.schumacher@fz-juelich.de	Entwicklung von Teststandkonzepten für HT-PEFC und Untersuchungen von HT-PEFCs
Dr. V. Weißbecker	9576 v.weissbecker@fz-juelich.de	Beschichtung von metallischen Bipolarplatten
Prof. L. Xu (Gast)	9074 l.xu@fz-juelich.de	Modellierung des dynamischen Brennstoffzellenverhaltens
J. Yu	2989 j.yu@fz-juelich.de	Lattice-Boltzmann Simulationen in porösen Komponenten
S. Zhang	96465 s.zhang@fz-juelich.de	CFD mit OpenFOAM, Zell- und Stackebene
Fr. W. Zou	9399 w.zou@fz-juelich.de	Modellierung des dynamischen Brennstoffzellenverhaltens

3.3.4 Wichtige Veröffentlichungen, Dissertationen und Patente

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

U. Reimer, B. Schumacher, W. Lehnert
Accelerated degradation of high-temperature polymer electrolyte fuel cells – discussion and empirical modeling
J. Electrochemical Soc. 162 (2015) F153-F164

C. Tötze, I. Manke, G. Gaiselmann, J. Bohner, B. Müller, A. Kupsch, M. P. Hentschel, V. Schmidt, J. Banhart, W. Lehnert

A Dedicated Compression Device for High Resolution X-ray Tomography of Compressed Gas Diffusion Layers

Review of scientific instruments, 86 (2015) 043702

C. Korte, F. Conti, J. Wackerl, P. Dams, A. Majerus, W. Lehnert

Uptake of Protic Electrolytes by Polybenzimidazole-Type Polymers –Adsorption Isotherm and Electrolyte/Polymer Interactions

Journal of Applied Electrochemistry 45 (2015) 857-871

T. Arlt, W. Lüke, N. Kardjilov, J. Banhart, W. Lehnert, I. Manke

Monitoring the hydrogen distribution in Poly(2,5-benzimidazole)-based (ABPBI) membranes in operating High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cell using H-D contrast neutron imaging

J. Power Sources 299 (2015) 125-129

SB Beale

Mass transfer formulation for polymer electrolyte membrane fuel cell cathode

International Journal of Hydrogen Energy 40 (2015), 11641-11650

T Reshetenko, A Kulikovskiy

PEM Fuel Cell Characterization by Means of the Physical Model for Impedance Spectra

Journal of The Electrochemical Society 162 (2015), F627-F633

AA Kulikovskiy, P Berg

Positioning of a Reference Electrode in a PEM Fuel Cell

Journal of The Electrochemical Society 162 (2015), F843-F848

AA Kulikovskiy

Potentials Near a Curved Anode Edge in a PEM Fuel Cell: Analytical Solution for Placing a Reference Electrode

Journal of The Electrochemical Society 162 (2015), F1191-F1198

AA Kulikovskiy

One-dimensional impedance of the cathode side of a PEM fuel cell: Exact analytical solution

Journal of The Electrochemical Society 162 (2015), F217-F222

AA Kulikovskiy, O Shamardina

A model for PEM fuel cell impedance: Oxygen flow in the channel triggers spatial and frequency oscillations of the local impedance

Journal of The Electrochemical Society 162 (2015), F1068-F1077

AA Kulikovskiy

A simple and accurate fitting equation for half of the faradaic impedance arc of a PEM fuel cell

Journal of Electroanalytical Chemistry 738 (2015) 108-112

AA Kulikovskiy

Analysis of Damjanović kinetics of the oxygen reduction reaction: Stability, polarization curve and impedance spectra

Journal of Electroanalytical Chemistry 738 (2015) 130-137

P Berg, AA Kulikovskiy

A model for a crack or a delaminated region in a PEM fuel cell anode: analytical solutions

Electrochimica Acta 174 (2015) 424-429

K. Wippermann, J. Wackerl, W. Lehnert, B. Huber, C. Korte

2-Sulfoethylammonium trifluoromethanesulfonate as an Ionic Liquid for High Temperature PEM Fuel Cells

J. Electrochem. Soc. 163 (2016) F25-F37

U. Reimer, J. Ehlert, H. Janßen, W. Lehnert

Water distribution in high temperature polymer electrolyte fuel cells

Int. J. Hydrogen Energy 41 (2016) 1837-1845

Y. Liu, W. Lehnert, H. Janßen, R.C. Samsun, D. Stolten

A review of high-temperature polymer electrolyte membrane fuel-cell (HT-PEMFC)-based auxiliary power units for diesel-powered road vehicles

J. Power Sources 311 (2016) 91-102

D. Froning, J. Yu, G. Gaiselmann, U. Reimer, I. Manke, V. Schmidt, W. Lehnert

Impact of compression on gas transport in non-woven gas diffusion layers of high temperature polymer electrolyte fuel cells

J. Power Sources 318 (2016) 26-34

C. Tötze, G. Gaiselmann, M. Osenberg, T. Arlt, H. Markötter, A. Hilger, A. Kupsch, B.R. Müller, V. Schmidt, W. Lehnert, I. Manke

Influence of hydrophobic treatment on the structure of compressed gas diffusion layers

J. Power Sources 324 (2016) 625-636

A. Niemöller, P. Jakes, S. Kayser, Y. Lin, W. Lehnert, J. Granwehr

3D printed sample holder for in operando EPR spectroscopy on high temperature PEM fuel cells

Journal of Magnetic Resonance 269 (2016) 157-161

J. Gostick, M. Aghighi, J. Hinebaugh, T. Tranter, M.A. Hoeh, H. Day, A. Bazylak, A. Burns, W. Lehnert, A. Putz

OpenPNM: A Pore Network Modeling Package

Comput. Sci. Eng. 18 (2016) 60

M. Andersson, S. Beale, M. Espinoza, Z. Wu, W. Lehnert

A review of cell-scale multiphase flow modeling, including water management, in polymer electrolyte fuel cells

Applied Energy 180 (2016) 757-778

M. Khanef, O. Holderer, O. Ivanova, W. Lüke, E. Kenzinger, M.S. Appavou, R. Zorn, W. Lehnert,

Structure and proton dynamics in catalytic layer for HT-PEFC

Fuel cells 16 (2016) 406-413

M. Fazeli; J. Hinebaugh; Z. Fishman; Ch. Tötze; W. Lehnert; I. Manke, A. Bazylak

Pore network modeling to explore the effects of compression on multiphase transport in polymer electrolyte membrane fuel cell gas diffusion layers

J. Power Sources 335 (2016) 162-171

T Reshetyenko, A Kulikovskiy
Comparison of two physical models for fitting PEM fuel cell impedance spectra measured at a low air flow stoichiometry
Journal of The Electrochemical Society 163 (2016), F238-F246

AA Kulikovskiy
PEM Fuel Cell Impedance at Open Circuit
Journal of The Electrochemical Society 163 (2016), F319-F326

T Reshetyenko, A Kulikovskiy
Variation of PEM Fuel Cell Physical Parameters with Current: Impedance Spectroscopy Study
Journal of The Electrochemical Society 163 (2016), F1100-F1106

AA Kulikovskiy
A simple physics-based equation for low-current impedance of a PEM fuel cell cathode
Electrochimica Acta 196 (2016) 231-235

AA Kulikovskiy
Non-Pt Catalyst Layer Operation in a PEM Fuel Cell: A Variable-thickness Regime
Fuel Cells 16 (2016), 754-759

Veröffentlichungen in Büchern

W. Lehnert, U. Reimer, H. Janßen
Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen
In: R. Peters (Eds.), Brennstoffzellensysteme in der Luftfahrt, Springer Vieweg, Springer Verlag Berlin Heidelberg 2015, pp 101-144

H. Janßen, A. Bendzulla, W. Lehnert
Stackentwicklung Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen
In: R. Peters (Eds.), Brennstoffzellensysteme in der Luftfahrt, VDI-Springer, Springer Vieweg, Springer Verlag Berlin Heidelberg 2015, pp 145-180

H. Janßen, J. Supra, W. Lehnert
Chapter 20, Stack Concepts for High Temperature Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells
In: Jens Oluf Jensen, David Aili, Hans Aage Hjuler, Qingfeng Li, High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells- Approaches, Status and Perspectives, Springer (2016) pp 441-457

C. Korte, F. Conti, J. Wackerl, W. Lehnert
Chapter 8, Phosphoric acid and its interactions with polybenzimidazole type polymers
In: Jens Oluf Jensen, David Aili, Hans Aage Hjuler, Qingfeng Li, High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells- Approaches, Status and Perspectives, Springer (2016) pp 169-194

W. Lehnert, L. Lüke, R. C. Samsun
High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells
In: D. Stolten, R.C. Samsun, N. Garland, Fuel Cells, Data Facts and Figures, Wiley-VCH (2016) pp 235-247

Dissertationen

Weißbecker, V.

Korrosionsverhalten metallischer Bipolarplatten von Hochtemperatur-Polymer-elektrolyt-Brennstoffzellen

Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, 357 (2016), ISBN 978-3-95806-205-4

Wichtige Patente

Patentanmeldungen:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
Dr. A.A. Kulikovsky	1.2690	Verfahren zur Ermittlung von Überspannungen in Brennstoffzellen
Dr. A.A. Kulikovsky	1.2700	Verfahren zur Ermittlung von Überspannungen in Brennstoffzellen
A. Schulze Lohoff	1.2766	Beschichtung für einen elektrischen Kontakt sowie Verfahren zur Herstellung desselben

3.4 Direktmethanol-Brennstoffzellen

3.4.1 Ziele und Tätigkeiten

Flüssige Energieträger wie Methanol haben den Vorteil der einfachen Handhabung und der hohen Energiedichte. Im Vergleich zu dem für Brennstoffzellen häufig genutzten Energieträger Wasserstoff sind keine Druckgasbehälter, die insbesondere für kleine Wasserstoffmengen überproportional schwer und voluminös sind, erforderlich. Außerdem können die Vorratsbehälter einfach nachgefüllt werden, ähnlich wie bei Benzin oder Diesel. Dass Stoffe bei Umgebungsbedingungen flüssig sind, ist auf die intermolekularen Wechselwirkungen aufgrund ihrer komplizierteren chemischen Struktur zurückzuführen. Diese führt jedoch auch dazu, dass sie elektrochemisch nicht so leicht und schnell umgesetzt werden können, wie Wasserstoff. Daher ist für Direktmethanol-Brennstoffzellen eine größere Katalysatormenge erforderlich und die Leistungsdichte und der Wirkungsgrad sind geringer. Direktmethanolbrennstoffzellen sind daher insbesondere dann geeignet, wenn bei moderaten Leistungsanforderungen bis zu einigen kW lange Betriebszeiten ohne nachtanken erforderlich sind oder die Systeme mobil sind und der Brennstoff daher an Bord mitgeführt werden muss. Daher sind die Hauptanwendungsgebiete, auf die sich das IEK-3 konzentriert, kleine mobile Anwendungen, wie im Bereich Material Handling und die Unterbrechungsfreie Stromversorgung (USV), insbesondere an abgelegenen Standorten, wo häufiges Nachtanken nicht praktikabel ist.

3.4.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.4.2.1 Direktmethanol-Brennstoffzellen mit fließendem Elektrolyten

Prof. C. Ozgur Colpan von der Dokuz Eylul Universität in Izmir, Türkei war im Rahmen eines individuellen Horizon 2020 Stipendiums mit einem Mitarbeiter für drei Monate als Gastwissenschaftler am IEK-3 tätig. Im Rahmen des Gastaufenthaltes von Prof. Ozgur Colpan und Dr. David Ouellette, wurden umfangreiche experimentelle Untersuchungen an Direktmethanol-Brennstoffzellen (DMFCs) mit fließendem Elektrolyten durchgeführt. Konventionelle DMFCs leiden unter der Permeation von Methanol von der Anode zur Kathode, wo das Methanol nicht nur ungenutzt verbraucht wird, sondern zusätzlich den Katalysator der Kathode blockiert, was den Wirkungsgrad und die Leistung der DMFC verringert. Durch den fließenden Elektrolyten wird Methanol, welches in den Elektrolyten eindringt, ausgetragen, bevor es die Kathode erreicht. Prof. Colpan und Dr. Ouellette hatten das Konzept bereits durch umfangreiche Simulationen, sowie erste Experimente untersucht. Ziel des Gastaufenthaltes war es, die umfangreichen Erfahrungen im IEK-3 im Betrieb von DMFCs und in der Bestimmung der Methanolpermeation zu nutzen, um das Potential des Konzeptes experimentell zu bestätigen.

Für die Messungen wurden im Forschungszentrum nach einem Entwurf der Gastwissenschaftler spezielle Messzellen aus schwefelsäureresistentem Spezialstahl angefertigt. Zwei im IEK-3 vorhandene Teststände mit Messung der Methanolpermeation wurden für den Betrieb mit Schwefelsäure als fließendem Elektrolyten umgebaut.

Die in Jülich mit diesen Zellen durchgeführten Messungen zeigen, dass je nach Methanolkonzentration und Stromdichte tatsächlich eine erhebliche Verringerung der Methanolpermeation möglich ist.

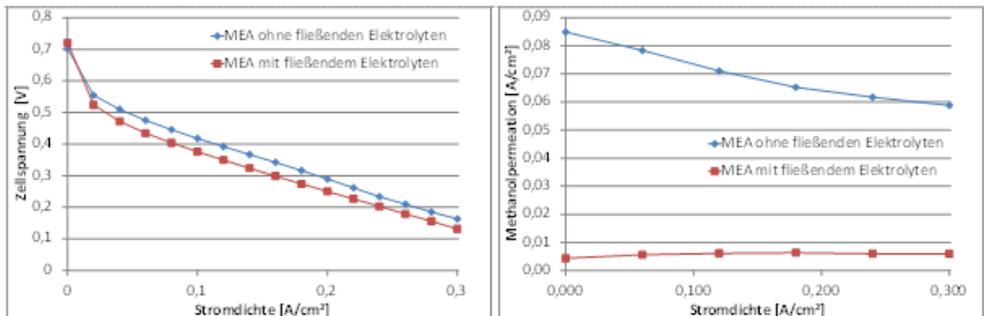


Abb. 43: Kennlinien (links) und Methanolpermeation (rechts) von MEA mit und ohne fließenden Elektrolyten (70°C, 1M Methanol)

In Abb. 43 ist das Verhalten von MEAs mit und ohne fließenden Elektrolyten dargestellt. Beide MEAs bestehen aus zwei Halb-MEAs, die jeweils aus einer Membran (Nafion® 115) und einer Anode oder einer Kathode bestehen. In einem Fall sind diese Halb-MEAs direkt miteinander verpresst, im anderen sind sie durch einen 175 µm dicken porösen Kanal, der von 2M Schwefelsäure durchströmt wird getrennt. Die Kennlinien verlaufen weitgehend parallel, jedoch geringfügig gegeneinander verschoben. Aus dem parallelen Verlauf kann geschlossen werden, dass der ohmsche Widerstand der Zelle mit fließendem Elektrolyten nicht signifikant erhöht ist. Die erwartete Erhöhung der Zellspannung durch Verhinderung der Methanoloxidation an der Kathode kann jedoch nur im stromlosen Betrieb beobachtet werden. Die geringfügig verringerte Zellspannung der Zelle mit fließendem Elektrolyten wird vermutlich durch eine geringe Menge Schwefelsäure, die durch die Membran an die Elektroden gelangt verursacht.

Besonders deutlich ist der Unterschied in der Methanolpermeation. Bei der MEA mit fließendem Elektrolyten wird die Permeation um mindestens 90 % gegenüber der MEA ohne Permeation verringert. Das führt zu einem deutlich höheren Methanolnutzungsgrad. Bei einer Stromdichte von 0,12 A/cm² geht ohne fließenden Elektrolyten eine Methanolmenge, die zur Erzeugung von 0,071 A/cm² genutzt werden könnte, durch Oxidation an der Kathode verloren, so dass der Methanolnutzungsgrad nur 63 % beträgt. Mit fließendem Elektrolyten verringert sich der Verlust auf 0,006 A/cm², so dass der Methanolnutzungsgrad auf 95 % steigt. Bei der höchsten getesteten Stromdichte von 0,3 A/cm² beträgt der Methanolnutzungsgrad sogar über 98 %.

In einem autonom arbeitenden System muss allerdings zusätzlich das durch die Schwefelsäure ausgetragene Methanol zurückgewonnen werden, damit der deutlich erhöhte

Methanolnutzungsgrad zur Erhöhung des Gesamtwirkungsgrad genutzt werden kann. Die Ergebnisse dieser Messungen wurden im Detail veröffentlicht².

3.4.2.2 Tests neuer Katalysatormaterialien

Ein erheblicher Anteil der Kosten eines DMFC-Systems wird durch die relativ hohe Menge an Edelmetallkatalysator, die in der DMFC benötigt wird, verursacht. Daher ist die Erforschung von Katalysatorschichten mit geringerer Edelmetallbelegung und die Untersuchung neuer Katalysatoren, die eine höhere Leistungsfähigkeit haben und daher in geringerer Menge eingesetzt werden können, ein wichtiges Arbeitsfeld. Als besonders vielversprechend für die Kathode haben sich dabei hierarchisch strukturierte Katalysatoren vom Centrum für Angewandte Nanotechnologie (CAN) in Hamburg erwiesen. Bereits mit $30 \mu\text{gcm}^2$ Platin konnte, anders als mit kommerziellem Katalysator, eine akzeptable Leistung der Zelle erreicht werden. In Abb. 44 sind die Kennlinien von MEAs mit hierarchisch strukturierter Kathode und mit der gleichen Menge kommerziellen Katalysators dargestellt.

Zum Vergleich ist die Kennlinie mit kommerziellem Katalysator in der Stromdichte um den Faktor sechs multipliziert dargestellt und man sieht, dass diese etwa mit der Kennlinie mit hierarchisch strukturierter Kathode übereinstimmt. Es kann also mit der gleichen Katalysatormenge etwa die sechsfache Strommenge erzeugt werden.

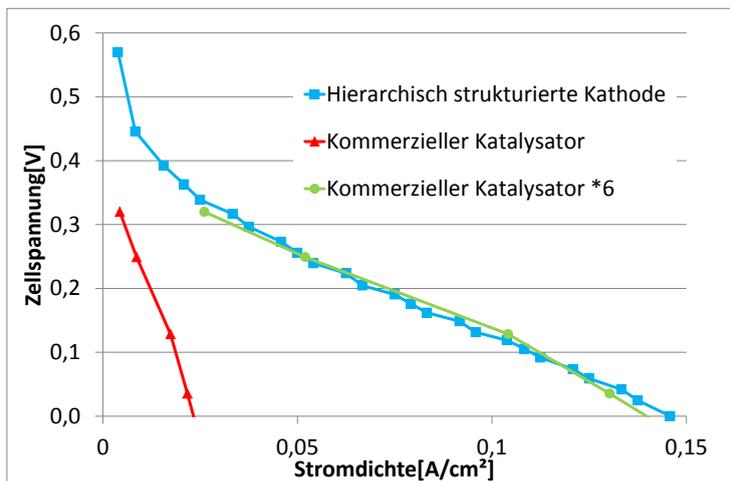


Abb. 44: Kennlinien von MEAs mit Hierarchisch strukturierte Kathode (blau), und Kathode mit der gleichen Menge kommerziellen Katalysator (rot). Als Vergleich ist für die MEA mit kommerziellem Katalysator die Stromdichte mit 6 multipliziert dargestellt (grün)

Die Leistungsfähigkeit ist jedoch geringer als mit Standard-MEAs, die allerdings auch etwa die hundertfache Platinmenge für die Kathode benötigen. Aufgrund der im Vorversuch erhaltenen Ergebnisse ist zu erwarten, dass zur Erreichung der gleichen Leistung, wie mit kommerziellen

² Colpan, C.O., Ouellette, D., Glüsen, A. Müller, M., Stolten, D.: Reduction of methanol crossover in a flowing electrolyte-direct methanol fuel cell. International Journal of Hydrogen Energy (2017) DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.01.004

Katalysatoren eine deutlich geringere Platinmenge benötigt werden wird. Dies kann jedoch wegen der derzeit noch aufwändigen Herstellung der hierarchisch strukturierten Kathoden nicht einfach überprüft werden. Daher wurde gemeinsam mit dem CAN, der Uni Hamburg und Smart Fuel Cells als Anwender ein Verbundprojekt beim BMBF beantragt, um die Katalysatoren zu optimieren, ihre Herstellung zu automatisieren und ihre Leistungsfähigkeit zu evaluieren³.

Darüber hinaus werden immer wieder neue Katalysatoren verschiedener Forschungsgruppen getestet, um den Edelmetallbedarf der Brennstoffzellen zu verringern. Zusätzlich zu den oben erwähnten Kathodenkatalysatoren werden dabei insbesondere auch Anodenkatalysatoren untersucht.

3.4.2.3 Feldtest eines DMFC-Systems zur Notstromversorgung für den BOS-Digitalfunk der Polizei NRW

Mit dem sogenannten DMFC-USV-System konnte von Januar bis November 2016 ein gemeinsamer Feldtest mit der Polizei NRW erfolgreich durchgeführt werden. Bei der Zusammenarbeit ging es darum, die unterbrechungsfreie Stromversorgung (USV) einer Digitalfunkanlage der Polizei mit einem Modul aus Direktmethanol-Brennstoffzellen (DMFCs) zu sichern. In der Testphase schaffte es die Anlage (siehe Abb. 45), die geforderten 72 Stunden Notstrombetrieb sicherzustellen.



Abb. 45: Projektpartner am BOS-Funktstandort mit DMFC-USV-System

Besonders erfreulich war, dass die Anlage sowohl im Winter bei Temperaturen unter null Grad als auch im Sommer bei mehr als 35 Grad die geforderte Leistung bereitstellen konnte. Für

³ Hierarchische Komposit-Nanopartikelsysteme zur Anwendung in Brennstoffzellen – Entwicklung und kontinuierliche Herstellung (HiKAB), Förderkennzeichen (FKZ): 03ET1435C - HiKAB

das Modul zur Notstromversorgung einer Anlage des "Digitalfunks für Behörden und Organisationen mit Sicherheitsaufgaben (BOS)", wurden zwei DMFC-Systeme mit jeweils zwei Kilowatt Leistung über einen Wechselrichter mit der Einspeisestelle für die Notstromversorgung der Digitalfunkanlage verbunden. Die zwei DMFC-Systeme waren bereits im Rahmen des Helmholtz-Validierungsfonds aufgebaut und für den Feldtest in einen Outdoorcontainer integriert worden. Dieser wurde am BOS-Funktstandort aufgebaut und gemäß folgendem Schema (siehe Abb. 46) mit der Digitalfunkanlage verbunden:

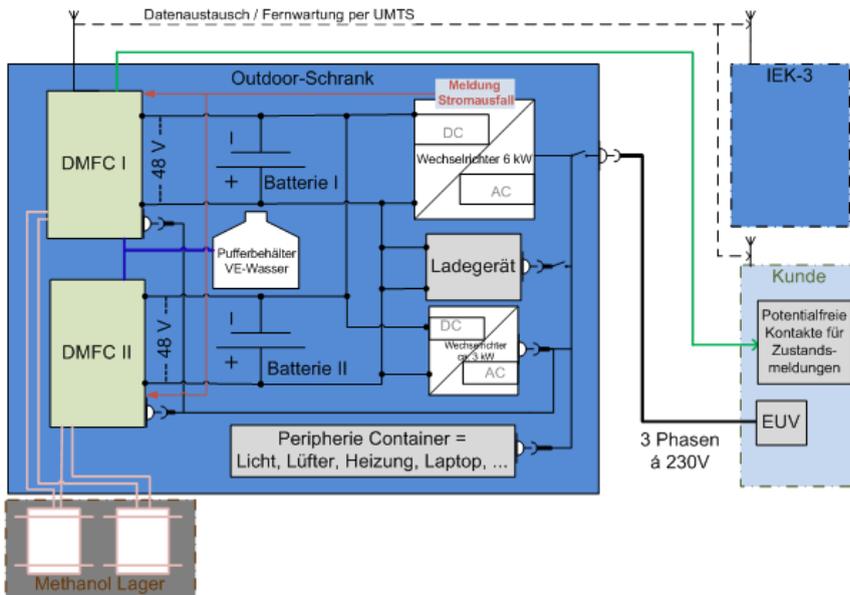


Abb. 46: Schematischer Aufbau DMFC-USV-System

Im Rahmen einer Masterarbeit wurde der Feldtest hinsichtlich der Energieeffizienz und der Alterung der Brennstoffzellen untersucht. Bezüglich der Effizienz konnte ein Wirkungsgrad von über 28 % die Erwartungen erfüllen. Die Alterung der Brennstoffzellen belief sich auf 2 bis 5 $\mu\text{V}/\text{h}$ bezogen auf die kalendarische Zeit, womit das Projektziel von 1,5 $\mu\text{V}/\text{h}$ nicht ganz erreicht wurde. Die Betriebserfahrungen mit dem System zeigen, dass es für den Einsatz in der unterbrechungsfreien Stromversorgung gut geeignet ist. Optimierungen des Systems und der Steuerungssoftware konnten im praktischen Einsatz vorgenommen und Verbesserungsvorschläge für künftige Systeme aufgezeigt werden. Aus Sicht der Energiedichte wurde mit den verwendeten Stacks ein Meilenstein der PoF (M 3.1-22) erfüllt. Tab. 5 zeigt, dass die Marke von 100 W/Liter überschritten wurde:

Systemgrenze		Auslegung Stack		Stack			
		BOL	EOL	RW 117 Indoor, Beste Leistung Einfahren	RW 118 Outdoor, Beste Leistung Einfahren	RW 117 Indoor, 15.02.2015 Test bei FC-Power	RW 118 Outdoor, 26.11.2015 IBN USV-Container
Leistung	W	3.900	2.400	3.831	3.750	1.840	2.050
Länge	dm	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7
Breite	dm	3,8	3,8	3,8	3,8	3,8	3,8
Höhe	dm	2,1	2,1	2,1	2,1	2,1	2,1
Volumen	Liter	21,5	21,5	21,5	21,5	21,5	21,5
Leistungsdichte	W/L	181,01	111,39	177,79	174,03	85,40	95,15

Tab. 5: Leitungsdichte DMFC-USV-Stacks

Michael Cieslik vom Landesamt für Zentrale Polizeiliche Dienste in Duisburg begleitete das Projekt aus Anwendersicht und koordinierte die Tests für die Polizei. Seine Bilanz fiel positiv aus: "Der erfolgreiche Abschluss des Projekts ist eine deutliche Empfehlung, den Prototyp des Jülicher Brennstoffzellensystems fortzuentwickeln und zur Serienreife zu bringen, zum Beispiel für die Notstromversorgung."

Weitere aktuelle Forschungsprojekte des IEK-3 tragen dazu bei, die Kosten für solche Anlagen zu senken. Sie setzen dabei zum Beispiel auf neue Materialien für die Membran-Elektrodeneinheit, das Kernstück jeder Brennstoffzelle. Auch neuartige Beschichtungstechniken für die sogenannten Bipolarplatten werden untersucht. Beide Projekte könnten dazu beitragen, weniger Edelmetalle zu verwenden, die bei den Kosten entsprechend zu Buche schlagen. Somit ist im IEK-3 umfangreiches Know-How vorhanden, das für eine künftige kommerzielle Fertigung von DMFC-Systemen an Industriepartner transferiert werden kann.

3.4.3 Mitarbeiter und Tätigkeitsfelder

Name	Telefon-Nr. (02461-61-) e-mail Adresse	Tätigkeitsfeld
Dr. M. Müller	1859 mar.mueller@fz-juelich.de	Abteilungsleitung
Dr. A. Glösen	5171 a.gloesen@fz-juelich.de	MEA-Entwicklung
M. Hehemann	5431 m.hehemann@fz-juelich.de	Stack- und Systementwicklung

R. Keller	4124 r.keller@fz-juelich.de	Steuerungsentwicklung
W. Zwaygardt	2103 w.zwaygardt@fz-juelich.de	Stack- und Systementwicklung

3.4.4 Wichtige Veröffentlichungen, Dissertationen und Patente

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

Schulze Lohoff, A.; Günther, D.; Hehemann, M.; Müller, M.; Stolten, D
Extending the lifetime of direct methanol fuel cell systems to more than 20,000 h by applying ion exchange resins,
International Journal of Hydrogen Energy, 41 (2016), 15325-15334

Veröffentlichungen in Büchern

Müller, M.
Fuel Cell Forklift Systems,
in Fuel Cells: Data, Facts, and Figures, First Edition. Stolten, D.; Samsun, R.C.; Garland, N., (Eds.), 2016, Wiley-VCH, Weinheim, p. 323-333

Andere Veröffentlichungen

Müller, M.; Hehemann, M.; Keller, R.; Stolten, D.
2 kW-USV auf Methanolbasis für den Mobilfunk
Anwender-/Expertenworkshop der EnergieAgentur NRW, Duisburg, 2016

Wichtige Patente

Patentanmeldungen:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
Dr. A.A. Kulikovskiy	1.2644	Direkt-Alkohol-Brennstoffzelle mit effektiver CO ₂ -Entfernung sowie Verfahren zum Betreiben einer solchen Direkt-Alkohol-Brennstoffzelle

Erteilte Patente:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
Dr. K. Wippermann	1.2318	Verfahren zur elektrochemischen Aktivierung von Brennstoffzellen
Dr. M. Stähler	1.2326	Abgasreinigung für eine Brennstoffzelle bzw. einen Brennstoffzellenstapel

Dr. M. Müller	1.2331	Brennstoffzellensystem und Verfahren zur Regelung eines Brennstoffzellensystems
Dr. A. A. Kulikovskiy	1.2426	Katalysatorschicht für den Einsatz in einer Brennstoffzelle sowie Verfahren zu dessen Herstellung
Dr. A. A. Kulikovskiy	1.2544	Direkt-Methanol-Brennstoffzelle und Verfahren zum Betreiben derselben
Dr. A. A. Kulikovskiy	1.2601	Verfahren zur Charakterisierung der Katalysatorstruktur in einer Brennstoffzelle, sowie dazu geeignetes Brennstoffzellendesign
Dr. J. McIntyre	1.2616	Niedertemperatur- Brennstoffzelle und Verfahren zum Betreiben derselben

3.5 Wasserelektrolyse

3.5.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Die Arbeiten der Abteilungen „Elektrochemie Elektrolyse – EEL“ und „Verfahrenstechnik Elektrolyse – VEL“ konzentrieren sich auf die Entwicklung großtechnischer Elektrolyseure mit Polymerelektrolytmembran (PEM) zusammen mit auf diesem Gebiet führenden Industrieunternehmen. Dabei stehen Themen wie Kostenreduktion, Erhöhung der Lebensdauer und Leistungsdichte im Vordergrund. Konkret geht es zum einen um die Entwicklung neuer Membrantypen für die PEM-Elektrolyse, um die bisher verwendeten 175 bis 200 μm dicken extrudierten Nafion-Membranen zu ersetzen, die in den geplanten Großsystemen keine ausreichende mechanische und chemische Stabilität unter Drücken von mehr als 50 bar aufweisen. Zum anderen geht es um die Reduktion und im Idealfall komplette Substitution der üblicherweise verwendeten Platingruppenmetalle Iridium, Ruthenium und Platin, die heute mit einer Beladung von rund 4 mg/cm^2 für die katalytische Reaktionen eingesetzt werden. Um den Einsatz der PEM-Elektrolyse langfristig im GW-Maßstab für die Speicherung großer Energiemengen aus regenerativ erzeugtem Strom wirtschaftlich zu ermöglichen, muss der Einsatz der Platingruppenmetalle um mindestens 90 % reduziert werden bei gleichzeitiger Steigerung der Überlastfähigkeit der Membran-Elektroden-Einheiten auf mehr als 6 W/cm^2 und einer Dauerstabilität von 40.000 Stunden oder mehr. In einem weiteren Arbeitspaket werden neue kostengünstige Materialien und Beschichtungstechniken für metallische Separatorplatten und Stromverteiler entwickelt, um den Anteil der Kosten von heute 48 % an den Stack-Kosten ebenfalls nachdrücklich zu reduzieren.

3.5.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.5.2.1 Entwicklung fortschrittlicher poröser Strukturen für die Elektrolyse

In einem Institutsübergreifenden Projekt werden mit dem IEK-1 und industriellen Partnern fortschrittlicher poröser Strukturen für Elektrolyseure entwickelt. Am IEK-3 erfolgt die Definition der einzuhaltenden geometrischen und mechanischen Parameter, während am IEK-1 die sintermetallurgische Herstellung der Schichten erfolgt. Anschließend werden die vom IEK-1 hergestellten Sinterkörper am IEK-3 in einer Standardzelle mit effektiver Fläche von 17,64 cm^2 mit kommerziellen CCMs (Greenenergy) aufgebaut und elektrochemisch charakterisiert.

Es wurden Polarisationskurven bei einer Temperatur von 80 °C aufgenommen. Anschließend wurde von jeder Zelle ein Impedanzspektrum aufgenommen. Die Ergebnisse der Impedanzspektroskopischen Untersuchungen werden anschließend dargestellt und diskutiert. In der Parameterstudie des IEK-1 wurden kugelförmige sowie formlose Titan Partikel mit Partikelfraktionen unter 45 μm bei vier unterschiedlichen Temperaturen versintert (800 °C, 900 °C, 1000 °C, 1200 °C). Um den Einfluss der Probendicke auf die Zelleistung festzustellen, wurden Proben mit einer Dicke von 250 μm und 500 μm hergestellt.

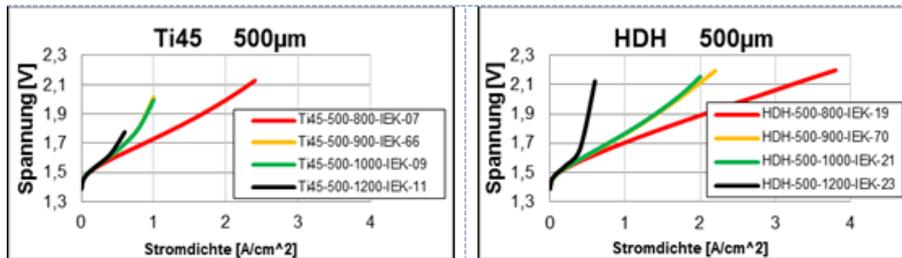


Abb. 47: Polarisationskurven 500 µm dicken Proben aus der Parameterstudie (800 °C, 900 °C, 1000 °C, 1200 °C)

Wie man Abb. 47 entnehmen kann zeigen die Zellen der bei 1200 °C gesinterten Stromkollektoren frühere Massentransportlimitierung, unabhängig von Dicke der Stromkollektoren oder Form der Titanpartikel. Die schwarz dargestellten Kurven zeigen ein Abknicken bei 0,5 A/cm². Bei weiterem Erhöhen der Stromdichte steigt die Spannung enorm. Bessere Leistung zeigen die Zellen mit den Stromkollektoren, die bei niedrigen Temperaturen gesintert wurden. Niedrige Sintertemperaturen erlauben es eine höhere Porosität zu erhalten und dies führt zu höhere Stromdichten von rund 2,6 A/cm² bei 2 V Spannung.

Im Rahmen der Sinterstudie wurde auch die Dicke eines Stromkollektortyps variiert und die Polarisationskurven bei verschiedenen Probendicken miteinander verglichen. Die Ausgangsproben wurden aus „spratzigem“ Titanpulver (HDH) bei einer Sinteremperatur von 1000°C hergestellt. Die Dicke der Proben variierte von 150 µm bis 650 µm.

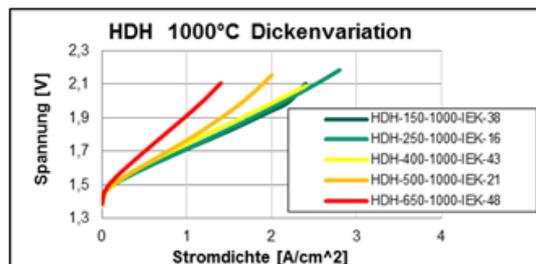


Abb. 48: Polarisationskurven von Proben aus HDH-Titan bei einer Sinteremperatur von 1000°C (150 µm, 250 µm, 400 µm, 500 µm, 650 µm)

In Abb. 48 sind die U-I-Kurven der Proben aus der Dickenvariations-Studie dargestellt. Aus der Abbildung geht hervor, dass mit gesteigerter Stromkollektordicke die Performance der Zelle sinkt. Die Kurven der 150 µm bis 400 µm dicken Stromkollektoren zeigen jedoch nur sehr geringe Abweichungen voneinander, sodass der Dickenunterschied im diesem Bereich keinen großen Einfluss hat. Daraus lässt sich schließen, dass für eine optimale Performance Stromkollektoren mit einer Dicke kleiner 400 µm eingesetzt werden sollten.

Des Weiteren wurde der Einfluss der Titanpulver-Fractionen von Stromkollektoren auf die Zelleistung untersucht. Zum Einsatz kamen runde Titanpartikel mit Partikelfractionen < 45 µm, 45-75 µm und 75-100 µm. Diese wurden mit formlosen Partikeln mit Partikelfractionen < 45 µm verglichen. Die Polarisationskurven sind in Abb. 49 dargestellt.

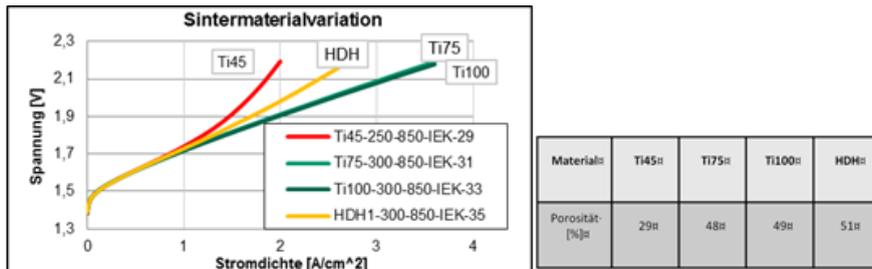


Abb. 49: Polarisationskurven von Proben der Titanpulvergrößenvariation bei 850 °C gesinterten mit ca. 300 µm Dicke. Runde Partikeln der Fraktionen < 45 µm (Ti45); Partikelfraktion 45-75 µm (Ti75); Partikelfraktion 75-100 µm (Ti100); Formlose Titanpartikeln < 45 µm (HDH).

Entsprechend der Tabelle rechts hat die Ti45 Sinterfolie die kleinste Porosität und auch die schlechteste Leistung. Die beiden Stromkollektoren Ti75 und Ti100 weisen fast dieselben Porositäten (48 % und 49 %) auf und die U/I-Kurven liegen fast übereinander. Der Stromkollektor aus formlosen Titanpartikeln hat die höchste Porosität von 51 %, jedoch nicht die beste Leistung. Viel wichtiger als die Gesamtporosität von Stromkollektoren ist somit die Porenform. Um die Porenform in Abhängigkeit von Pulverform und Sinterterperatur zu bestimmen sind weitere Messungen erforderlich.

Es wurden zudem Titan und Edelstahl Streckmetalle mit vier unterschiedlichen Maschenweiten getestet. Die Sinterplatten und die Streckmetalle wurden aufeinander gelegt und die Kontaktierung wurde nur durch den Anpressdruck gewährleistet. Der Dickenunterschied wurde durch angepasste Dichtung kompensiert.

Die Streckmetalle wurden einmal direkt zwischen MEA und Flow Field Platte eingebaut und getestet, so wie es in Abb. 50 a) schematisch dargestellt ist. Als Vergleich zu dieser Messung wurde die Zellen mit einer Sinterfolie zwischen der MEA und dem Streckmetall verbaut und getestet, um die elektrische Kontaktierung zu verbessern. Den schematischen Aufbau sieht man in Abb. 50 b).

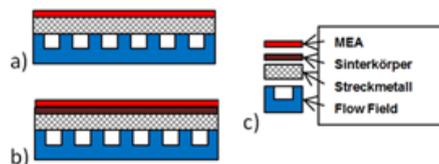


Abb. 50: Schematisch dargestellter Zellaufbau: a) MEA in direktem Kontakt zu Streckmetall; b) Zwischen MEA und Streckmetall ist eine Sinterfolie eingebaut; c) Zellkomponenten

Die Polarisationskurven der Zellen mit Streckmetall sind in Abb. 51 abgebildet. Edelstahl Streckmetalle (blaue Kurven) haben generell einen schlechteren Einfluss auf die Zelleistung als die Titan Streckmetalle (rote Kurven). Wenn die Streckmetalle in Kontakt zur MEA eingebaut sind führen feinere Maschen zu einer besseren Leistung, da der elektrische Stromfluss durch die Knotenpunkte der Maschen gewährleistet wird. Eine zwischen MEA und Streckmetall zusätzlich eingebaute poröse Sinterplatte sorgt für eine verbesserte

Kontaktierung und damit für einen flacheren Kennlinienverlauf. Die Kennlinien der einzelnen Variationen von Zellen mit Streckmetallen und Sinterplatten liegen sehr nah bei einander. Es ist schwer eine Tendenz zu erkennen. Die Streckmetalle können zum Stützen von Sinterfolien eingesetzt werden. Es handelt sich um einen guten Kompromiss zwischen elektrischer Kontaktierung, Medienversorgung und mechanischer Stabilität.

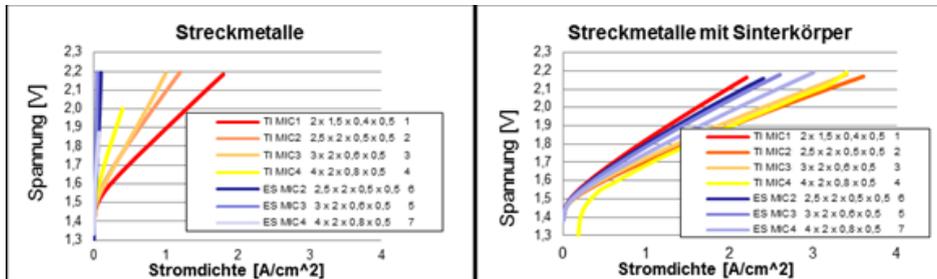


Abb. 51: Polarisationskurve für Streckmetalle: Links: in direktem Kontakt zur CCM; rechts: mit Sinterfolie zwischen CCM und Streckmetall.

Die Impedanzspektroskopie liefert zusätzliche Informationen über die Widerstände und Reaktionsvorgänge innerhalb einer Zelle. Langsame Prozesse in einer Elektrolysezelle, solche wie Massentransport oder -akkumulation, zeigen sich eher im niederfrequenten Bereich des Spektrums. Schnelle Vorgänge, wie z.B. Ladungstransport oder chemische Reaktionen, tragen zu hochfrequenten Teilen des Spektrums bei. Die quantitative Auswertung der Impedanzspektren verläuft mit der mathematischen Beschreibung des Systems mit Hilfe eines Modell-Ersatzschaltkreises. Ein Beispiel für ein verwendetes Ersatzschaltbild sieht man in Abb. 52. Die Parameter dieses Modells werden solange angepasst, bis es mit den Messdaten übereinstimmt (anfitting der Daten). Aus den Modellparametern bestimmt man anschließend die folgenden Parameterwerte:

- der Ohm'sche Vorwiderstand (R_1), der vor allem vom Membranwiderstand (Ionenleitung) bestimmt wird aber auch Kontaktwiderstände enthalten kann;
- der kinetische Widerstand (R_2) z.B. Durchtrittswiderstand der elektrochemischen Reaktionen an den Elektroden;
- die Kapazität (CPE) entspricht der Doppelschichtkapazität bzw. Pseudokapazität der Elektroden;
- L_1 ist ein Artefakt, das vom Messaufbau herrührt, vor allem die Kabelinduktivität.

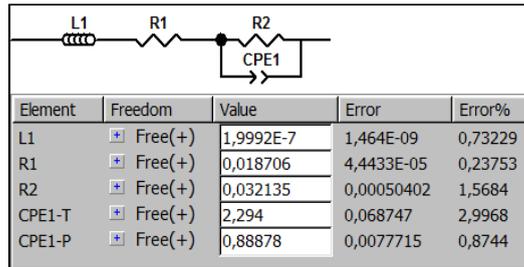


Abb. 52: Ersatzschaltbild, gezeigt für das Beispiel Ti100-300-850-IEK-33

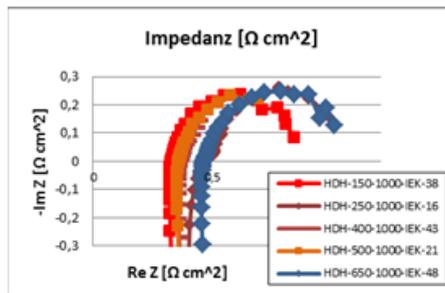


Abb. 53: Auswahl der gemessenen Impedanzspektren

Die Impedanzspektren aus Abb. 53 wurden bei 0,7 A aufgenommen, deswegen geben sie keine Information bezüglich der Transportlimitierung wieder. Den Vorwiderstand (R1) kann man anhand des Schnittpunktes der Kurve mit der reellen Achse ablesen. Werte aus der Tab. 6 zeigen die statistische Streuung, was durch den unterschiedlichen Oxidationszustand der Proben während der Lagerung und Präparation vor dem Einbauen in der Zelle und dem eigentlichen Versuch erklärt werden kann.

Bezeichnung		Ohmsche Vorwiderstand	Kinetische Widerstand	Kapazität
		[mΩcm ²]	[mΩcm ²]	[F/cm ²]
Dickevariation	HDH-150-1000-IEK-38	324,7	544,5	0,093
	HDH-250-1000-IEK-16	459,2	685,5	0,056
	HDH-400-1000-IEK-43	360,6	485,1	0,098
	HDH-500-1000-IEK-21	356,2	538,8	0,096
	HDH-650-1000-IEK-48	460,2	623,3	0,085

Tab. 6: Impedanzen bei Dickenvariation des Sinterkörpers

Der kinetische Widerstand (R2) wird mit dem Auswertungsprogramm aus der Breite des Halbkreises bestimmt und liefert die Information über die elektrochemische Reaktion an den Elektroden. Wie auch im Fall des Vorwiderstandes zeigen die Werte des kinetischen

Widerstandes aus der Tab. 6 statistische Streuung. Es gibt keine Ausreißer aber auch keine Tendenz, die Werte liegen nahe beieinander, was für die gute Reproduzierbarkeit der Tests spricht. Die flächennormierte Kapazitätswerte liegen im Bereich um $0,1 \text{ F/cm}^2$, was typisch für die verwendete CCM ist. Die für den elektrochemischen Test verwendete MEAs waren während der Messung sehr ähnlich und im gleichen Alterungszustand.

Im Rahmen des Projekts wurden ebenfalls Versuche zur Bestimmung der Zugfestigkeit und des Elastizitätsmoduls von gesinterten Titanfolien durchgeführt. Die Versuche wurden mit Proben aus beiden (sphärischen und „spratzigen“) Titanpulvern durchgeführt. Für jedes Pulver lagen Proben mit Sintertemperaturen im Bereich von $800\text{-}1200 \text{ °C}$ vor. Ti45 lag in einem Porositätsbereich von $10\text{-}33 \text{ %}$ und HDH in einem Bereich von $10\text{-}55 \text{ %}$ (siehe Abb. 54). Die Zugfestigkeit wurde an Proben mit einer Dicke von 1 mm bestimmt. Aus den im Zugversuch erstellten Spannungs-Dehnungs-Werten wurde das Elastizitätsmodul abgeleitet. Die Zugfestigkeit lag in einem Bereich zwischen $18\text{-}593 \text{ N/mm}^2$ und das Elastizitätsmodul im Bereich von $72 \text{ bis } 2204 \text{ N/mm}^2$.

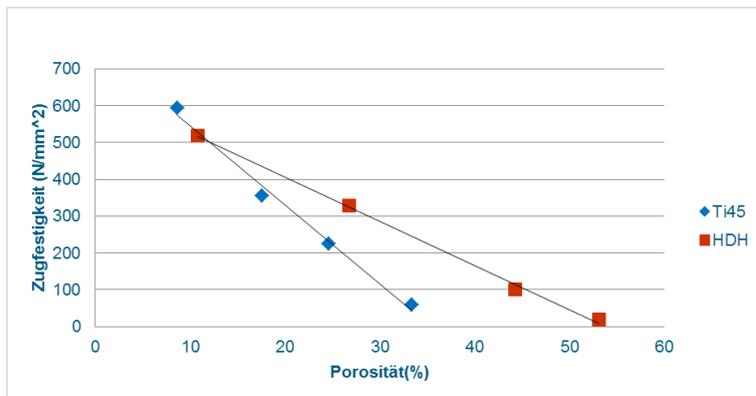


Abb. 54: Zugfestigkeit im Verhältnis zur Porosität

In Spannungs-Dehnungs-Diagrammen war zu erkennen, dass mit höherer Sintertemperatur und geringerer Porosität eine höhere Verformbarkeit einhergeht. Auffällig war, dass Ti45 ab einer Sintertemperatur von 1000 °C eine erhebliche Steigerung der Bruchdehnung und somit der Duktilität aufwies wohingegen HDH keine massive Steigerung der Duktilität zeigte. Insgesamt zeigte Ti45 deutlich höhere Verformung als HDH für dieselbe Sintertemperatur und Porosität.

Zusätzlich wurde ein Versuch (siehe Abb. 55) durchgeführt, der die überlagerten Spannungen, welche während der Differenzdruck-Elektrolyse auf den Sinterkörper wirken, berücksichtigt. Im Rahmen dieses ‚Flow Field Versuchs‘ wurden die Proben gegen einen Schlitz gedrückt, der das Flow Field der Bipolarplatte simuliert.



Abb. 55: Versuchsaufbau des Flow Field Versuchs (links) und Testzelle (rechts)

Die im Flow Field Versuch getesteten Proben hatten eine Dicke von 250 μm und 500 μm . Ihr Versagen konnte nach drei verschiedenen Mechanismen unterteilt werden. Drei Materialien brachen ideal spröde, zwei ideal duktil und alle anderen zeigten einen spröden Bruch mit plastischem Anteil (siehe Abb. 56)

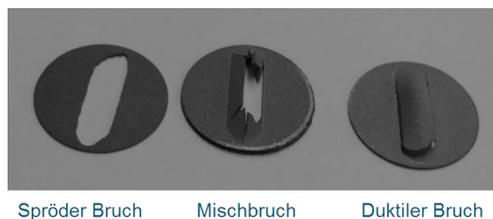


Abb. 56: Versagensarten von Sinterkörpern

3.5.2.2 Entwicklung von Elektrolysesystemen

Die großtechnische Erzeugung von Wasserstoff mit Power-to-Gas Anlagen stellt hohe Anforderungen an die Identifikation der optimalen Betriebs- und Dimensionierungsparameter der Anlage. Für einen wirtschaftlichen Betrieb ist aus technischer Sicht insbesondere ein hoher Wirkungsgrad der entscheidende Parameter. Gegenstand der Analyse war daher die energetische Betrachtung einer Power-to-Gas Anlage mit einem PEM-Elektrolyse-System zur großtechnischen Produktion von Wasserstoff (siehe Abb. 57). Zunächst wurden die spezifischen Energieverbräuche des Elektrolyseurs und die entsprechenden Wirkzusammenhänge identifiziert. Entsprechende Untersuchungen wurden anschließend für die gesamte Anlage mit Berücksichtigung der Prozessschritte Leistungskonditionierung, Elektrolyse, Gastrocknung und Gaskompression durchgeführt. Dabei konnten optimale Betriebsparameter für den Elektrolyseur und die gesamte Anlage ermittelt werden. Mit den Ergebnissen wurde abschließend eine Potenzialanalyse durchgeführt, um den Energiebedarf zukünftiger Power-to-Gas Anlagen abschätzen zu können.

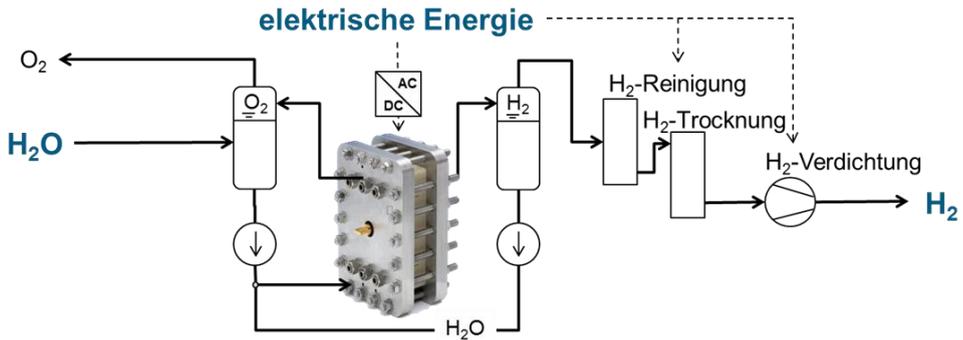


Abb. 57: Schema des Elektrolysesystems

Die Ergebnisse wurden auf Grundlage eines Modells erarbeitet, dabei umfasste die Modellierung den Elektrolyseur mit der Abbildung der Polarisationskurven sowie die Prozessschritte der Leistungskonditionierung, der Gastrocknung und der Gaskompression. Die Modellierung der Polarisationskurve wurde durch Messdaten mit einer Einzelzelle parametrisiert. Es wurden Permeationsprozesse über die Membran sowie der Wärmedurchgang an den Stack- und Systembauteilen berücksichtigt.

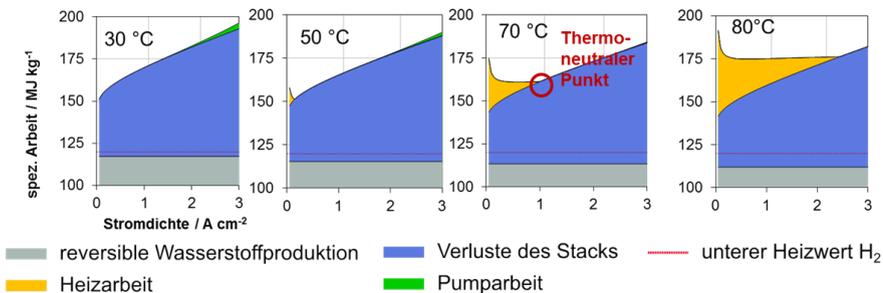


Abb. 58: Spezifischer Energieaufwand für die Wasserstoffbereitstellung bei unterschiedlichen Betriebstemperaturen

Die energetische Betrachtung des Elektrolyseurs (siehe Abb. 58) wurde zunächst an einem System mit idealisierter Membran durchgeführt. So konnten die Wirkzusammenhänge unabhängig von den auftretenden Verlusten untersucht werden. Dabei zeigte sich, dass die Heizleistungen für Betriebsbereiche mit geringen Druckniveaus und hohen Temperaturen einen großen Anteil an der Gesamtleistung haben. Diese Heizverluste konnten vorrangig auf die Verdampfung des Wassers in den Produktgasströmen zurückgeführt werden. Eine deutliche Reduzierung der Heizarbeit konnte bereits durch eine Druckerhöhung um wenige bar erreicht werden. Es konnte zudem gezeigt werden, dass eine Absenkung der Temperatur für Stromdichten unterhalb von 1 A/cm² ebenfalls sinnvoll sein kann (siehe Abb. 58). Die Untersuchung des Elektrolyseurs mit realer Membran zeigte, dass die Permeationsverluste bei kleinen Stromdichten unterhalb von 1 A/cm² dominierten, während oberhalb dieses Betriebspunkts die Verluste auf Grund des Ionentransportes einen deutlichen Anteil einnehmen. Die Optimierung der Membrandicke im relevanten Betriebsbereich oberhalb von 1 A/cm² führt daher zu reduzierten Membrandicken auf bis zu 50 µm.

Die Untersuchungen des Elektrolyseurs im Anlagenkontext machen zunächst die Verteilung der spezifischen Energieverbräuche deutlich. Dabei nimmt der Energieverbrauch des Elektrolyseurs den größten Anteil ein. Durch die direkte Kopplung des Energieverbrauchs der Leistungselektronik mit dem Verbrauch des Systems ergeben sich mit 8 Prozent die zweitgrößten Anteile am Gesamtenergieverbrauch. Diese hohen Anteile werden vorrangig im kleinen Teillastbereiche unterhalb von 1 A/cm^2 erreicht, da hier der Wirkungsgrad der Leistungselektronik deutlich abnimmt. Die Gastrocknung nach der Elektrolyse benötigt weniger als ein Prozent des Gesamtenergieverbrauchs. Dies ergibt sich zum einen durch die vorgeschaltete Gaskühlung mit der nahezu energieneutral ein großer Dampfanteil aus dem Produktgas entfernt werden kann. Zum anderen müssen Adsorptionstrocknungsanlagen für diesen Anwendungsfall mit einer Rückführung des Regenerationsgases ausgeführt werden, um Massenverluste des produzierten Wasserstoffs zu verhindern. Der Anteil der Gaskompression liegt maximal bei etwa 5 Prozent. Durch eine Steigerung des Drucks der Kathodenseite kann dieser Anteil reduziert werden. Allerdings steigt dabei durch die Volumenänderungsarbeit der notwendige Energiebedarf des Elektrolyseurs. Zusätzlich steigen die Permeationsverluste mit dem Druckniveau der Elektrolyse an. Es stellt sich somit ein optimaler Druckbereich ein, der abhängig vom Betriebspunkt und der Zellperformance zwischen 2 und 10 bar liegt.

Durch die Optimierungsmaßnahmen der vorhergehenden Untersuchungen konnte der Wirkungsgrad in dem technisch relevanten Lastbereich zwischen 1 und 3 A/cm^2 bereits um 6 Prozentpunkte gesteigert werden. Dies wird durch die Reduzierung der ionischen Verluste erreicht. Eine Steigerung des maximalen Wirkungsgrads auf mehr als 71 Prozent ist damit nicht möglich. Die Potenzialanalyse zeigt aber, dass durch zukünftige Entwicklungen die Aktivierungsverluste der Einzelzellen reduziert werden können, womit eine Steigerung des Wirkungsgrads über den gesamten Lastbereich möglich sind. Dabei werden maximale Wirkungsgrade des Elektrolyseurs von etwa 81 Prozent erreicht. Bis zu der maximalen Stromdichte von 3 A/cm^2 reduziert sich der Wirkungsgrad dann auf etwa 69 Prozent. Damit ist zukünftig ein Betrieb der Gesamtanlage mit Wirkungsgraden zwischen 69 und 72 Prozent möglich. Die wesentlichen Ergebnisse sind im Folgenden noch einmal zusammengefasst.

1. Mit dem aktuellen Stand der Technik sind für den Elektrolyseur Wirkungsgrade zwischen 56 und 74 Prozent bezogen auf den unteren Heizwert von Wasserstoff möglich. Die größten Verluste treten durch Überspannungen im Stack auf. Dies gilt insbesondere im technisch relevanten Betriebsbereich zwischen 1 A/cm^2 und 3 A/cm^2 . Für Betriebsbedingungen mit geringen Drücken und hohen Temperaturen steigen die Verluste durch Heizarbeit deutlich an. Dieser Anstieg ergibt sich aus dem hohen Wasserdampfanteil in den Produktgasen und der dafür aufzubringenden Verdampfungsenthalpie. Der Druckbetrieb des Elektrolyseurs ist durch Verluste in Folge von Permeationsvorgängen gekennzeichnet. Diese Verluste reduzieren die Effizienz einer möglichen interne Verdichtung des Wasserstoffs im Elektrolyseur.
2. Durch weitere Prozessschritte im Anlagenkontext wird der Wirkungsgrad für einen Elektrolyseur auf dem aktuellen Stand der Technik auf Werte zwischen 53 und 66 Prozent reduziert. Dabei stellt der Elektrolyseur mit einem relativen Anteil von bis zu 94 Prozent energetisch den größten Verbraucher dar. Für die Konditionierung der Leistung wird ein relativer Anteil von bis zu 8 Prozent notwendig. Die mechanische Kompression des Wasserstoffs erfordert einen relativen Anteil von maximal

5 Prozent. Wird die Gastrocknung mit einer Rückführung des Regenerationsstroms ausgeführt, ergibt sich dort eine relativ kleine Leistungsaufnahme, mit einem Anteil kleiner einem Prozent.

3. Durch die optimierte Betriebsführung kann eine Wirkungsgradsteigerung bereits mit dem aktuellen Stand der Technik erreicht werden. So lassen sich die Wirkungsgrade in dem relevanten Betriebsbereich um bis zu 6 Prozentpunkte steigern. Dies wird vorrangig durch eine optimierte Auslegung der Membran erreicht. Dabei zeigt sich, dass für den Betrieb oberhalb von 1 A/cm² dünne Membranen mit einer Dicke von 50 µm zu bevorzugen sind. Der aktuelle Stand der Technik verwendet Membranen mit einer Dicke von etwa 200 µm. Die Verwendung von dünnen Membranen zur Steigerung des Wirkungsgrads ergibt sich aus den hohen ionischen Verlusten mit steigenden Stromdichten. Die Verwendung von dünnen Membranen erfordert eine Anpassung des optimalen Druckniveaus der Elektrolyse in einem Bereich zwischen 2 und 10 bar. Limitierend ist die abnehmende mechanische Stabilität der Membran.
4. Durch Entwicklungen auf Zellebene können durch die Reduzierung von Überspannungen zukünftig weitere Wirkungsgradsteigerungen möglich sein. So lässt sich der Elektrolyseurwirkungsgrad bei einer Reduzierung der Aktivierungsverluste auf bis über 80 Prozent steigern. Damit sind im Anlagenkontext Wirkungsgrade zwischen 68 und 72 Prozent möglich. Eine Reduzierung der Verluste durch Permeation führt hingegen nur zu geringen Wirkungsgradsteigerungen im relevanten Betriebsbereich zwischen 1 A/cm² und 3 A/cm².

3.5.3 Mitarbeiter und Tätigkeitsfelder

Name	Telefon-Nr. (02461-61-) e-mail Adresse	Tätigkeitsfeld
Dr. M. Müller	1859 mar.mueller@fz-juelich.de	Leiter der Abteilung Verfahrenstechnik Elektrolyse
Dr. W. Lüke		Leiterin der Abteilung Elektrochemie Elektrolyse
Dr. M. Carmo	5590 m.carmo@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe MEA- Entwicklung
Dr. M. Stähler	2775 m.staehler@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe MEA-Fertigung
D. Borah	6365 d.borah@fz-juelich.de	Strömungssimulation
C. Bordin	9381 c.bordin@fz-juelich.de	Mechanik
E. Borgardt	3079 e.borgardt@fz-juelich.de	Stackentwicklung, Stackmechanik
A. Burdzik	2574 a.burdzik@fz-juelich.de	MEA-Fertigung
S. Cheriyan	2094 s.cheriyam@fz-juelich.de	Analytik

N. Commerscheidt	3464 n.commerscheidt@fz-juelich.de	Stackbau und Zelltest
S. Fischer	4478 st.fischer@fz-juelich.de	MEA-Entwicklung
I. Friedrich	1948 i.friedrich@fz-juelich.de	MEA-Fertigung
Dr. A. Glüsen	5171 a.gluesen@fz-juelich.de	Einsatz piolymere Werkstoffe
D. Günther	2378 d.guenther@fz-juelich.de	Elektrochemische Charakterisierung, Qualitätssicherung Prozesse
M. Hehemann	5431 m.hehemann@fz-juelich.de	Sicherheitstechnische Betreuung der Teststände
T. Höfner		MEA-Entwicklung
D. Holtz	2956 d.holtz@fz-juelich.de	MEA-Entwicklung
R. Lambertz	6695 r.lambertz@fz-juelich.de	Strömungsvisualisierung, Modellierung, 3d Topographie
Dr. M. Langemann	9759 m.langemann@fz-juelich.de	Entwicklung und Evaluierung von geeigneten Substraten und Beschichtungen für metallische Bipolarplatten
P. Paciok		MEA-Entwicklung
O. Panchenko	3079 o.panchenko@fz-juelich.de	Entwicklung und Charakterisierung poröse Schichten
C. Rakousky		MEA-Entwicklung
L. Ritz	5725 l.ritz@fz-juelich.de	Mechanik
S. Saba	9568 s.saba@fz-juelich.de	Wirtschaftlichkeit Elektrolysesysteme
M. Schalenbach		MEA-Entwicklung
F. Scheepers	2177 f.scheepers@fz-juelich.de	MEA-Fertigung
A. Schulz	8965 a.schulz@fz-juelich.de	MEA-Fertigung
R. Wegner	4832 r.wegner@fz-juelich.de	Mechanischer Aufbau von Stacks und Systemen
W. Zwaygardt	2103 w.zwaygardt@fz-juelich.de	Stackentwicklung und Charakterisierung

3.5.4 Wichtige Veröffentlichungen und Patente

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

Schalenbach, M.; Tjarks, G.; Carmo, M.; Lüke, W.; Müller, M.; Stolten, D.;

Acidic or Alkaline? Towards a New Perspective on the Efficiency of Water Electrolysis
Journal of the Electrochemical Society, 163 (2016), F3197-F3208

Schulze Lohoff, A.; Poggemann, L.; Carmo, M.; Müller, M.; Stolten, D.;

Enabling High Throughput Screening of Polymer Electrolyte Membrane (PEM) Water Electrolysis Components via Miniature Test Cells
Journal of the Electrochemical Society, 163 (2016), F3153-F3157

Langemann, M.; Fritz, D.L.; Müller, M.; Stolten, D.;

Validation and Characterization of Suitable Materials for Bipolar Plates in PEM Water Electrolysis
International Journal of Hydrogen Energy, 40 (2015), 11385-11391

Veröffentlichungen in Tagungsbänden

Müller, M.; Tjarks, G.; Schalenbach, M.; Stolten, D.;

Efficiency of Electrolysis - How Transport Processes in Micro Scale Influence the Performance of Whole Systems
In Proc.: 21st World Hydrogen Energy Conference 2016, Zaragoza, Spain

Höh, M.; Banhart, J.; Fritz, D.; Lehnert, W.; Arlt, T.; Manke, I.; Müller, M.; Lin, Y.; Kardjilov, N.; Ehlert, J.;

Investigation of Two-Phase Flow in Polymer Electrolyte Membrane Water Electrolysis Using Neutron Radiography
In Proc.: Symposium for Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation MODVAL 13, Lausanne, Switzerland, 2016

Alexander Spies, Michael A. Hoeh, Tobias Arlt, Nikolay Kardjilov, David L. Fritz, Jannik Ehlert, John Banhart, Manuel Münsch, Antonio Delgado, Alexander Hahn, Ingo Manke, Werner Lehnert

Visualization of the two-phase flow inside a polymer electrolyte membrane water electrolysis cell using neutron radiography
In Tagungsband: "Lasermethoden in der Strömungsmesstechnik", 8. – 10. September 2015, Dresden

Wichtige Patente

Patentanmeldungen:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
Dr. M. Müller	1.2770	Elektrolysezelle sowie Verfahren zum Betreiben einer solchen

3.6 Verfahrens- und Systemanalyse

3.6.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Forschungsschwerpunkt der interdisziplinären Abteilung ist die energiebezogene Verfahrens- und Systemanalyse. Dabei war das Jahr 2016 von einer erheblichen Neustrukturierung der Aktivitäten der Verfahrens- und Systemanalyse (VSA) geprägt. Neben der Entwicklung von einer Stabsstelle zu einer eigenen Abteilung wurden die personellen Kapazitäten von acht Mitarbeitern auf zurzeit 13 Mitarbeitern ausgebaut, mit einer stark steigenden Tendenz. Dies führte auch zu einer Themenerweiterung bzw. Fokussierung der Abteilung um die Themenbereiche (siehe auch Kapitel 5.5):

- Mobilität
- Infrastrukturen & Sektorkopplung
- sowie stationäre Energiesysteme.

Die neuen Aktivitäten wurden durch Projekte, welche sich im Kontext des zukünftigen CO₂-neutralen Energiesystems bewegen flankiert. Beispielsweise der Helmholtz Initiative „Energie System 2050“⁴, des virtuelle Instituts Strom zu Gas und Wärme⁵ oder dem Kopernikus-Projekt Power-to-X⁶.

Ziele der Abteilung VSA sind dabei unter anderem, die potenziellen Beiträge innovativer Technologien zur Reduktion der Treibhausgasemissionen aufzuzeigen sowie technische Anforderungen an die Versorgungsinfrastruktur als Ausgangspunkt zukünftiger F&E-Maßnahmen zu definieren.

Derzeit entwickelt die VSA Energiestrategien zur Erfüllung der Treibhausgasreduktionsziele der Bundesregierung, indem alternative Versorgungsstrukturen (z.B. Power-to-X-Konzepte) für eine sektorübergreifende Energiewende entworfen und dimensioniert werden. Die technikbasierten Systemanalysen lassen sich somit nicht mehr alleine auf die Bewertung von Wasserstoffanwendungen im Gesamtsystem reduzieren, sondern umfassen vielmehr die neutrale Bewertung aller potentiellen Technologien. Hierzu werden umfangreiche Modelle und Methoden entwickelt.

3.6.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.6.2.1 METIS-Packages

Die gemeinsame Betrachtung und Kopplung der Sektoren Energie, Industrie, Haushalte und Verkehr wird Sektorkopplung genannt und ist für das Erreichen der Treibhausgasemissions-Ziele ein Gegenstand der Forschung (vgl. Kapitel 5.5). Für die Modellierung der Sektorkopplung werden zwei mögliche Methoden betrachtet, eine geschlossene Modellumgebung und eine Modellumgebung, welche verschiedene Teilmodelle zusammenfasst (siehe Abb. 59).

⁴ https://www.helmholtz.de/forschung/energie/energie_system_2050

⁵ <http://strom-zu-gas-und-waerme.de/>

⁶ <https://www.kopernikus-projekte.de/projekte/power-to-x>



Abb. 59: Verschiedene Modellumgebungen zur Modellierung von Sektorkopplung links: geschlossene Modellumgebung, rechts: verschiedene Teilmodelle

Die geschlossene Modellumgebung versucht alle Sektoren und Technologien in einer Struktur abzubilden. Sie wird genutzt, um einen Trend zu bestimmen und beinhaltet Vereinfachungen in bestimmten Randbedingungen, wodurch die Möglichkeit besteht, die Berechnung auf Computern mit begrenzter Rechenleistung durchzuführen. Ein Beispiel für eine Vereinfachung ist die niedrigere räumliche Auflösung, wobei in einem Knoten alle Produktions- und Verbrauchsprofile aufsummiert werden können. Modellumgebungen, die aus verschiedenen Teilmodellen zusammengesetzt sind, versuchen den Nachteil bspw. der räumlichen Auflösung auszugleichen. Als Beispiel könnte ein Teilmodell den Haushaltsverbrauch in einer hohen Detaillierungstiefe analysieren und die Ergebnisse an ein Stromfluss-Modell übergeben, welches das Stromnetz und daher den Stromfluss detailliert abbildet. Auf der anderen Seite benötigen diese Berechnungen eine hohe Rechenleistung. Beide Modellierungsansätze haben eine relevante Bedeutung und sollten in Abhängigkeit der zu beantwortenden Forschungsfrage angewendet werden.

Die Modellierung von Sektorkopplung erfordert eine hohe Rechenleistung und die Entwicklung von neuen Algorithmen. Die methodische Erarbeitung des neu entwickelten Modells basiert auf einem Zusammenschluss von Modellen von Studenten und Doktoranden, die in den letzten Jahren am Forschungszentrum Jülich im IEK-3 gearbeitet haben. Es kann daher als ein Modell, bestehend aus verschiedenen Teilmodellen angesehen werden (vgl. Abb. 59 recht). Aktuell arbeiten diese Modelle in verschiedenen Entwicklungsumgebungen, aber es wurden Anstrengungen unternommen, die Modelle in der Python-Programmiersprache zu überführen. Dieses Projekt wurde METIS (Models for Energy Transformation and Integration Systems) benannt.

Für das Datenmanagement bei METIS wird eine MSSQL-Datenbank verwendet, die eine Datenverteilung über mehrere Festplatten hinweg und optimierte Datenabrufe bereitstellt. In diese Datenbank werden alle in der Studie verwendeten Daten einschließlich der stündlich aufgelösten Zeitreihen der Residuallast für die Bundesländer oder Gemeinden gespeichert. Weiterhin sind beispielsweise in den konstruierten Szenarios einzelne Windenergieanlagen an beliebigen Stellen Deutschlands enthalten.

3.6.2.2 Alterungsanalysen zu fossil gefeuerten Kraftwerken

Die Fortschreibung des Bestandes fossil gefeuerter Kraftwerke spielt in Energie- sowie Strommarktprojektionen eine wichtige Rolle. Hierfür werden in vielen Untersuchungen sogenannte technische Lebensdauern angenommen. Mit Hilfe solcher Annahmen sowie der Kenntnis der Inbetriebnahmejahre einzelner Kraftwerkblöcke wurden anlagenscharf Außerbetriebnahmejahre abgeleitet. Für einen Kraftwerksbestand lässt sich somit die rückläufige Kapazitätsentwicklung über einen Zukunftszeitraum angeben. Solche

Projektionen werden wiederum dazu benutzt, einen zukünftigen Kapazitätsneubaubedarf abzuschätzen. Die Angabe der technischen Lebensdauer ist somit eine wichtige Stellgröße. Viele Studien berufen sich bei der Annahme von Lebensdauern auf Erfahrungswerte, ohne diese jedoch näher zu spezifizieren. Im Rahmen einer Ex Post Analyse wird am Beispiel der in Deutschland in den letzten 35 Jahren stillgelegten fossil gefeuerten Kraftwerke gezeigt, wie sich die Lebensdauer von Kraftwerken bis heute verändert hat⁷. Die Analysen tragen zur Fundierung und Einordnung von Lebensdauerannahmen bestehender und künftiger Energieprojektionen bei.

Hierzu wurden Ex Post Analysen auf der Basis von Anlagen durchgeführt, die in den letzten 35 Jahren stillgelegt wurden. Die Analysen zeigen, dass die Lebensdauer fossil gefeuerter Kraftwerke im Laufe der letzten 3 Dekaden deutlich zugenommen hat. Lag sie für Steinkohle zwischen 1990 und 1999 noch bei einem leistungsgewichteten Durchschnittswert von 33 Jahren, betrug dieser in den letzten anderthalb Dekaden ca. 41 Jahre. Die für eine Stilllegung bei der Bundesnetzagentur angezeigten Steinkohlekraftwerke weisen einen vergleichbaren Wert von mehr als 42 Jahren auf. Eine ähnliche Entwicklung ist auch bei Kraftwerken zu beobachten, die mit Braunkohle, Öl oder Gas gefeuert werden.

In vielen Strommarktmodellen wird eine Korrelation zwischen Wirkungsgradentwicklung und Kraftwerkalter angenommen und für die Fortschreibung von Kraftwerkswirkungsgraden genutzt. Die mit Hilfe von Regressionsanalysen ermittelten Wirkungsgrade werden in vielen Strommarktmodellen wiederum auf reale Kraftwerksblöcke übertragen. Anhand einiger bestehender Kraftwerksblöcke, für die detaillierte Angaben vorliegen, wurde analysiert, ob und inwieweit eine solche Übertragung zulässig ist.

Die Wirkungsgradanalysen deuten darauf hin, dass bei blockscharfen Strommarktanalysen eine Übertragbarkeit von Wirkungsgraden, die aus Regressionsanalysen abgeleitet werden, sehr kritisch zu hinterfragen ist. Eine besondere Schwierigkeit bei der Abschätzung von Wirkungsgraden besteht darin, den Einfluss von Retrofitmaßnahmen auf die Effizienz eines Kraftwerks abzuschätzen. Die Analysen zeigen, dass der Unterschied zwischen errechneten und tatsächlichen Wirkungsgraden mehrere Prozentpunkte betragen kann. Es ist anzunehmen, dass eine derartige Differenz einen erheblichen Einfluss auf Merit Order Analysen haben dürfte.

3.6.2.3 Wasserstoffversorgungsketten mit alternativen Speichersystemen

In einem zukünftigen Energiesystem mit geringen CO₂-Emissionen spielen erneuerbare Energien eine wesentliche Rolle. Für eine geplante Emissionsreduktion bis 2050 von 80-100% bedarf es neben dem großtechnischen Ausbau erneuerbarer Energien im Strom- und Wärmesektor auch enormer Mengen an Speicherkapazität. Zudem müssen im Verkehrssektor emissionsarme Kraftstoffe gefunden werden. Wasserstoff bietet hierbei die Möglichkeit, den Strom- und Mobilitätssektor zu verbinden, indem überschüssige Energie aus erneuerbarer Stromerzeugung als Wasserstoff gespeichert wird und anschließend Brennstoffzellenfahrzeugen als Kraftstoff dient⁸. Aufgrund der zeitlichen und örtlichen

⁷ Markewitz, P., Robinius, M., Stolten, D., Wie alt werden fossil gefeuerte Kraftwerke?. 10. Internationale Energiewirtschaftstagung "Klimaziele 2050: Chance für einen Paradigmenwechsel?". 2017.

⁸ Robinius, M. Strom- und Gasmaktdesign zur Versorgung des deutschen Straßenverkehrs mit Wasserstoff RWTH Aachen University. 2015: Forschungszentrum Jülich GmbH Zentralbibliothek, Verlag. p. 255.

Diskrepanz zwischen Erzeugung und Betankung wird eine Infrastruktur benötigt, um den erzeugten Wasserstoff zu speichern und zur Tankstelle zu bringen.

Aktuell wird Wasserstoff überwiegend in Reinform als komprimiertes Gas oder als kryogene Flüssigkeit transportiert und gespeichert. Da beide Technologien in Bezug auf Handhabung, thermodynamische Eigenschaften, Energiebedarf und Kosten noch nicht die gewünschten Eigenschaften besitzen, streben immer wieder alternative Technologien in den wissenschaftlichen Fokus. Ziel der Arbeiten der VSA ist es ein Modell zu entwickeln, welche verschiedene Technologien entlang der gesamten Kette vergleichen kann, um dadurch mögliche Einsatzfelder zu identifizieren.

Dazu wurde basierend auf der Methodik von Yang & Ogden (2007)⁹ ein Punkt-zu-Punkt Modell entwickelt, welches neben den bereits untersuchten Systemen der Wasserstoffbereitstellung auch alternative Technologien einbezieht. Die Nutzung von Liquid Organic Hydrogen Carriers (LOHC) als Element der Wasserstoffbereitstellung könnte dabei eine Alternative zum aktuellen Stand der Technik darstellen. Für großtechnische Energiesysteme ist es weiterhin denkbar, dass durch den Einsatz unterschiedlicher Speichertechnologien für Speicherung und Transport ökonomische Vorteile entstehen. Um dies zu berücksichtigen, wurde eine Wandlung der Energieform zwischen Speicher und Transport modelliert.

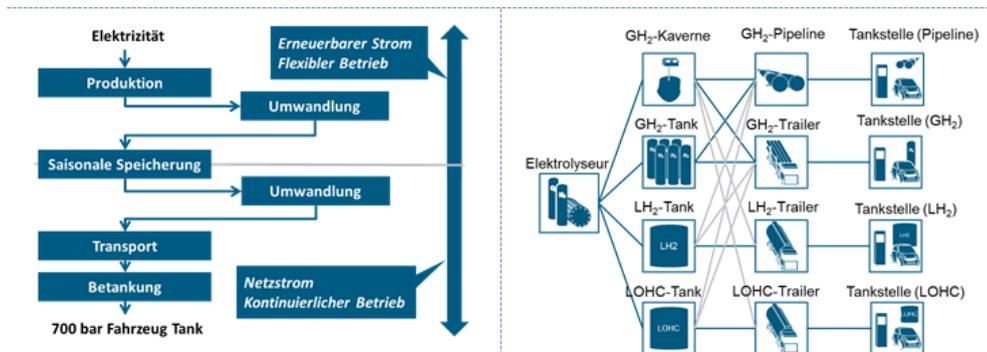


Abb. 60: Wasserstoffinfrastruktur
links: Aufbau des Modells, rechts: untersuchte Pfade

Zur besseren Vergleichbarkeit wird für alle Bereitstellungspfade von einer zentralen und damit großtechnischen Wasserstofferzeugung aus erneuerbarem Strom mithilfe der Elektrolyse und einer Tankstelle mit 700-bar Zapfsäule als Abnehmer ausgegangen. Abb. 60 zeigt links den Modellaufbau und die Untergliederung in einzelne Module. Dabei wird für die Wasserstoffproduktion und gegebenenfalls die Umwandlung zur saisonalen Speicherung von flexiblen Anlagen ausgegangen, die mit fluktuierendem, erneuerbarem Strom versorgt werden, der zum Erzeugungszeitpunkt netzseitig nicht nutzbar ist. Für den Strombezug von Infrastrukturkomponenten nach dem saisonalen Großspeicher wird vom aktuellen EU-Strommix ausgegangen. Auf der rechten Seite von Abb. 60 sind die untersuchten Pfade

⁹ Yang, C. and J. Ogden, Determining the lowest-cost hydrogen delivery mode. International Journal of Hydrogen Energy, 2007. 32(2): p. 268-286.

dargestellt. In blau bzw. grau sind die Pfade ohne bzw. mit zusätzlicher Umwandlung zwischen Speicherung und Transport dargestellt.

Abb. 61 zeigt die spezifischen Wasserstoffbetankungskosten als Ergebnisse der Berechnungen in Abhängigkeit von Transportentfernung und Gesamtbedarf. Ähnlich den Ergebnissen von Yang & Ogden (2007) ergeben sich Bereiche der günstigsten Kombination aus Speicher- und Transporttechnologie. Unter den getroffenen Annahmen sind LOHC-Pfade gerade bei niedrigem Wasserstoffgesamtbedarf (< 20-40 tH₂ pro Tag) zu bevorzugen. Für geringe Entfernungen und steigenden Bedarf ist der LKW-Transport von gasförmigem Wasserstoff in Verbindung mit einer Salzkaverne am günstigsten. Bei hohem Bedarf und höheren Reichweiten führt die Kombination aus Pipeline und Kaverne zu den geringsten Bereitstellungskosten. Die Versorgung auf der Basis von Flüssigwasserstoff hat unter den hier getroffenen Annahmen kein Einsatzgebiet. Dies liegt an den hohen Verflüssigungskosten für Wasserstoff, die sich sowohl aus hohen Investitionskosten als auch hohen Betriebskosten zusammensetzen.

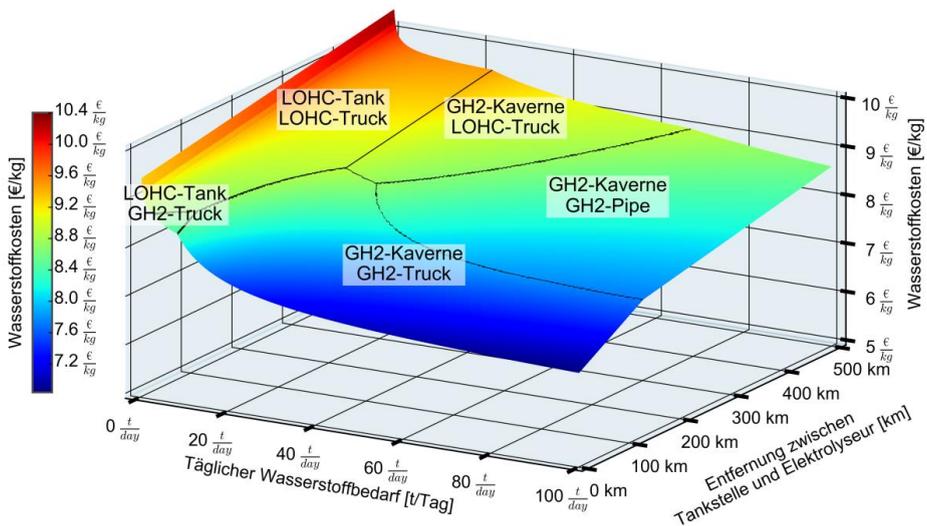


Abb. 61: Wasserstoffbetankungskosten an der Tankstelle in Abhängigkeit von Gesamtbedarf und Transportentfernung

Die vorliegenden Ergebnisse zeigen, dass für die LOHC-Technologie in einer zukünftigen Wasserstoffwirtschaft Anwendungspotentiale bestehen. Mit zunehmender Wasserstoffnachfrage sind allerdings Pipelinesysteme hinsichtlich der hier untersuchten Bereitstellungskosten vorteilhaft. Der Einsatz von LOHC ist im großtechnischen Maßstab bisher jedoch noch nicht erprobt, so dass Fragen zum Beispiel hinsichtlich der langfristigen Stabilität, der Energiebereitstellung für die Dehydrierung oder der Wasserstoffreinheit noch nicht ausreichend beantwortet werden können.

3.6.2.4 Kostgenoptimale Versorgungssysteme für ein vollautarkes Einfamilienhaus

Im Wohngebäudesektor ist derzeit ein Trend zu teilautarken Systemen basierend auf Photovoltaik (PV) und Batteriespeichern zu beobachten. Längerfristig ist eine vollautarke Versorgung zur Deckung des Strom- und Wärmebedarfs vorstellbar. Eines der ersten vollautarken Gebäude wurde in der Schweiz im Juni 2016 eingeweiht¹⁰. Vor diesem Hintergrund stellt sich die Frage, wie groß das Potential dieser Systeme ist, welche sich zu 100% selbst versorgen und somit nicht mehr auf die allgemeine Stromversorgung sowie Energieträgerlieferungen (z.B. Erdgas, Erdöl oder Biomasse) angewiesen sind. Dazu wurden in der Abteilung VSA Kosten und Auslegung autarker Versorgungssysteme für ein Einfamilienhaus ermittelt und geeignete Technologien identifiziert¹¹.

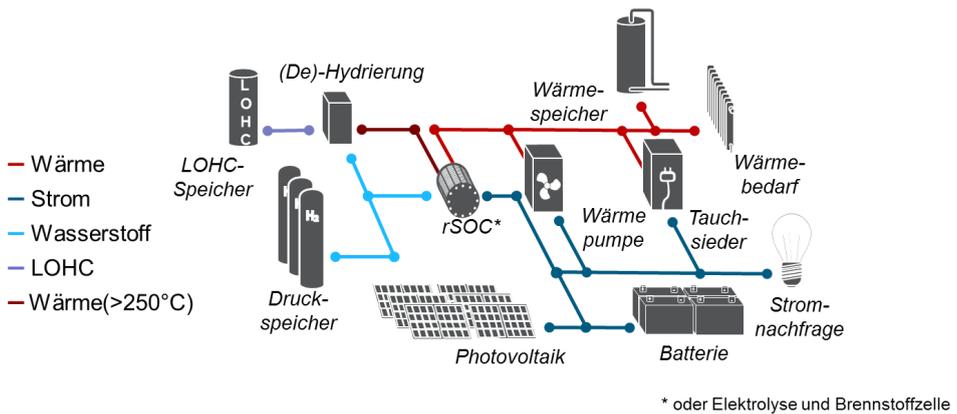


Abb. 62: Betrachtetes Versorgungssystem

Es wurde ein Mixed-Integer Linear Program (MILP) erstellt, welches das Energieversorgungssystem eines Wohngebäudes abbildet. Ziel ist es, eine kostenoptimale Technologiekonfiguration für die Wärme- und Stromversorgung zu 8760 Stunden im Jahr zu ermitteln. Als Technologien werden Photovoltaikmodule, Batterien, Wärmepumpe, Tauchsieder, sowie ein Wärmespeicher für das Referenzsystem berücksichtigt. Potentielle Systemerweiterungen sind ein Elektrolyseur, ein Wasserstoffdruckspeicher und eine Brennstoffzelle. Zusätzlich wird zur alternativen Wasserstoffumwandlung das mögliche Technikportfolio noch um eine reversible Fest-Oxid Brennstoffzelle (rSOC) erweitert, welche als Elektrolyseur und Brennstoffzelle betrieben werden kann. Zur alternativen Wasserstoffspeicherung besitzt das Modell auch die Option, ein Liquid Organic Hydrogen Carrier (LOHC) System zu integrieren, bestehend aus Hydrier- und Dehydriereinheit, sowie einem LOHC-Tank. Das betrachtete System ist in Abb. 62 dargestellt.

¹⁰ Diermann, R., *Ohne Netz - Erstes völlig energieautarkes Mehrfamilienhaus der Welt fertiggestellt*, in *Wirtschaftswoche*. 2016.

¹¹ Kotzur, L. et al. *Kostenoptimale Versorgungssysteme für ein vollautarkes Einfamilienhaus*. 10. Internationale Energiewirtschaftstagung "Klimaziele 2050: Chance für einen Paradigmenwechsel?". 2017.

Wie in Abb. 63 dargestellt, wurde das Versorgungssystem des Wohngebäudes für verschiedene Systemkonfigurationen optimiert. Der alleinige Einsatz von Batterien als Speichertechnologie resultiert für eine 100%ige Selbstversorgung im teuersten System und stellt den Referenzfall dar. Mit einem Einsatz von Wasserstoff als Speichermedium lassen sich im Vergleich dazu die Systemkosten um 20% senken, wobei der Einsatz einer rSOC die Kosten um 24% reduziert. Der Wärmebedarf des Gebäudes kann dabei vollständig durch die Abwärme der Brennstoffzelle gedeckt werden. Der Einsatz von LOHC als Speichermedium reduziert die Systemkosten weiter auf 44% der Referenzkosten. Die Wärme wird hierbei durch eine Wärmepumpe bereitgestellt, da die Abwärme der rSOC zur Dehydrierung des LOHC's genutzt wird. Wenn eine Batterie diesem System zugeschaltet wird, kann weiterhin eine signifikant kleinere Auslegung des Wasserstoffsystems erzielt werden. Dieses wird durch die Zwischenspeicherung der Batterie konstanter über den Jahresverlauf betrieben und setzt somit spezifisch mehr Wasserstoff um. Folglich kann das günstigste vollautarke System mit einem kombinierten Einsatz von rSOC, LOHC und Batterie realisiert werden.

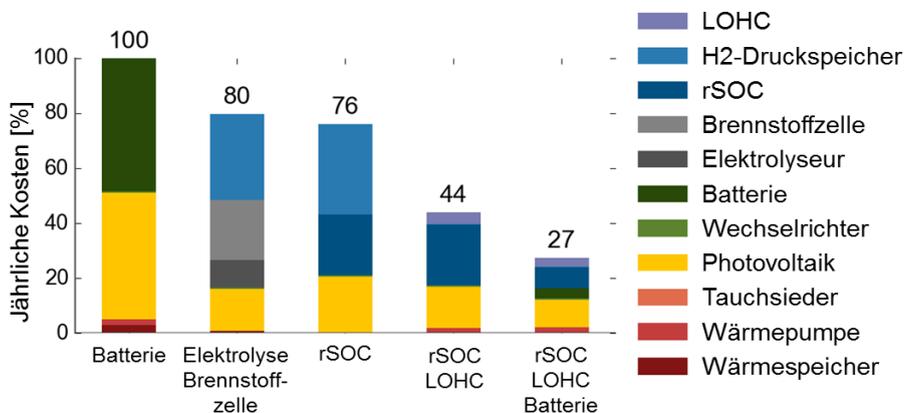


Abb. 63: Resultierende Zusammensetzung der Systemkosten, wobei die Kosten des Batteriesystems als Referenz zu 100% gesetzt wurden

3.6.3 Mitarbeiter und Tätigkeitsfelder

Name	Telefon-Nr. (02461-61-) e-mail Adresse	Tätigkeitsfeld
Dr. M. Robinius	3077 m.robinius@fz-juelich.de	Leiter der Abteilung Verfahrens- und Systemanalyse
Dr. T. Grube	5398 th.grube@fz-juelich.de	Gruppenleiter „Mobilität“
Dr. P. Markewitz	6119 p.markewitz@fz-juelich.de	Fachliche Verantwortung für das Arbeitsgebiet der „stationären Energiesysteme“

D. Caglayan	5396 d.caglayan@fz-juelich.de	Europäische Gesamtlösung zur Sektorkopplung mittels Wasserstoff
P. Heuser	9742 p.heuser@fz-juelich.de	Techno-ökonomische Analyse einer weltweiten Wasserstoffinfrastruktur
L. Kotzur	6689 l.kotzur@fz-juelich.de	Kostenoptimale Versorgungssysteme für Häuser
P. Lopion	1923 p.lopion@fz-juelich.de	Sektorkopplungspotentialanalysen für Deutschland
M. Reuss	9153 m.reuss@fz-juelich.de	Alternative Wasserstoffversorgungspfade
S. Ryberg	4064 s.ryberg@fz-juelich.de	Modellierung der europäischen Residuallast bei unterschiedlichen Ausbaugraden der EE
K. Syranidis	9156 k.syranidis@fz-juelich.de	Analyse von netzseitig nicht nutzbaren Strommengen bei unterschiedlichen Netzausbautufen
Y. Wang	3742 yu.wang@fz-juelich.de	Membranbasierte Gastrennprozesse in der Energietechnik
L. Welder	96992 l.welder@fz-juelich.de	Räumlich und zeitlich hochaufgelöste Modellumgebungen
Dr. L. Zhao	4064 l.zhao@fz-juelich.de	Membranbasierte Gastrennprozesse in der Energietechnik

3.6.4 Wichtige Veröffentlichungen, Dissertationen und Patente

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

Otto, A. ; Grube, T. ; Schiebahn, S. ; Stolten, D.

Closing the loop: Captured CO₂ as a feedstock in the chemical industry

Energy & environmental science 8(11), 3283 - 3297 (2015) [10.1039/C5EE02591E]

Veröffentlichungen in Tagungsbänden

Otto, A. ; Grube, T. ; Ortwein, A. ; Zunft, S. ; Kaiser, J. ; Schneider, E. ; Tänzer, G. ; Schneider, C. ; Krönauer, A.

Wärme und Effizienz für die Industrie

In Proc.: FVEE Jahrestagung, Berlin, Germany, 3 Nov 2015 - 4 Nov 2015

Robinius, M. ; Stolten, D. ; Grube, T. ; Schiebahn, S.

Methodische Aspekte der Systemanalyse zur Energiewende

In Proc.: DPG-Jahrestagung 2016, Regensburg, Germany, 7 Mar 2016 - 7 Mar 2016

Robinius, M. ; Schiebahn, S. ; Grube, T. ; Stolten, D.

An Energy Concept to Supply the Transport Sector with Hydrogen from Renewable Energy Sources

In Proc.: 21st World Hydrogen Energy Conference 2016, Zaragoza, Spain, 13 Jun 2016 - 16 Jun 2016

Otto, A. ; Grube, T. ; Robinius, M. ; Stolten, D.

The Role of Hydrogen in an Environmental and Economical Synthesis of Organic Chemicals

In Proc.: 21st World Hydrogen Energy Conference 2016, Zaragoza, Spain, 13 Jun 2016 - 16 Jun 2016

Kotzur, L. ; Markewitz, P. ; Robinius, M. ; Stolten, D.

Kostenoptimale Versorgungssysteme für ein vollautarkes Einfamilienhaus

In Proc.: 10. Internationale Energiewirtschaftstagung IEWT Wien 2017, Vienna, Austria, 15 Feb 2017 - 17 Feb 2017

Dissertationen:

Robinius, M.

Strom- und Gasmärktedesign zur Versorgung des deutschen Straßenverkehrs mit Wasserstoff

Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, 300 (2015), ISBN 978-3-95806-110-1

Otto, A.

Chemische, verfahrenstechnische und ökonomische Bewertung von Kohlendioxid als Rohstoff in der chemischen Industrie

Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Energie & Umwelt, 268 (2015), ISBN 978-3-95806-064-7

Wichtige Patente

Patentanmeldungen:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
H. Notzke	1.2704	Membranmodul

3.7 Physikalisch-Chemische Grundlagen / Elektrochemie

3.7.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Im Bereich des Physikochemischen Brennstoffzellenlabors werden die grundlegenden Struktur/Wirkungsbeziehungen komplexer Vorgänge in elektrochemischen Energiewandlern untersucht, um Wege zu deren Verbesserung aufzuzeigen. Im Mittelpunkt stehen die physikalisch-chemischen Eigenschaften und das elektrochemische Verhalten von Komponenten und Modellzellen. Zum Einsatz kommen verschiedene *in-situ*- und *ex-situ* Methoden:

- Bildgebende Analysemethoden (REM/EDX, Lichtmikroskopie), Katalysatorcharakterisierung mittels orts aufgelöster MS
- Spektroskopische Methoden (Raman, IR)
- Thermochemische und mechanische Analysemethoden (TGA, DSC, Elastizitäts-/Dehnungsmessungen, BET, Dichtemessungen (Gaspiknometer), (Standard-)Porosimetrie, Kontaktwinkelmessungen)
- Elektrochemische Analysemethoden (EIS, CV, Leitfähigkeit)

Die vorhandenen Methoden werden den Fragestellungen angepasst bzw. neue Methoden werden entsprechend etabliert. Neben der Kontrolle mechanischer und thermochemischer Eignungsvoraussetzungen für den Einsatz in Brennstoffzellen ist das Ziel die Aufklärung grundlegender mikroskopischer Mechanismen im Zusammenhang mit der Redoxkinetik der Elektroden oder dem Ionentransport in den Elektrolytmembranen.

3.7.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.7.2.1 Ionische Flüssigkeiten als alternative Elektrolyte für die HT-PEFC

Die physikochemischen und elektrochemischen Arbeiten an protonenleitenden ionischen Flüssigkeiten (PILs) als alternative Elektrolyte für die HT-PEFC wurden fortgesetzt. Neben der bereits vor drei Jahren entwickelten Sulfoethylammoniumtrifluormethansulfonsäure [2-Sea][TfO] wurde als neue PIL auch das homologe [2-Sema][TfO], das ein Sulfoethylmethylammoniumkation enthält, präpariert und charakterisiert (siehe Abb. 64).

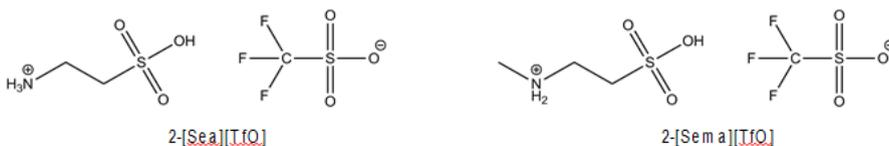


Abb. 64: Molekulare Struktur der ionischen Flüssigkeiten (PILs)

Dabei wurden sowohl die Bulkeigenschaften der PILs wie die Ionenleitfähigkeit und Viskosität bestimmt, als auch Eigenschaften der Grenzfläche PIL/Platin untersucht, wie zum Beispiel die Kinetik der Sauerstoffreduktion und die Doppelschichtkapazität. Da in der HT-PEFC an der Kathode Wasser entsteht, wurde allen PILs zwischen 0 und 6 Gew.% Wasser beigemischt.

Für das System mit einer polykristallinen Platinelektrode und einem Elektrolyt aus [2-Sea][TfO] und 5 Gew.% Wasser wurden im Vergleich zum letzten Report die folgenden, weiteren Ergebnisse erzielt¹²: (i) die starke Kopplung der spezifischen Leitfähigkeit und der dynamischen Viskosität spricht für einen Vehikel-Mechanismus des Protonentransports, (ii) die temperaturabhängige Kinetik der Sauerstoffreduktionsreaktion korreliert mit einer kompetitiven Adsorption von [2-Sea][TfO] und Wasser, (iii) die Ordnung der Ionenstruktur des auf der Platinoberfläche adsorbierten [2-Sea][TfO] nimmt mit steigender Temperatur ab und die Adsorption der Wassermoleküle auf der Platinoberfläche nimmt zu.

Am Beispiel des [2-Sema][TfO] wurde der Einfluss der Zugabe von bis zu 6 Gew.% Wasser auf das Verhalten der elektrolytischen Doppelschicht in der Phasengrenze mit einer polykristallinen Platinelektrode untersucht. Die wichtigsten Ergebnisse einer Analyse von Serienimpedanzen lauten wie folgt: (i) in der Darstellung als komplexe Kapazität werden Spektren mit bis zu vier kapazitiven Prozessen erhalten (s. Abb. 65), d.h. je zwei bei hohen und niedrigen Frequenzen (schnelle / langsame Prozesse), (ii) die Aktivierungsenergie der schnellen kapazitiven Prozesse in der Doppelschicht entspricht derjenigen des Ionentransports im Bulk Elektrolyten, (iii) die langsamen kapazitiven Prozesse korrelieren mit Faraday'schen Reaktionen wie zum Beispiel Wasserstoff- oder Platinoxidation.

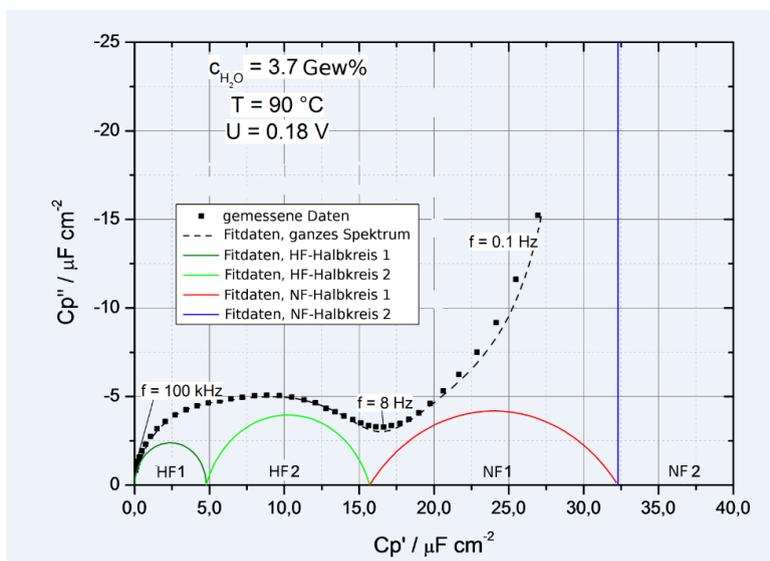


Abb. 65: Auftragung der komplexen Kapazität der Phasengrenzfläche Platin / [2-Sema][TfO] am Beispiel des Wassergehalts von 3.7 Gew.%

Ebenfalls am Beispiel von [2-Sema][TfO] wurde der Einfluss des Wassergehalts (1.3 – 4.4 Gew.%) auf die Kinetik der Sauerstoffreduktion an polykristallinen Platinelektroden untersucht. Dazu wurde eine rotierende Platinscheibenelektrode (RDE) in der Variante eines hängenden Meniskus (HM-RDE) verwendet. Die folgenden Ergebnisse wurden erzielt: (i) die in den Strom/Spannungsmessungen erhaltenen Grenzströme bei unterschiedlichen Rotations-

¹² K. Wippermann, J. Wackerl, W. Lehnert, B. Huber, C. Korte, Journal of The Electrochemical Society, 163 (2016) F25-F37.

geschwindigkeiten folgen der Levich-Gleichung, (ii) aus Koutecký-Levich-Plots wurden die Stromdichten der Sauerstoffreduktion (ORR) extrahiert und als Tafelauftragungen dargestellt (s. Abb. 66), (iii) die Stromdichten der ORR zeigen keine klare Abhängigkeit vom Wassergehalt, (iv) die Tafelfaktoren liegen nahe am theoretischen Wert von 144 mV/Dekade (@90 °C), (v) im Mittel liegt die Stromdichte der ORR mit [2-Sema][TfO] im Vergleich zu 95 Gew.% Phosphorsäure um den Faktor drei höher.

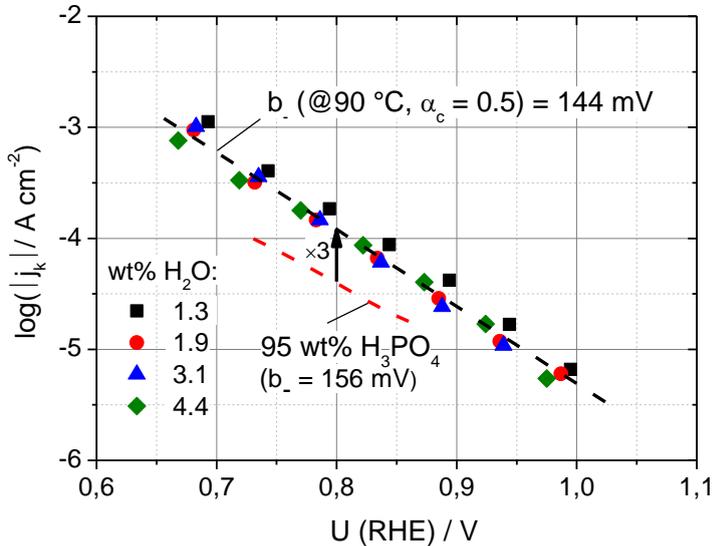


Abb. 66: Tafelauftragungen der Sauerstoffreduktion an Platin in [2-Sema][TfO] mit 1.3 – 4.4 Gew.% Wasser im Vergleich mit 95 Gew.% Phosphorsäure

3.7.2.2 Ladungstransfer zwischen flüssigen und festen Li⁺-Elektrolyten

In den zurzeit verwendeten wieder aufladbaren Li-Batteriesystemen werden Anodenmaterialien verwendet, die auf Übergangsmetalloxiden. Als zukünftige Nachfolger mit deutlich höherer Energiespeicherdichte werden insbesondere Li-S- oder Li-O₂-Zellen diskutiert. In diesen neuen Batteriesystemen wäre eine physikalische Trennung des Anoden- und Kathodenraums, bzw. der Einsatz unterschiedlicher Elektrolyte für beide Elektrodenräume vorteilhaft, um Leistungsdichte und Lebensdauer weiter zu steigern. Die physikalische Trennung zweier unterschiedlicher flüssiger Elektrolyte kann durch einen Festelektrolyten erfolgen. Im Falle von Li-O₂-Zellen könnte so auf der Kathodenseite ein wässriger (protischer) Elektrolyt verwendet werden, welcher die Sauerstoffreduktionsreaktion erleichtert. Auf der Anodenseite mit einer metallischen Lithiumelektrode sind nur aprotische, nichtwässrige Elektrolyte einsetzbar.

Die Integration einer Membran aus einem festen Ionenleiter in einer elektrochemischen Zelle mit flüssigen Elektrolyten verursacht zusätzliche elektrische Potentialsprünge an den Flüssigelektrolyt-Festelektrolyt-Grenzflächen. In der Literatur findet man bislang nur wenig experimentelle Daten und theoretische Abhandlungen zum Problem der Ladungstransferkinetik zwischen festen und flüssigen Li-Elektrolyten. Aufgrund der besonderen Bedeutung für zukünftige Batteriesysteme wurden daher experimentelle Studien zur Gleichstrompolarisation der Grenzfläche zwischen den Li-Festelektrolyten Li_{6,6}La₃Zr_{1,6}Ta_{0,4}O₁₂ (LLZO:Ta) und den

Flüssigelektrolyten LiPF_6 in Ethylencarbonat (EC)/Dimethylcarbonat (DMC) durchgeführt (1:1 Gewichtsverhältnis EC:DMC).

Für die elektrochemischen Messungen wurde eine symmetrische Zelle mit acht Elektroden aufgebaut, d.h. 6 Potentialsonden und 2 strombelasteten Elektroden. Die Zelle besteht aus drei Elektrolyträumen: i) Flüssigelektrolyt, ii) Festelektrolyt und iii) Flüssigelektrolyt. Die Elektrolyträume i) und iii) mit dem Flüssigelektrolyten LiPF_6 in 1:1 EC/DMC sind jeweils mit zwei elektrochemisch lithiierten Pt-Drähten als Potentialsonden kontaktiert. Der Festelektrolyt, LLZO:Ta, ist im direkten elektrischen Kontakt mit zwei Li-Drähten, s. Abb. 67 a). Die lithiierten Pt-Drähte bzw. die Li-Drähte erlauben die Messung der elektrochemischen Potenzialdifferenz $\Delta\tilde{\mu}_{\text{Li}^+}$ der Li^+ -Ionen zwischen den Kontaktstellen. Als strombelastete Elektroden dienen zwei Li-Scheiben an den Enden der Elektrolyträume 1) und iii).

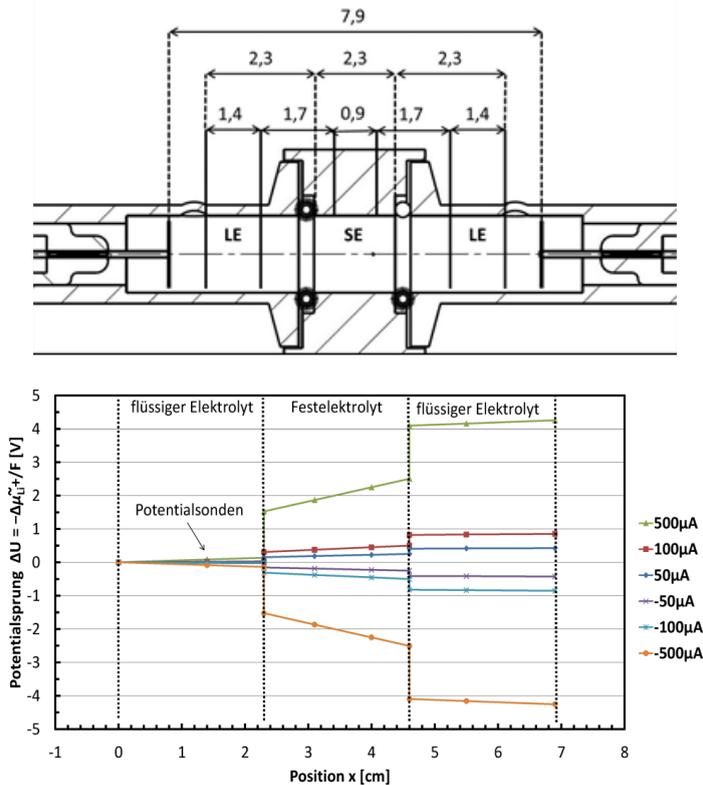


Abb. 67: a) Schematischer Aufbau einer Gleichstrompolarisationszelle (oben); b) Elektrochemisches Potenzial der Li^+ -Ionen in einer Zelle mit EC/DMC + 0,1 mol/l LiPF_6 Flüssigelektrolyten und einem LLZO:Ta-Festelektrolyt als Funktion der Position x in der Zelle bei verschiedenen Polarisationsströmen (unten), extrapoliert aus den gemessenen Spannungen der sechs Potentialsonden. Der Nullpunkt ist die Sonde bei $x = 0$.

Die (stationären) elektrochemischen Potenzialunterschiede der Li^+ -Ionen $\Delta\tilde{\mu}_{\text{Li}^+}/F$ über die Festelektrolyt-Flüssigelektrolyt-Grenzflächen hinweg werden bei einer Polarisation der Zelle mit verschiedenen Stromdichten j bestimmt. Hierzu werden die Messwerte der Li^+ -Potentialsonden in jedem Elektrolytraum zu den Grenzflächen hin extrapoliert, s. Abb. 67 b).

Im Fall kleiner elektrochemischer Potenzialunterschiede $\Delta\tilde{\mu}_{\text{Li}^+, \text{if}}/F$ von höchstens ± 1 V über die Fest-Flüssig-Grenzfläche hinweg und Li^+ -Konzentrationen c_{Li^+} zwischen 0.1 und 2 mol l⁻¹ können fast symmetrische, S-förmige $\Delta\tilde{\mu}_{\text{Li}^+, \text{if}}/F$ vs. j -Kurven (Polarisationskurven) gemessen werden, s. Abb. 68 a). Nur bei geringen Li^+ -Konzentrationen c_{Li^+} unterhalb 0.1 mol l⁻¹ werden die Funktionsverläufe deutlich asymmetrisch. Dies weist auf eine Diffusionslimitierung des Stroms hin (Verarmung von Li^+ -Ionen an der Oberfläche des festen Ionenleiters).

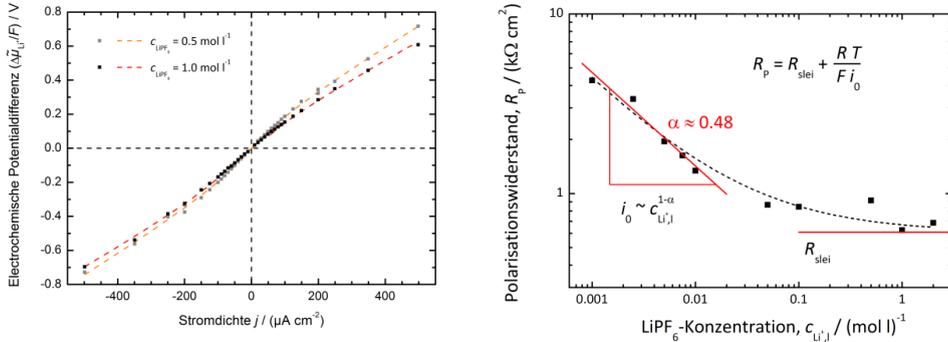


Abb. 68: a) Elektrochemischer Potenzialunterschied $\Delta\tilde{\mu}_{\text{Li}^+, \text{if}}/F$ von Li^+ -Ionen über die Festelektrolyt-Flüssigelektrolyt-Grenzfläche hinweg, aufgetragen gegen die Stromdichte j (links)
b) Doppellogarithmisches Diagramm des Polarisationswiderstandes $R_p = d(\Delta\tilde{\mu}_{\text{Li}^+, \text{if}}/F)/dj$, aufgetragen gegen die LiPF_6 -Konzentration c_{Li^+} (rechts)

Aus der Steigung der Polarisationskurven ($\Delta\tilde{\mu}_{\text{Li}^+, \text{if}}/F$ vs. j) für $j = 0$ kann der (flächenmäßige) Polarisationswiderstand R_p bestimmt werden. Der konzentrationsabhängige Polarisationswiderstand R_p erreicht einen Grenzwert von ca. $800 \Omega \text{ cm}^2$ für Li^+ -Konzentrationen c_{Li^+} oberhalb von $0,1 \text{ mol l}^{-1}$, s. Abb. 68 b). Bei kleineren Li^+ -Konzentrationen sinkt R_p mit steigender Li^+ -Konzentrationen entsprechend einem Potenzgesetz, $R_p \propto c_{\text{Li}^+}^{-0.56}$.

Abe und Sagane et al. schließen (aus temperaturabhängigen AC/Impedanzmessungen) auf das Vorliegen eines aktivierten Desolvatisierungs-/Solvatisierungsprozesses beim Ionen-transfer^{13,14}. Busche et al. vermuten die Bildung einer schlecht ionenleitenden Deckschicht auf dem Festelektrolyten (solid-liquid electrolyte interphase, SLEI), hervorgerufen durch eine Zersetzungsreaktion zwischen Fest- und Flüssigelektrolyt¹⁵.

Der gemessene S-förmige Verlauf der Polarisationskurven, $\Delta\tilde{\mu}_{\text{Li}^+, \text{if}}/F$ vs. j , kann gut beschrieben werden, wenn von einer seriellen Verbindung eines stromabhängigen, Butler-Volmer-artigen Widerstand aufgrund einer thermisch aktivierter Ionentransferkinetik und einem konstanten Ohmschen Widerstand R_{SLEI} aufgrund einer schlecht leitenden Deckschicht (SLEI) ausgegangen wird. Allgemein für den Transfer von A^{z+} -Kationen ergibt sich:

¹³ T. Abe, F. Sagane, M. Ohtsuka, Y. Iriyama, Z. Ogumi, J. Electrochem. Soc., 152 (2005), A2151-A2154

¹⁴ F. Sagane, T. Abe, Z. Ogumi, J. Phys. Chem., C 113 (2009), 20135-20138

¹⁵ M. R. Busche, T. Drossel, T. Leichtweiss, M. Falk, M. Schneider, M. L. Reich, H. Sommer, P. Adelhelm, J. Janek, Nat. Chem., 8 (2016), 426-434

$$j = j_0 \left[\exp\left(\alpha \frac{\Delta\tilde{\mu}_{A^{2+},D}}{RT}\right) - \exp\left[(1-\alpha) \frac{\Delta\tilde{\mu}_{A^{2+},D}}{RT}\right] \right] \text{ und } j = -\frac{1}{R_{SLEI}} \frac{\Delta\tilde{\mu}_{A^{2+},SLEI}}{zF}$$

$$\Delta\tilde{\mu}_{A^{2+},if} = \Delta\tilde{\mu}_{A^{2+},D} + \Delta\tilde{\mu}_{A^{2+},SLEI}$$

Hierbei ist formal j_0 die Austauschstromdichte und α der Geometriefaktor der Butler-Volmer-artigen Ionentransferkinetik. Dieses Modell ergibt einen konzentrationsabhängigen Polarisationswiderstand $R_p \propto c_{A^{2+}}^{1-\alpha}$ mit R_{SLEI} als Grenzwert für hohe Elektrolytkonzentrationen:

$$R_p = \frac{RT}{zF j_0} + R_{SLEI} \quad \text{mit} \quad j_0 \propto c_{A^{2+}}^{1-\alpha}$$

Hierbei ist $c_{A^{2+}}$ die Konzentration und z die Ladungszahl des mobilen A^{2+} -Kations im Flüssig-elektrolyt. Die Konzentration der mobilen Kationen im Festelektrolyten wird als nahezu konstant angesehen.

Für $c_{Li^+} = 1 \text{ mol l}^{-1}$ (s. Abb. 68 b) werden durch Anpassung an das obige Modell eine Austauschstromdichte j_0 von $34 \mu\text{A cm}^{-2}$, ein Geometriefaktor α von $\sim 0,4$ und ein konstanter Widerstand R_{SLEI} von $\sim 1000 \Omega \text{ cm}^{-2}$ bestimmt. Für $c_{Li^+} = 0,5 \text{ mol l}^{-1}$ liegt die Austauschstromdichte j_0 lediglich bei $23 \mu\text{A cm}^{-2}$. Die Konzentrationsabhängigkeit des Polarisationswiderstandes $R_p \propto c_{Li^+}^{-0,56}$ sowie dessen Grenzwert von $800 \Omega \text{ cm}^{-2}$ bei hohen Konzentrationen in Abb. 68 b) sind vergleichbar mit diesen Werten für α und R_{SLEI} . Die nun vorliegenden (vorläufigen) Gleichstrommessungen bestätigen die Existenz einer schlecht leitenden und strombegrenzenden Zwischenphase¹⁵ sowie eines Butler-Volmer-artigen aktivierten Ionentransferprozesses^{13,14}. Die Position des Übergangszustandes auf der Reaktionskoordinate ist relativ symmetrisch.

3.7.3 Mitarbeiter und Tätigkeitsfelder

Name	Tel. (02461-61-) e-mail Adresse	Tätigkeitsfeld
PD. Dr. C. Korte	9035 c.korte@fz-juelich.de	Leitung der Abteilung Physikochemisches Brennstoffzellenlabor
A. Everwand	8710 a.everwand@fz-juelich.de	Rasterelektronenmikroskopie / EDX
P. Jehnichen	1891 p.jehnichen@fz-juelich.de	Alterungsprozesse in $\text{LiMn}_{1,5}\text{Ni}_{0,5}\text{O}_4$ -Hochvoltkathodenmaterialien für Li-Akkumulatoren
Fr. K. Klafki	1895 k.klafki@fz-juelich.de	Probenpräparation für Rasterelektronen- und Lichtmikroskopie

Dr. S. Kuhri	1891 s.kuhri@fz-juelich.de	Spektroskopische Untersuchungen: Raman/IR, bildgebende Methoden
M. Schleutker	1891 m.schleutker@fz-juelich.de	Ladungstransfer zwischen Li-Fest- elektrolyten und flüssigen Li- Elektrolyten
Dr. J. Wackerl	6228 j.wackerl@fz-juelich.de	Physikalische Eigenschaften: DSC, TGA, mechanische Eigenschaften, Leitfähigkeit
Dr. K. Wippermann	2572 k.wippermann@fz-juelich.de	Elektrochemische Untersuchungen: Doppelschichtverhalten, elektro- chemische Kinetik, ortsaufgelöste Messungen, Alterungsprozesse

3.7.4 Wichtige Veröffentlichungen und Patente

Veröffentlichungen in begutachteten Zeitschriften

K. Wippermann, J. Wackerl, W. Lehnert, B. Huber, C. Korte

2-Sulfoethylammonium trifluoromethanesulfonate as an Ionic Liquid for High Temperature PEM Fuel Cells

J. Electrochem. Soc., 163 (2016), F25-F37

J. Keppner, C. Korte, J. Schubert, W. Zander, M. Ziegner, D. Stolten

XRD Analysis of Strain States in Epitaxial YSZ / RE₂O₃ (RE = Y, Er) Multilayers as a Function of Layer Thickness

Solid State Ionics, 273 (2015), 2-7

F. Conti, F. Bertasi, J. Wackerl, P. Dams, V. Di Noto, W. Lehnert, C. Korte

Phase Diagram Approach to Study Acid and Water Uptake of Polybenzimidazole-Type Membranes for Fuel Cells

ECS Transactions, 72(8) (2016), 157-167

C. Korte, F. Conti, J. Wackerl, P. Dams, A. Majerus, W. Lehnert

Uptake of Protic Electrolytes by Polybenzimidazole-Type Polymers - Absorption Isotherm and Electrolyte/Polymer Interactions

J. Appl. Electrochem., 45 (2015), 857-871

T. Bergholz, C. Korte, D. Stolten

Development of Benchmarking-Model for Lithium Battery Electrodes

J. Power Sources, 320 (2016), 286-295

Wichtige Patente

Patentanmeldungen:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
T. Bergholz	1.2660	Elektrolytssystem für den Einsatz in elektrochemischen Bauteilen





4

Highlights

Besondere Ergebnisse

- Lithiumbatterien für stationäre und mobile Anwendungen
- Bewertung von Kohlendioxid als Rohstoff in der chemischen Industrie
- Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystem für die Bordstromversorgung
- Stabile Elektroden mit reduziertem Ir-Gehalt für die PEM-Elektrolyse
- Festoxid-Brennstoffzellensystem mit integrierter Schutzgaserzeugung
- PRECORS: Ein „Spin-off“ für korrosionsbeständige Beschichtungen

4.1 Lithiumbatterien für stationäre und mobile Anwendungen

Neben einer Umstellung der elektrischen Energieerzeugung hin zu regenerativen Energieträgern ist die Elektrifizierung des Transportsektors unerlässlich, um die Emission von Treibhausgasen zu reduzieren. Um diese Ziele zu verwirklichen, ist der Einsatz elektrochemischer Speicher aufgrund der Möglichkeit die elektrische Energie direkt ohne Wandler nutzen zu können unerlässlich. Vor diesem Hintergrund wurde sich im Rahmen einer Dissertation mit der Entwicklung eines Modells befasst, um das applikationsspezifische Potential verschiedener elektrochemischer Speicher im Allgemeinen und deren Komponenten im Speziellen bewerten zu können. Die Zielsetzung umfasst zudem die Herleitung und die präparative Bearbeitung von Forschungsschwerpunkten.

Die Bewertung elektrochemischer Speicher ist mittels der Benchmarking-methode applikationsspezifisch durchgeführt worden. Auf Grundlage einer Sensitivitätsanalyse für batterieelektrische Fahrzeuge (BEVs), hybridelektrische Fahrzeuge (HEVs) und einen autarken 4-Personenhaushalt mit einem Photovoltaik-Speichersystem wird abgeleitet, dass die betrachteten Applikationen unterschiedliche Anforderungen an den Speicher aufweisen:

- die Energiedichte für Speicher in BEVs,
- die Leistungsdichte für Speicher in HEVs,
- die Investitionskosten und der Ressourcenbedarf für stationäre Energiespeicher,
- für alle Systeme sind die Sicherheitsmerkmale und die Lebensdauer wichtig.

Darüber hinaus können Ziel- und Mindestwerte sowie Priorisierungsfaktoren für die Anforderungen der Applikationen hergeleitet werden. Auf dieser Grundlage kommt die kennwertgestützte Bewertung der Speicher mittels Benchmarking zu dem Ergebnis, dass Lithiumionenbatterien (LiBs) für alle drei Applikationen die höchsten Potentiale aufweisen.

In der identifizierten Lithiumbatterietechnologie kann eine Vielzahl unterschiedlicher Anoden, Kathoden, Elektrolyte und Passivkomponenten eingesetzt werden. Um die limitierenden Komponenten einzugrenzen und deren Potential in resultierenden Batterien abzuschätzen, wird ein Modell für die Bewertung der verschiedenen Komponenten hergeleitet. Auf Grundlage einer Literaturstudie werden die Einflüsse der verschiedenen Elemente auf die Anforderungen bezüglich Energiedichte, Leistungsdichte, Sicherheit, Lebensdauer, Kosten und Rohstoffe beschrieben und limitierende, zugängliche Kennwerte definiert. Die eingesetzten Elektrodenaktivmaterialien haben Einfluss auf alle genannten Anforderungen. Die Bewertung erfolgt anhand der folgenden Kennwerte:

- für gravimetrische und volumetrische Energiedichte werden die modellierten Daten von 18650-Zellen mit Referenzelektroden (Si bzw. $\text{Li}_2\text{MnO}_3\text{-LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_2$) verwendet,
- der modellierte Partikelradius für einen Peakentladepuls in HEVs, das Redoxpotential des Aktivelektrodenmaterials und die elektrochemische Stabilität gegenüber dem Elektrolyten dienen der Bewertung der Leistungsdichte,
- für die Sicherheit werden die thermische Stabilität der Elektroden gegenüber einem Standardelektrolyten sowie jene des reinen Kathodenaktivmaterials berücksichtigt,
- die elektrochemische Stabilität des Elektrolyten gegenüber den Elektroden, der Volumeneffekt, die thermische Stabilität des Kathodenaktivmaterials und der Anode gegenüber dem Elektrolyten sind limitierend für die Lebensdauer,
- die Kostenbewertung erfolgt auf Grundlage der spezifischen Materialkosten der enthaltenen, redoxaktiven Spezies,

- die zugänglichen Ladungsmengen aus den Rohstoffreserven und der jährlichen Förderung für die jeweilige Elektrode stellen Faktoren für die Rohstoffbewertung dar.

Elektrolyte beeinflussen die Leistungsdichte, die Sicherheit und die Lebensdauer von Batterien maßgeblich. Es werden dabei die folgenden Kennwerte berücksichtigt:

- die thermische Stabilität gegenüber Graphitanoden sowie der Flammpunkt und die Siedetemperatur bilden die Grundlage für die Sicherheitsbewertung,
- die Leistungsdichte wird hauptsächlich durch die Lithiumionenleitfähigkeit und die minimale Einsatztemperatur beeinflusst,
- für die Lebensdauer sind das elektrochemische Stabilitätsfenster sowie die Hydrolysestabilität und die Korrosionseigenschaften gegenüber Al vordringlich.

Im Rahmen der Bewertung von Passivkomponenten haben Stromkollektoren merklichen Einfluss auf die Leistungsdichte, die Lebensdauer und die Kosten von LiBs. Die Verlustleistung in einer Modellzelle, die Legierungsbildung mit Li, die anodische Stabilität und der Rohstoffpreis werden für die Bewertung herangezogen.

Die Bewertung der Komponenten von Lithiumbatterien kann auf Grundlage des hergeleiteten Modells aufgeteilt werden in Interkalationskathoden und -anoden, Konversionselektroden, Elektrolyte sowie in Stromkollektoren. Die zu Anfang hergeleiteten Mindest- und Zielwerte für elektrochemische Speicher in BEVs, HEVs und stationären Applikationen dienen zusätzlich dazu, Ausschlusskriterien für die jeweiligen Komponenten zu identifizieren. Aus der kennwertgestützten quantitativen Bewertung gehen verschiedene relevante Zellsysteme für die Applikationen hervor. Folgende Komponenten sind für BEVs besonders geeignet:

- Eine Kombinationen aus Siliziumanoden und Komposit- ($\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot \text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_2$) bzw. LNMO-Kathoden ($\text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_4$) können die höchsten Reichweiten im EV erreichen (300 bis 500 km auf Zellebene) und weisen geringe spezifische Kosten auf.
- Alternativ können Graphitanoden eingesetzt werden, die verglichen zu Si geringere Energiedichten jedoch eine höhere Lebensdauerbewertung aufweisen.
- Aufgrund der ausreichenden Sicherheits- und Lebensdauerbewertungen und hohen Leistungsdichtebewertung von Gelen auf Basis organischer Lösungsmittel sind diese vorteilhaft in den Zellen auf Basis der Kompositkathoden.
- Im Zusammenhang mit der hohen Zellspannung der LNMO-basierten Systeme ist der Einsatz von ILs aufgrund ihrer hohen anodischen Stabilitäten vordringlich.
- Cu und Al sind aufgrund ihrer hohen elektrischen Leitfähigkeiten, der relativ geringen Kosten und den ausreichenden kathodischen bzw. anodischen Stabilitätsfenstern die einzigen Materialien, die als Anoden- bzw. Kathodenstromkollektor in BEVs eingesetzt werden können.

Zellsysteme für HEVs werden folgende Komponenten zugeordnet:

- Die Zelle auf Basis von LiFePO_4 und $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ hat aufgrund der hohen abgeleiteten Leistungsdichte, in Kombination mit hohen Sicherheits- und Lebensdauerbewertungen das höchste Potential für die Applikation in HEVs.
- Die geringe Zellspannung führt dazu, dass konventionelle organische Lösungsmittel-elektrolyte in Zusammenhang mit deren hoher Leistungsdichtebewertung als Elektrolyt-system geeignet sind.
- Wie für die EV-Zellen kommt lediglich der Einsatz von Cu und Al als Anoden- und Kathodenstromkollektor in Frage.

Die folgenden Komponenten werden Zellen für stationäre Systeme zugeordnet:

- Die relativ hohen Kosten und geringen Reservenbewertungsfaktoren für $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ führen im Gegensatz zur allgemeinen Literaturansicht zu einem Ausschluss des Materials für stationäre Applikationen. Stattdessen wird der Einsatz von TiO_2 als Anode mit LiFePO_4 als vorteilhaft für stationäre Batterien bewertet.
- Die hohen Lebensdauer- und Sicherheitsbewertungsfaktoren von ILs sind Faktoren, die für die Verwendung im stationären Batteriesystem sprechen. Aufgrund der geringen Spannung ist ebenfalls der Einsatz konventioneller organischer Lösungsmittelgele oder reiner organischer Lösungsmittel interessant. Diese weisen im Allgemeinen geringere Materialkosten auf.
- Neben den konventionellen Stromkollektormaterialien Cu und Al, ist die Einführung von Edelstahl (SS304) vorteilhaft, da dieser als bipolarer Kollektor eingesetzt werden kann.

Auf Grundlage der durchgeführten Analyse der Lithiumbatteriekomponenten können folgende, vordringliche Forschungsschwerpunkte abgeleitet werden:

- die Entwicklung eines Degradationsmodells für die EV-Elektroden Li_2MnO_3 - $\text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_2$, $\text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_4$, Si und Graphit, deren Potential außerhalb des Stabilitätsfensters des Elektrolyten liegt,
- die Verbesserung der ionischen Gesamtleitfähigkeit sowie der Transportzahl von hochvoltstabilen ILs für die Applikation in BEVs und stationären Systemen,

Auf Grundlage der literaturbasierten Auswertung verschiedener Degradationsmodelle und Alterungsexperimente an laborskalierten und kommerziellen Zellen, wird häufig das diffusionskontrollierte Wachstum der Solid Electrolyte Interface (SEI) zwischen Anode und Elektrolyt als der limitierende Degradationsprozess beschrieben. Der Mechanismus hat einen parabolischen Zusammenhang zwischen der Kapazitätsabnahme (SoH_Q) und der Widerstandszunahme (SoH_R) mit der Zeit bzw. dem Ladungsmengendurchsatz zur Folge. Für die betrachteten Studien kann eine lineare Korrelation zwischen SoH_R und SoH_Q gefunden werden. Die an HV-Kathodenmaterialien ablaufenden Degradationsprozesse sind in der Literatur noch nicht geklärt. Der Einsatz hochvoltstabiler Elektrolyte ist aber unerlässlich, um sowohl die Lebensdauer als auch die Sicherheitskennwerte von Hochvoltkathoden zu optimieren.

Auf Grundlage der durchgeführten Analyse und des Benchmarkings können folgende Kernaussagen getroffen werden:

- Schwefelkathoden sind bezüglich ihrer Sicherheitseigenschaften und der volumetrischen Energiedichte ungeeignet für die betrachteten Anwendungen,
- Lithium- und Zinnanoden sowie LiCoO_2 , LiNiO_2 , $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,15}\text{Al}_{0,05}\text{O}_2$ (NCA) und $\text{LiNi}_{0,33}\text{Mn}_{0,33}\text{Co}_{0,33}\text{O}_2$ (NMC) können aufgrund ihrer Sicherheitseigenschaften ebenfalls nicht eingesetzt werden,
- organische bzw. anorganische Festelektrolyte sind aufgrund der geringen Leitfähigkeiten bzw. der Ausbildung von Kontaktwiderständen bei der Zyklierung nicht für den Einsatz in großskalierten Zellen geeignet,
- es ist möglich die Energiedichte derzeitiger LiBs signifikant ($\times \sim 2$) zu erhöhen,
- bei einer Optimierung der Rohstoffparameter der Elektroden ist eine deutliche Reduktion der Kosten möglich,
- neue Zellkonzepte erfordern eine Stabilisierung der Elektrodenelektrolytgrenzfläche, um eine ausreichende Lebensdauer, Leistungsdichte und Sicherheit zu gewährleisten,

- sobald ein Elektrolyt thermodynamisch instabil gegenüber dem Potential der Elektrode ist, treten auch nach der Bildung von stabilisierenden Oberflächenschichten irreversible Degradationsreaktionen auf.

Ein Modell für die Bewertung des applikationsspezifischen Potentials elektrochemischer Speicher im Allgemeinen und deren Komponenten im Speziellen konnte implementiert und angewendet werden.

4.2 Bewertung von Kohlendioxid als Rohstoff in der chemischen Industrie

Die International Energy Agency (IEA) stellt im World Energy Outlook 2012¹⁶ Szenarien vor, mit denen die zukünftigen Trends des weltweiten Energiebedarfs und der damit verbundene Kohlendioxidausstoß mit und ohne CO₂-Reduzierungsmaßnahmen abgeschätzt werden können. Abb. 69 zeigt die Maßnahmen sowie deren Beiträge, die im „450 Szenario“ bis zum Jahr 2035 zur Reduzierung von 15 Milliarden Tonnen an CO₂-Emissionen gegenüber dem „New Policies Szenario“ führen sollen. Der Großteil der Reduktion von CO₂-Emissionen soll durch Elektrizitätseinsparung, Wirkungsgraderhöhung bei Kraftwerken, Steigerung der Endenergieeffizienz sowie den Ausbau von erneuerbaren Energien und Kernenergie erreicht werden (siehe Seite 241-265 in ¹⁶).

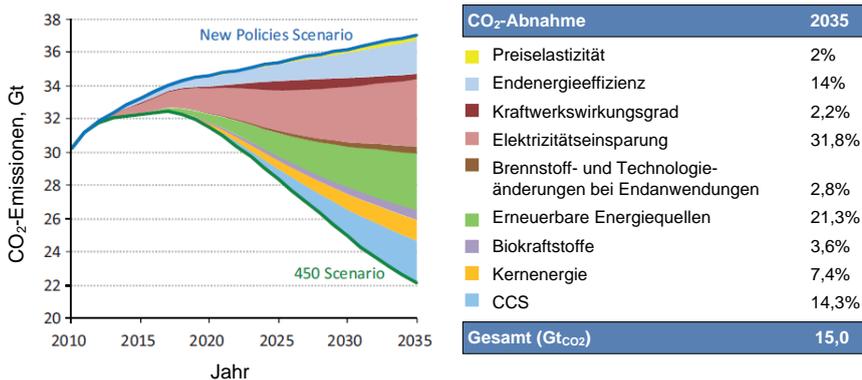


Abb. 69: Abnahme der globalen energieverbundenen CO₂-Emissionen im „450 Szenario“ in Relation zum „New Policies Szenario“ (siehe Seite 253 in ¹⁶)
CCS = Carbon Capture and Storage

Nach dem „450 Szenario“ wird auch in Zukunft ein Drittel des weltweiten Elektrizitätsbedarfs (10487 TWh) durch fossile Kraftwerksprozesse gedeckt. Bis zum Jahr 2035 sollen davon rund 3640 TWh durch fossile Kraftwerke bereitgestellt werden, bei denen das entstehende CO₂ separiert und durch geologische Speicherung von der Atmosphäre ferngehalten wird. Dies wird auch als „Carbon Capture and Storage“ (CCS)¹⁷ bezeichnet. CCS soll im Jahr 2035 zu einer Reduzierung der CO₂-Emissionen um 14,3 % bzw. 2,1 Milliarden Tonnen gegenüber dem „New Policies Szenario“ (siehe Seite 182 und 251 in ¹⁶) führen. In der „Technology Roadmap - Carbon Capture and Storage“ der International Energy Agency¹⁸ sollen sich die CCS-Technologien in Zukunft nicht nur auf Stromerzeugung beschränken. Bis 2050 sollen auch zwischen 25 % und 40 % der weltweiten Stahl-, Zement- und Chemieanlagen mit CCS ausgestattet werden. Von 2015 bis 2050 ergibt sich daraus eine kumulierte Menge von ungefähr 120 Milliarden Tonnen CO₂, die sowohl aus der Stromerzeugung als auch aus der Industrie stammen und in geologischen Formationen gespeichert werden müssen. Ein genereller Nachteil der geologischen Speicherung besteht in den zusätzlichen

¹⁶ World Energy Outlook 2012, Paris: International Energy Agency, ISBN: 978-92-64-18084-0

¹⁷ Stolten, D., Scherer V. (eds.): Efficient Carbon Capture for Coal Power Plants. WILEY-VCH, Weinheim (2011), ISBN: 978-3-527-33002-7

¹⁸ Technology Roadmap - Carbon Capture and Storage, 2013, International Energy Agency, France

Kosten und dem zusätzlichen Energieaufwand. Der zusätzliche Energieaufwand resultiert daraus, dass das CO₂, welches nach der Abtrennung meist atmosphärisch vorliegt, für die Speicherung auf mindestens 100 bar komprimiert und zu den Lagerstätten transportiert werden muss (siehe Seite 527-540 in ¹⁷). Hinzu kommt, dass die geologische Speicherung von CO₂ in Deutschland umstritten und derzeit gesetzlich auf vorerst 4 Millionen Tonnen pro Jahr beschränkt ist¹⁹.

Als Alternative zur geologischen Speicherung kann das abgetrennte CO₂ als Rohstoff für die chemische Industrie genutzt werden. Dieses Prinzip ist auch unter dem Begriff „Carbon Capture and Utilisation“ (CCU) bekannt. Durch die Nutzung erhält das Abfallprodukt eine Wertsteigerung und Kosten sowie Energieaufwand der Speicherung entfallen. Obwohl CO₂ als Verbrennungsprodukt mit einer Standardbildungsenthalpie von -393,51 kJ/mol unreaktiv ist, kann es mit hochreaktiven Reaktionspartnern wie z.B. Wasserstoff zu nützlichen Produkten umgesetzt werden.

Die Konvertierung von Kohlendioxid in höherwertige Produkte kann chemisch, elektrochemisch, biochemisch oder photochemisch erfolgen (Abb. 70). Abhängig von der Natur des Umwandlungsprozesses erfolgt die Zufuhr der benötigten Energie thermisch, elektrisch, chemisch oder durch Licht. Neben der Darstellung von stofflichen Produkten kann die Konvertierung von CO₂, z.B. zu Methan, auch als Energiespeicher für erneuerbare Energien angewandt werden. Dies stellt eine Option der sogenannten „Power-to-Gas“-Verfahren dar.

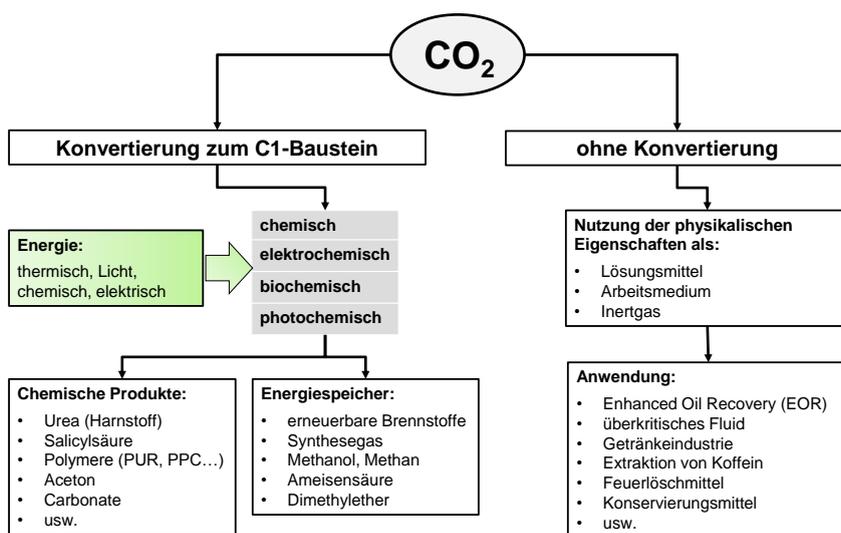


Abb. 70: Mögliche Pfade zur Nutzung von CO₂, mit und ohne Konvertierung

In der Literatur existieren zahlreiche Reaktionen, bei denen CO₂ als Rohstoff eingesetzt wird. Diese reichen von Bulkchemikalien mit großem Absatzmarkt wie Methanol, bis hin zu zahlreichen Feinchemikalien und Polymeren. In der Regel beschäftigen sich die Veröffentlichungen ausschließlich mit der Durchführbarkeit der Reaktion, ohne das Potential

¹⁹ Gesetz zur Demonstration der dauerhaften Speicherung von Kohlendioxid (Kohlendioxid-Speicherungsgesetz - KSpG), 17.08.2013, Bundesanzeiger Verlag: <http://www.bmwi.de/BMWi/Redaktion/PDF/Gesetz/gesetzentwurf-ccs-08-2012.property=pdf,bereich=bmwi2012.sprache=de.rwb=true.pdf>

dieser Reaktionen bezüglich des CO₂-Reduktionspotentials gegenüber dem konventionellen Prozess sowie die technische Machbarkeit oder die Wirtschaftlichkeit zu betrachten. Derzeit bestehen in der Literatur noch Lücken bei systematischen Untersuchungen, die potentiell Produkte und Prozesse auf CO₂-Basis bezüglich des zukünftigen Potentials der industriellen Durchführbarkeit, der Klimarelevanz und der Wirtschaftlichkeit bewerten. Die Arbeiten des IEK-3²⁰ haben daher dazu beitragen diese Lücken zu schließen, indem geeignete CO₂-Nutzungsreaktionen identifiziert sowie anschließend analysiert und bewertet werden.

Auf Grundlage einer ausführlichen Literaturrecherche zur möglichen chemischen Umsetzung von CO₂ erfolgte eine Erfassung von 123 CO₂-basierten Reaktionen. Die aus den Reaktionen resultierenden Produkte konnten in 23 Bulkchemikalien und 100 Feinchemikalien unterteilt werden. In einer Vorbewertung wurden die Reaktionen beziehungsweise Produkte bezüglich des CO₂-Reduktionspotentials und des wirtschaftlichen Interesses, das die chemische Industrie an den resultierenden Produkten haben könnte, eingeordnet. Die Bewertung erfolgte dabei anhand von Auswahlkriterien, die speziell auf die Bulk- und Feinchemikalien angepasst wurden, um eine sensible Einordnung der Stoffe in eine Rangliste zu erreichen sowie die zugrundeliegende Qualität der Daten, auf deren Basis die Bewertung erfolgte, zu berücksichtigen. Folgende eigens entwickelte Kriterien wurden bei der Vorbewertung der Bulk- und Feinchemikalien betrachtet:

Bulkchemikalien

- Spezifisch eingesetzte Masse von CO₂
- CO₂-Reduktionspotential
- Relative Wertschöpfung
- Unabhängigkeit von fossilen Rohstoffen

Feinchemikalien

- Spezifisch eingesetzte Masse von CO₂
- Produktionsmengen der Stoffgruppen
- Relative Wertschöpfung
- Wissenschaftliche Relevanz
- Technische Verfügbarkeit

Dabei führten unter den Bulkchemikalien die CO₂-basierten Reaktionen zu Ameisensäure, Formaldehyd, Oxalsäure, Methanol, Harnstoff und Dimethylether sowie bei den Feinchemikalien zu Methylcarbammat, 3-Oxopentandicarbonsäure, 2-Imidazolion und Ethylcarbammat die Ranglisten an.

Beim direkten Vergleich der Bulk- und Feinchemikalien stellte sich heraus, dass die Feinchemikalien kaum einen massenmäßigen Beitrag als Reduktionsoption von CO₂-Emissionen leisten können. Ursächlich hierfür ist, dass die 23 betrachteten Bulkchemikalien mit einer jährlichen Produktionsmenge von etwa 78 Mio. Tonnen innerhalb der Europäischen Union, unter Berücksichtigung der spezifisch eingesetzten Masse an CO₂, das Potential aufweisen, etwa 59 Mio. Tonnen CO₂ pro Jahr als Rohstoff zu verbrauchen. Dies entspricht ungefähr 1,3 % der THG-Emissionen der EU. Im Gegensatz dazu beträgt die Produktionsmenge für die 12 Stoffgruppen innerhalb der EU, in die die 100 betrachteten Feinchemikalien eingeordnet werden konnten, etwa 4,3 Mio. Tonnen pro Jahr. Dabei muss berücksichtigt werden, dass es sich bei den produzierten Mengen der Stoffgruppen nicht nur um die 100 betrachteten Feinchemikalien, sondern um alle innerhalb der 27 EU-Staaten produzierten Stoffe handelt, die diesen Stoffgruppen angehören. Unter Berücksichtigung,

²⁰ Otto, A. Chemische, verfahrenstechnische und ökonomische Bewertung von Kohlendioxid als Rohstoff in der chemischen Industrie, Schriften des Forschungszentrums Jülich, Energie & Umwelt , 268 (2015)

dass für die Synthese der betrachteten Feinchemikalien durchschnittlich $0,31 \text{ kg}_{\text{CO}_2}/\text{kg}_{\text{Produkt}}$ eingesetzt werden und unter der Annahme, dass die Produktionsmenge der 100 betrachteten Feinchemikalien gleich der 12 Stoffgruppen ist, könnten diese höchstens zu einer Reduktion von 0,029 % der THG-Emissionen innerhalb der EU beitragen.

Die Stärke der Feinchemikalien liegt in einer hohen relativen Wertschöpfung. Daher kann für chemische Betriebe, bei denen kleinere Mengen CO_2 freigesetzt werden, die Synthese von Feinchemikalien direkt vor Ort aufgrund der hohen erreichbaren Wertschöpfung von wirtschaftlichem Interesse sein. Für die Bulkchemikalien Ameisensäure, Formaldehyd, Oxalsäure, Methanol und Dimethylether, die bei der Vorauswahl die Kriterien am ehesten erfüllt haben, erfolgte ein direkter Vergleich des CO_2 -basierten mit dem konventionellen Verfahren. Durch die literaturgestützten Abschätzungen des Potentials der CO_2 -basierten Reaktionen gegenüber dem konventionellen Verfahren CO_2 -Emissionen einzusparen, zeigte sich, dass Oxalsäure und Formaldehyd, die als ideale CO_2 -Nutzungsreaktionen ermittelt wurden, nach dem heutigen Stand der Forschung gegenüber dem konventionellen Prozess zu keiner Reduktion von CO_2 -Emissionen führen.

Für die CO_2 -basierten Reaktionen von Methanol und Dimethylether, die das Potential aufwiesen CO_2 -Emissionen gegenüber dem konventionellen Prozess einzusparen, erfolgte ein simulationsgestützter Vergleich mit den konventionellen Verfahren. Anhand der Simulationen der eigens entwickelten CO_2 -basierten Prozesse konnte nachgewiesen werden, dass diese eine großtechnische Umsetzung der betrachteten CO_2 -basierten Reaktionen ermöglichen. Durch den Vergleich mit den konventionellen Prozessen stellte sich heraus, dass die CO_2 -basierten Prozesse nur zu einer Reduktion von CO_2 -Emissionen gegenüber dem konventionellen Prozess führen, wenn der als CO -Reaktand eingesetzte Wasserstoff aus Elektrolyse, betrieben mit Strom aus erneuerbaren Energien, bereitgestellt wird. Damit ist die Herstellungsweise des Wasserstoffes entscheidend dafür, ob der CO_2 -Nutzungsprozess als CO_2 -Reduktionsoption fungieren kann oder sogar mehr CO_2 emittiert als der konventionelle Prozess. Außerdem ergab sich aus der Analyse der Harnstoff-Synthese, dass dieser Prozess, obwohl er als Vorbild für die großtechnische Nutzung von CO_2 gilt, mehr CO_2 emittiert als beim Prozess gebunden wird. Damit der Harnstoffprozess eine negative CO_2 -Bilanz erreicht, müsste auch hier der für die Synthese des Ammoniaks benötigte Wasserstoff aus der Elektrolyse von Wasser, betrieben mit Strom aus erneuerbaren Energien, stammen.

Für die zukünftige Umsetzung eines CO_2 -basierten Prozesses ist neben der Möglichkeit CO_2 -Emissionen zu reduzieren auch die wirtschaftliche Umsetzbarkeit von Bedeutung. Daher wurden für Methanol und Dimethylether, die die größte Reduktion von CO_2 -Emissionen gegenüber den konventionellen Herstellungsverfahren aufweisen, die Herstellkosten des CO_2 -basierten und konventionellen Prozesses berechnet und miteinander verglichen. Unter Berücksichtigung des aktuellen CO_2 -Zertifikatspreises von $0,35 \text{ €}/\text{kg}_{\text{CO}_2}$ liegen die Herstellkosten des CO_2 -basierten Methanol- und Dimethylether-Prozesses mit $1,1 \text{ €/kg}_{\text{MeOH}}$ um das 3,3-fache beziehungsweise mit $1,7 \text{ €/kg}_{\text{DME}}$ um das 2,3-fache höher als beim jeweiligen konventionellen Herstellungsverfahren. Selbst unter der Annahme eines zukünftig 10-fach höheren CO_2 -Zertifikatspreises liegen die spezifischen Herstellkosten beim CO_2 -basierten Methanol-Prozess noch um das 3,1-fache und beim DME-Prozess um das 2,2-fache höher als beim konventionellen Prozess. Erst ab einem CO_2 -Zertifikatspreis von $0,545 \text{ €/kg}_{\text{CO}_2}$ im Falle von Methanol und $0,438 \text{ €/kg}_{\text{CO}_2}$ im Falle von Dimethylether besteht eine Parität der Herstellkosten zwischen dem CO_2 -basierten und konventionellen Prozess.

Diese liegen jedoch etwa 125 bis 155-mal höher als die derzeitigen CO₂-Zertifikatspreise. Als Differenz zwischen dem aktuellen Zertifikatspreis und dem benötigten CO₂-Zertifikatspreis ergeben sich die CO₂-Vermeidungskosten. Im Falle des CO₂-basierten Methanol-Prozesses liegen diese unter Berücksichtigung des aktuellen CO₂-Zertifikatspreises bei 0,541 €/kg_{CO2} und beim Dimethylether-Prozess bei 0,435 €/kg_{CO2}.

Für die CO₂-basierten Prozesse wurde davon ausgegangen, dass das als Rohstoff eingesetzte CO₂ aus dem Rauchgas von fossilen Kraftwerksprozessen stammt. Alternativ könnte das CO₂ nach der Abtrennung im Kraftwerk auch direkt in geologischen Formationen gespeichert werden. Damit können unter den gegebenen Randbedingungen die CO₂-Vermeidungskosten der CO₂-basierten Methanol- und Dimethylether-Synthese direkt mit den Kosten für die geologische Speicherung verglichen werden. Nach einer Studie von McKinsey & Company²¹ betragen die CO₂-Vermeidungskosten für die geologische Speicherung von CO₂ in Aquiferen innerhalb Deutschlands 0,6 €/kg_{CO2}. Damit liegen die Kosten für die Vermeidung von CO₂ über die Synthese von Methanol unter Berücksichtigung des aktuellen CO₂-Zertifikatspreises um das 90-fache und für die Synthese von Dimethylether um das fast 73-fache höher. Die CO₂-basierte Synthese von Methanol und Dimethylether stellt somit keine wirtschaftliche Alternative gegenüber der geologischen Speicherung von CO₂ dar. Auch im Vergleich zu den durchschnittlichen CO₂-Vermeidungskosten alternativer Reduktionsoptionen, wie dem Ausbau erneuerbarer Energien (3,2 €/t /kg_{CO2}) oder der Substitution von Braunkohle durch Erdgas (5 €/t/kg_{CO2}), ist die Herstellung von Methanol und Dimethylether keine wirtschaftliche Alternative zur Einsparung von CO₂. Zum Vergleich der CO₂-basierten Prozesse mit diesen Reduktionsoptionen, sind zusätzlich die Kosten für die CO₂-Abtrennung im Kraftwerk mit zu berücksichtigen.

Die hohen CO₂-Vermeidungskosten bei der CO₂-basierten Synthese von Methanol und Dimethylether sind hauptsächlich auf die hohen Rohstoffkosten für die Wasserstoffbereitstellung zurückzuführen. Der Wasserstoff muss aus Elektrolyse, die mit regenerativem Strom betrieben wird, stammen, damit die CO₂-basierten Prozesse eine Netto-CO₂-Reduktion gegenüber dem konventionellen Prozess erreichen. Bei der Berechnung der Herstellkosten wurde in dieser Arbeit von mit Windstrom betriebener Elektrolyse und mit einem auf Basis der Literatur festgelegten Wasserstoffpreis von 5,22 €/kg_{H2} ausgegangen. Damit die CO₂-basierte Synthese von Methanol und Dimethylether als CO₂-Reduktionsoption ohne die Entstehung von CO₂-Vermeidungskosten genutzt werden kann, muss der Wasserstoffpreis im Falle der Methanol-Synthese auf 1,22 €/kg_{H2} und im Falle der Dimethylether-Synthese auf 1,76 €/kg sinken. Damit wird in Zukunft neben höheren CO₂-Zertifikatspreisen hauptsächlich die Preisentwicklung des durch Elektrolyse hergestellten Wasserstoffes ausschlaggebend für die wirtschaftliche Umsetzung der beiden CO₂-basierten Prozesse sein.

Für die zukünftige chemische Nutzung von Kohlendioxid als CO₂-Reduktionsoption eignet sich aufgrund der hohen Produktionsmengen hauptsächlich die Herstellung von Bulkchemikalien. Dabei müssen die Reaktionen für eine erfolgreiche und wirtschaftliche Umsetzung mit hochreaktiven Co-Reaktanden durchgeführt werden, deren Herstellungsprozesse preiswert sind und gleichzeitig geringe CO₂-Emissionen aufweisen. Die Synthesen von Feinchemikalien können zwar keinen großen Beitrag zur Reduktion von CO₂-Emissionen leisten, weisen jedoch großes Potential für eine wirtschaftliche Umsetzung auf.

²¹ Kosten und potenzielle der Vermeidung von Treibhausgasemissionen in Deutschland, T. Vahlenkamp, Editor 2007, McKinsey & Company.

4.3 Brennstoffzellen-Batterie-Hybridssystem für die Bordstromversorgung

Im Rahmen der Dissertation „Computerunterstützte Auslegung eines Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystems für die Bordstromversorgung“ wurde eine Methodik erarbeitet, um ein Brennstoffzellensystem mit Dieselreformierung hinsichtlich der Anforderungen einer mobilen Anwendung für die Bordstromversorgung ganzheitlich weiterzuentwickeln. Aus dem Abgleich der Eigenschaften des bestehenden Systems und den Anforderungen, ergaben sich die drei Bausteine Anfahrvorgang des Gesamtsystems, Hybridisierung des Gesamtsystems und Packaging des Brenngaserzeugungssystems. Diese drei Themengebiete wurden miteinander vernetzt betrachtet und optimiert.

Basierend auf den Erkenntnissen aus der Literaturrecherche wurde ein methodischer Ansatz entwickelt. Als Methodik wurden thermodynamische Berechnungen angewendet, um entwickelte Konzepte zu überprüfen. Diese wurden in einem zweiten Schritt durch dynamische Systemsimulationen unterstützt. Die Simulationen wurden sowohl für den Startvorgang, als auch für die Hybridisierung des Systems angewendet. Die beiden Modelle ergänzen sich zu einem Gesamtsystemmodell des Hybridsystems²². Im Rahmen des Packagings wurden weiterhin strömungsdynamische Simulationen durchgeführt. Diese bauten auf den bisher am IEK-3 durchgeführten Arbeiten auf. Die verwendeten Modelle wurden hinsichtlich der dynamischen Simulation der Aufheizvorgänge und der Simulation eines Packages erweitert. Die strömungsdynamischen Simulationen wurden zur Reduzierung der Rechenzeit parallelisiert durchgeführt. Unterstützt wurde die Simulationsmethodik durch Experimente mit dem Gesamtsystem und verschiedenen Einzelkomponenten. Durch diese Experimente konnten die Randbedingungen für die Simulationen gesetzt werden und die Methodik konnte überprüft werden.

Bei der Entwicklung des Startkonzeptes wurden sowohl ein thermisches als auch ein elektrisches Konzept entwickelt. Das thermische Konzept basiert auf der Verwendung eines Startbrenners und der Übertragung der freigesetzten Wärme in einem ersten Wärmeübertrager an Luft zur Aufheizung der Brenngaserzeugung und in einem zweiten Wärmeübertrager an das Wärmeträgeröl der Brennstoffzelle. Simulationen haben gezeigt, dass für einen energieeffizienten Startvorgang die Brennstoffzelle zuerst aufgeheizt und die Brenngaserzeugung erst danach gestartet werden sollte. Weiterhin wurde ein elektrisches Startkonzept entwickelt. Bei diesem Konzept wird zuerst Luft erwärmt, um das System aufzuheizen. Für den Startvorgang muss Wasser innerhalb des Reformers verdampft werden. Für diesen Zweck wurde eine elektrische Heizung in den Reformer ATR 12 integriert, sodass der Reformer mit 20 % seiner Leistung startfähig ist. Nach der Zündung des Reformers wird die im Katalytbrenner durch die Oxidation des Reformats freiwerdende Wärme zur Aufheizung der Brennstoffzelle genutzt. Die simulierte Aufheizzeit für diesen Startvorgang war mit 31 min, 13 min kürzer als die Startzeit des thermischen Startvorgangs.

Weiterhin wurde der Startvorgang auch durch zweidimensionale strömungsmechanische Simulationen modelliert. Hierzu wurden verschiedene Ansätze für die Modellierung des porösen Körpers mit experimentellen Aufheizkurven verglichen. Die Verwendung des

²² Krupp, C., Computerunterstützte Auslegung eines Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystems für die Bordstromversorgung, Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment 309, iii, 207 (2016)

Einzelnen-Modells führte zu einer Abweichung der Aufheizzeit von 97 s bei 12000 NI/h Luft und 192 s bei 6000 NI/h Luft bis die Monolithtemperatur von 120 °C erreicht war. Die prozentualen Abweichungen liegen bei 47 % beziehungsweise 56 %. Die Verwendung des Zweizonen-Modells führt für die gleichen Simulationsrandbedingungen zu einer Abweichung von 3 s bei 12000 NI/h Luft und 5 s bei 6000 NI/h Luft. Die prozentuale Abweichung beträgt in beiden Fällen lediglich 1,5 % bezogen auf die experimentell ermittelte Zeit. Für die dynamische Simulation des Gesamtsystems wurde eine Methodik zur Kopplung der einzelnen Reaktoren in einer 2D-Simulation entwickelt. Durch diese Methodik konnte das strömungsdynamische Modell auf eine Gesamtsimulation der Systemkomponenten erweitert werden. Mit diesem Modell konnten dann die Einflussfaktoren auf den Aufheizevorgang detailliert untersucht werden. Eine Aufheizung mit einer höheren Leistung wirkt sich vorteilhaft aus, da weniger Wärme an die Isolierung abgegeben wird. Bei der Verwendung des Reformers ATR 9.2 ist bei einer Aufheizung des Systems der Katalytbrenner die limitierende Komponente. Bei einer Aufheizleistung von 2 kW und einer Eintrittstemperatur von 600 °C beträgt die Aufheizzeit 28 min und bei 500 °C 24 min. Bei der Verwendung des Reformers ATR 12 ist der Monolith im Reformer die limitierende Komponente. Bis dieser auf 320 °C aufgeheizt ist, wird bei einer Eintrittstemperatur von 600 °C und einer Aufheizung durch den Dampfweg eine Aufheizzeit von 22 min errechnet, bei 500 °C beträgt diese 24 min. Die Leistung wurde in diesen Fällen immer konstant zu 2 kW gewählt. Für die Packagevariante mit dem ATR 12 wurden verschiedene Einflussparameter untersucht. Die Aufheizzeit des Katalytbrenners kann durch eine zusätzliche Beheizung mit einer Leistung von 0,5 kW so beschleunigt werden, dass der Katalytbrenner nicht mehr die letzte Komponente ist, die den Taupunkt erreicht. Eine Aufheizung ab diesem Punkt mit Wasserdampf und einer Leistung von 2 kW führt zu einer Verzögerung der Aufheizung. Die Aufheizzeit kann durch eine Erhöhung der Leistung geringfügig beschleunigt werden, was jedoch energetisch nachteilig ist. Bei dem vorteilhaftesten Startvorgang wird der Reformer parallel mit Luft, die in den Luft- und den Dampfweg zugegeben wird, mit einer Leistung von jeweils 1 kW aufgeheizt. Zusätzlich wurde dem Katalytbrenner Luft mit einer Leistung von 0,5 kW zugegeben. Durch diesen Vorgang konnte der Startvorgang der Brenngaserzeugung in den 2D-Simulationen von 22 min im Basisfall auf 9,5 min reduziert werden.

Bei der Hybridisierung wurden passive und aktive Konzepte untersucht. Bei einer Verschaltung zum passiven Hybrid wurde die Brennstoffzellenspannung bei der gewünschten Leistung auf die offene Zellspannung der Batterie dimensioniert. Dieses Konzept führte zu einer sehr geringen Anpassung der Brennstoffzellenleistung zwischen 1667 W und 1968 W im Betrieb. Diese Änderung ist auf die Spannungsänderung der Batterie bei einer Änderung des Ladezustandes zurückzuführen. Die Batterie muss durch die geringe Änderung der Brennstoffzellenleistung bei diesem Konzept mit mindestens 15 parallelen Zellen groß dimensioniert werden. Ein Konzept, bei dem die Brennstoffzelle den Leistungsbedarf bis zu einer gewissen Grenze komplett abdeckt, wird aufgrund der hohen dynamischen Beanspruchung der Brennstoffzelle ausgeschlossen. Beim aktiven Hybrid wurden verschiedene Betriebsstrategien untersucht. Der Betrieb der Brennstoffzelle bei einer konstanten Leistung führte zum besten Systemwirkungsgrad von 29,3 %, aber mit 15 parallelen Zellen auch zur größten Batterie. Durch einen dynamischen Betrieb des Brenngaserzeugungssystems kann die Batteriegröße um bis zu 87 % reduziert werden. Die kleinste Batterie mit nur 2 parallelen Zellen wird für einen dynamischen Betrieb der Brenngaserzeugung zusammen mit einer Absenkung des Brennstoffnutzungsgrades bei sehr kleinen Leistungsanforderungen erreicht. Der Wirkungsgrad sinkt für diesen Fall auf

26,1 % ab. Weiterhin wurde der Einfluss des Startvorgangs auf die Hybridisierung untersucht. Die Berücksichtigung des Startvorgangs führt zu einer größeren Batterie. Der Wirkungsgrad des Systems fällt bei der Berücksichtigung des Startvorgangs auf bis zu 25,3 % ab. Es wurde gezeigt, dass das System möglichst bevor ein Leistungsbedarf anfällt gestartet werden sollte und dies wenn möglich durch die Abwärme des Lastkraftwagens geschehen sollte. Durch den vorgezogenen Startvorgang steigt der Wirkungsgrad auf bis zu 26,2 % an. Die Verwendung von Abwärme für die Aufheizung der Brennstoffzelle erhöht den Wirkungsgrad auf 28,1 %.

Im Rahmen des Packagings wurde eine Simulationsmethodik für die Modellierung des gesamten Brenngaserzeugungspackages entwickelt. Für die Erstellung des Rechengitters wurden verschiedene Methoden hinsichtlich ihrer Eignung für die Simulation untersucht und verglichen. Für den Reformer ATR 9.2 wurden ein hybrides Rechenetz mit ausschließlich konformer Grenzflächenvernetzung und eins mit überwiegend konformer Grenzflächenvernetzung aber mit vereinzelter Verwendung von Interfaces angewandt. Durch die Verwendung der Interfaces konnte die Netzgröße auf beiden Seiten des Interfaces unabhängig voneinander gewählt werden. An den Interfaces wurden für die benachbarten Oberflächen konforme Grenzflächen erstellt. Diese wurden jedoch durch eine Duplizierung der Geometrie unabhängig voneinander vernetzt. Anschließend wurden diese Flächen im Löser manuell zugeordnet. Die Verwendung der Interface-Vernetzung führte durch die unabhängige Wahl der Vernetzungsgrößen zu einer Reduzierung der Zellanzahl und der Rechenzeit. Die Zellanzahl konnte beim Reformer ATR 9.2 für unterschiedliche Netzgrößen von 34,5 Millionen auf 6,4 Millionen bzw. 2,9 Millionen Zellen reduziert werden. Die Rechenzeiterparnis ergab sich zu 86 % bzw. 92 %. Die Ergebnisse der Simulation waren für beide Vernetzungsmethoden sehr ähnlich. Durch diese neue Vernetzungsmethode wurde die akademische Methode auf eine zur Optimierung anwendbare Methodik überführt. Mit der Vernetzungsmethode der Interface-Vernetzung wurde anschließend der Reformer ATR 9.2 zusammen mit dem WGS 4 berechnet.



Abb. 71: Aufbau des Packages 5 mit einer Leistungsklasse von 10 kW_e

Basierend auf den Simulationsergebnissen des thermischen Startvorgangs wurde das Package 5 konstruiert. Dieses ist in Abb. 71 dargestellt. Der Startbrenner wird bei diesem Konzept zur Senkung des Druckverlustes direkt an den Wärmeübertrager angeflanscht. Der

Startbrenner-Wärmeübertrager ist direkt neben dem Reformer angeordnet, um die Rohrlänge der Leitungen zu minimieren. Das Reformat strömt vom ATR in den daneben angeordneten WGS-Reaktor und anschließend durch den getesteten Mikrostruktur-Wärmeübertrager. Danach gelangt das Reformat zur Brennstoffzelle und das nicht umgewandelte Reformat (Anodenrestgas) wird im Katalytbrenner vollständig oxidiert. Die Reaktionswärme wird zur Erzeugung des für den Reformer benötigten Wasserdampfes verwendet. Sobald der Wasserdampf durch den Katalytbrenner bereitgestellt wird, kann der Startbrenner ausgeschaltet werden.

Der für den elektrischen Startvorgang benötigte ATR 12 mit dem integrierten elektrischen Heizelement wurde experimentell untersucht. Bei einer Aufheizung des Reformers mit 40 % der Nennleistung des integrierten Heizelements konnte der Reformer innerhalb von 25 min auf die für die Zündung benötigten Temperaturen aufgeheizt werden. In diesen Experimenten konnte weiterhin das Konzept der internen Wasserverdampfung während des Startvorgangs validiert werden. Bei der Wassereindüsung in den Reformer sinkt die Temperatur im Dampfrohr des Reformers nur geringfügig ab. Bei der Wassereindüsung wirken sich sowohl die thermische Masse des Reformers, als auch die Wärmeübertragung von den austretenden Gasen an das eingedüste Wasser positiv aus. Durch dieses Konzept wird die im Wärmeübertrager vorhandene Fläche für die Verdampfung des Wassers ausgenutzt, so dass auf einen externen Verdampfer während des Startvorgangs verzichtet werden kann. Dies wirkt sich positiv auf das Volumen und das Gewicht des Packages aus. Die geringe thermische Masse des Heizdrahtes ist ebenfalls sehr vorteilhaft für einen schnellen Startvorgang des Systems. Der Reformer ATR 12 kann somit ohne eine zusätzliche externe Beheizung aufgeheizt und gezündet werden. Weiterhin wurde die integrierte Bauweise der Reaktoren am Beispiel des Reaktors WGS 6 demonstriert.

Die Reaktoren ATR 12, WGS 6 und CAB 5 werden für das auf dem elektrischen Startkonzept basierende Package verwendet. Für die transienten Aufheizsimulationen des Packages 6 wurde das im Rahmen der Anfahrstrategieentwicklung validierte Zweizonen-Modell für die porösen Körper verwendet. Bei der Erzeugung des Rechengitters wurde die Methodik der Interface-Vernetzung mit den Vernetzungsparametern der Netzstudie angewandt. Mit dem so erstellten 3D-Gesamtmodell wurde der Aufheizvorgang des Packages untersucht. Das System wird dabei durch drei Stränge parallel aufgeheizt. Bei dieser Aufheizung ist nach 10 min in dem Reformermonolith der Taupunkt überschritten. Auf den Monolithen des Reformers folgen der HTS-Monolith und der Monolith im Katalytbrenner. Zuletzt ist der Taupunkt im NTS-Monolithen nach 19 min überschritten. Dieser Zeitverlauf spiegelt die Ergebnisse der 2D-Simulation wieder. Durch die Berücksichtigung der Ein- und Auslässe kommt es jedoch zu einer deutlichen Verzögerung des Aufheizvorgangs. Der Taupunkt ist in der 3D-Simulation erst nach 19 min in allen Komponenten überschritten, im Vergleich zu den simulierten 9,5 min in der 2D-Simulation. Der Reformer ist aufgrund der benötigten Temperatur von 320 °C im Monolithen erst nach 30 min zündbereit. Die starke Abweichung zu den simulierten 9 min aus der 2D-Simulation ist durch die starke Vereinfachung der Verbindungsrohre in der 2D-Simulation begründet.

Die Temperaturprofile während des Aufheizvorgangs des Systems sind in Abb. 72 dargestellt. Es wird erhitzte Luft durch den Luft- und den Dampfweg des Reformers und durch die Zuleitung zum Katalytbrenner zugegeben. Die dem Reformer nachgeschalteten Komponenten profitieren von der im integrierten Wärmeübertrager des Reformers übertragenen Wärme an die austretende Luft. Durch die Übertragung dieser Wärme gelangt

die Luft deutlich abgekühlt in die Mischkammer. Die durch den Luftweg zugeführte Luft gelangt schon nach 5 min mit 300 °C in den Luftkranz der Mischkammer. Die Strömung der Luft durch die dünnen Bohrungen in den Blechen und die Vermischung mit der kalten Luft kühlt die Luft aus dem Luftstrang jedoch sehr stark ab, sodass erst nach 15 min 300 °C in der Mischkammer erreicht werden. Da der Katalytbrenner nur auf eine Temperatur von 120 °C aufgeheizt werden muss, wird die Leistung der zugeführten Luft mit 0,5 kW gewählt.

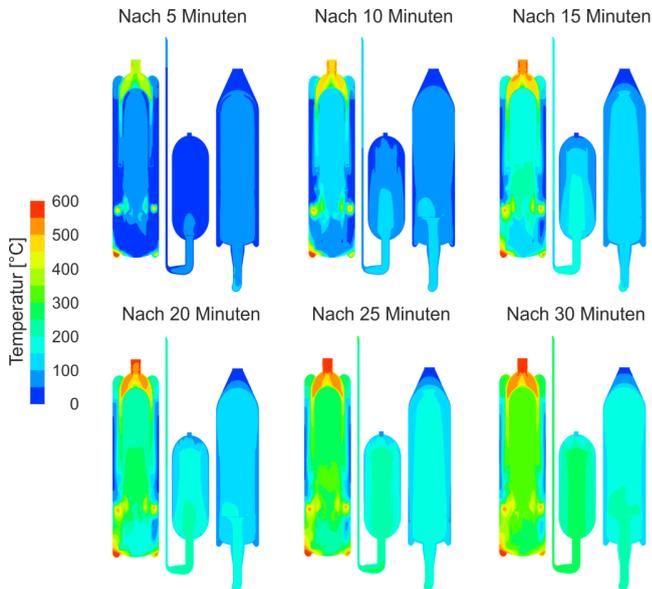


Abb. 72: Temperaturprofil während des Aufheizvorgangs in den Komponenten von Package 6

Durch die Berücksichtigung des Startvorgangs, der sich aus der Berechnung des 3D-Packages ergibt, sinkt der Wirkungsgrad des Hybridsystems für den Fall einer vorgeheizten Brennstoffzelle auf 24,8 % ab. Dies zeigt deutlich, dass die Anzahl und die Länge der Verbindungsrohre, die bei der 2D-Simulation vernachlässigt wurden, stark reduziert werden müssen.

Die entwickelte Methodik bildet die Grundlage für die Entwicklung eines kompakten zylindrischen Packages. Weiterhin wurde eine Methodik für die Dimensionierung und Bewertung von Hybridsystemen entwickelt. Die Integration des Startvorgangs in die Packageentwicklung auf der einen Seite und in die Hybridisierung auf der anderen Seite, ermöglichte eine ganzheitliche Betrachtung der Bausteine Packaging, Startvorgang und Hybridisierung. Die Gesamtmethodik wurde für die Optimierung des aktuellen Brennstoffzellensystems angewendet. Durch die Gesamtmethodik können sowohl bestehende, als auch neue Systeme (weiter-)entwickelt und optimiert werden, wodurch es möglich ist, eine Vielzahl der Anforderungen an ein mobiles System zu erfüllen. Zusammenfassend wurde in dieser Arbeit das übergeordnete Ziel der Entwicklung einer ganzheitlichen Methodik zur Optimierung des Systems erreicht. Die entwickelte Methodik wurde zur Weiterentwicklung des bestehenden Brennstoffzellensystems mit Dieselreformierung angewandt.

4.4 Stabile Elektroden mit reduziertem Ir-Gehalt für die PEM-Elektrolyse

Aktuelle Herausforderungen auf dem Gebiet der PEM-Elektrolyse lassen sich zu drei zentralen Zielen gruppieren: i) die Reduktion der Stackkosten, ii) die Verbesserung der Stackperformance und iii) die Erhöhung der Langzeitstabilität unter den relevanten Betriebsbedingungen. Dabei bieten alle Stackkomponenten weiteren Raum für Optimierung. Hierzu zählen die Membran-Elektroden-Einheit (MEA), die Stromkollektoren und die Bipolarplatten.

Die Edelmetallkatalysatoren sind ein Teil der MEA und damit eine Komponente mit großem Einfluss auf die Stackkosten. Für ein System mit einer Leistung von 40,8 kW beträgt der Anteil der Kosten für die Membran-Elektroden-Einheit (MEA) beispielsweise etwa 13 % der gesamten Installationskosten²³. Dieser Anteil nimmt mit Sicherheit steigender Systemgröße in den Megawattbereich weiter zu. Eine Reduktion des Einsatzes an Edelmetallkatalysatoren wirkt sich daher positiv auf die Investitionskosten von PEM-Elektrolyseuren aus. Neben den Kosten für die Edelmetalle muss jedoch zusätzlich auch deren Verfügbarkeit berücksichtigt werden. Iridium gilt als Standardkatalysator für die Sauerstoffentwicklung auf der Anode. Die Beladung der Anode mit Iridium ist mit 2 bis 6 mg/cm² etwa dreimal so hoch wie die Platinbeladung der Kathode mit 0,5 bis 2,0 mg/cm².²⁴ Gleichzeitig ist die Förderung von Iridium mit etwa 6 Tonnen pro Jahr etwa um den Faktor 30 niedriger als die von Platin mit etwa 183 Tonnen. Für die Installation der in der Bundesrepublik benötigten Elektrolyseleistung in Höhe von 28 GW, wie sie aus einem Energieszenario des IEK-3 hervorgeht²⁵, muss bei den aktuell verwendeten Iridiumbeladungen eine Gesamtmenge von 39 Tonnen eingesetzt werden²⁶. Dies würde somit etwa der 7-fachen Jahresförderung entsprechen. Es ist davon auszugehen, dass die Nachfrage nach Iridium in dieser Größenordnung zu Preisverschiebungen und Materialengpässen führt. Eine Reduktion der benötigten Menge an Iridium wirkt sich daher in zweierlei Hinsicht positiv auf den Einsatz der PEM-Elektrolyse in der Energiewende aus: Zum einen reduzieren sich die Kosten pro installierter Leistung und zum anderen wird die Abhängigkeit von limitierten Ressourcen entschärft, was die Planbarkeit der Einführung dieser Technik vereinfacht. Dies setzt jedoch voraus, dass durch den verringerten Einsatz an Iridium weder die Performance, noch die Langzeitstabilität der Systeme beeinträchtigt werden.

Im Rahmen der Dissertation „Langzeitstabile Elektroden mit reduziertem Iridiumgehalt für die PEM-Elektrolyse“ wurde zur Reduktion des Iridiumgehaltes in der PEM-Elektrolyse zwei Ansätze verfolgt²⁷. In dem hier vorliegenden Abschnitt wird nun im zweiten Ansatz die Katalysatorbeladung der Anode mit Benchmarkkatalysator reduziert. Im hier vorliegenden

²³ Ayers, K. E., Anderson, E. B., Capuano, C., Carter, B., Dalton, L., Hanlon, G., Manco, J. u. Niedzwiecki, M.: 218th ECS Meeting. ECS Transactions. ECS 2010, 3–15

²⁴ Carmo, M., Fritz, D. L., Mergel, J. u. Stolten, D.: A comprehensive review on PEM water electrolysis. International Journal of Hydrogen Energy 38 (2013) 12, 4901–4934.

²⁵ Stolten, D., Emonts, B., Grube, T., Weber, M.: Hydrogen as an Enabler for Renewable Energies, in: Transition to renewable energy systems, eds. Stolten, D., Scherer, V., Wiley-VCH, Weinheim, Germany (2013), 195-216

²⁶ Carmo, M.: PEM Water Electrolysis - New Approaches Towards Catalyst Separation, Recovery, and Recycling. submitted

²⁷ Rakousky, C., „Langzeitstabile Elektroden mit reduziertem Iridiumgehalt für die PEM-Elektrolyse“, Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment 322, ISBN 978-3-95806-147-7 (2016)

Abschnitt werden nun für Zellen mit reduzierter Anodenbeladung zunächst die Zelleistung und anschließend die Langzeitstabilität vorgestellt.

4.4.1 Zelleistungen unter reduzierter Anodenbeladung

Die Beladung wurde ausgehend von der Standardbeladung mit $2,25 \text{ mg/cm}^2 \text{ IrO}_2$ (AAe) auf $0,6$ und auf $0,3 \text{ mg/cm}^2 \text{ IrO}_2$ (AAe) reduziert. Die Polarisationskurven der drei Beladungen sind in Abb. 73 dargestellt.

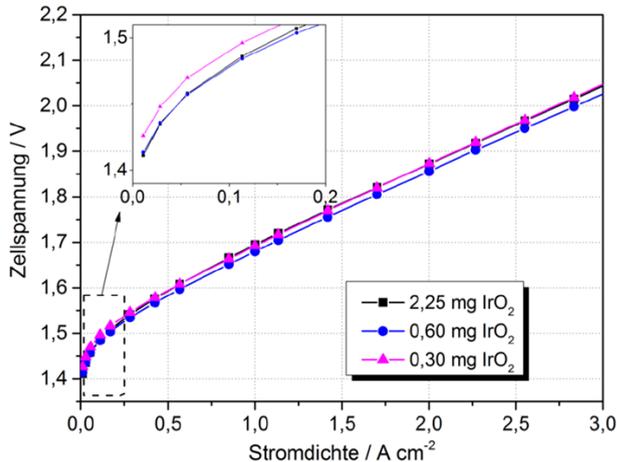


Abb. 73: Polarisationskurven von Zellen mit den Anodenbeladungen $2,25 - 0,6 - 0,3 \text{ mg/cm}^2 \text{ IrO}_2$ (AAe)

Ein Vergleich der Polarisationskurven der drei unterschiedlichen Beladungen in Abb. 73 zeigt, dass alle drei Beladungen nach der Einfahrdauer von 74 h eine vergleichbare Polarisationskurve aufweisen. Bei 2 A/cm^2 weisen die CCMs mit den Anodenbeladungen $2,25 \text{ mg/cm}^2$ und $0,3 \text{ mg/cm}^2$ jeweils eine Spannung von $1,872 \text{ V}$ auf und die CCM mit $0,6 \text{ mg/cm}^2$ Anodenbeladung eine Zellspannung von $1,856 \text{ V}$ auf. Die niedrigste Stromdichte $U_{j_{0,01}}$ steigt mit abnehmender Beladung um insgesamt 13 mV auf $1,426 \text{ V}$ an. Die Polarisationskurven zeigen, dass es möglich ist, die Anodenbeladung ohne Auswirkung auf die Zelleistung um 87% auf $0,3 \text{ mg/cm}^2$ zu reduzieren. Damit reduziert sich die Menge an Iridium für die Installation von 28 GW an PEM-Elektrolyseleistung von 39 auf $4,6$ Tonnen. Dies entspricht nur etwas mehr als dem Doppelten der Jahresförderung. Die Einsparung an Iridium ist damit bei gleichbleibender Leistung etwa doppelt so groß wie bei der Verwendung von neuem Katalysator. Dieser wurde mit einer Iridiumbeladung von $0,62 \text{ mg/cm}^2$ getestet, weist allerdings ab $0,67 \text{ A/cm}^2$ deutlich höhere Zellspannungen auf. Die Literatur zeigt ebenfalls, dass die Iridiumbeladung der Anode nur einen geringen Einfluss auf die Polarisationskurve der CCMs aufweist²⁸.

²⁸ Hui Xu: High-Performance, Long-Lifetime Catalysts for Proton Exchange Membrane Electrolysis, Annual Merit Review Proceedings, Newton, MA (2014)

4.4.2 Langzeitstabilität unter reduzierter Anodenbeladung

Der Verlauf der Zellspannung bei der Anodenbeladung von $0,3 \text{ mg/cm}^2$ ist in Abb. 74 dargestellt und wird ebenfalls in die beiden Bereiche (0) und (I) eingeteilt. In Bereich (I) steigt die Zellspannung mit einer Rate von $39 \mu\text{V/h}$ an. Das Potential der Anode steigt im gleichen Zeitraum mit $40 \mu\text{V/h}$ und das der Kathode um $1 \mu\text{V/h}$. Die Erhöhung der Zellspannung kann in diesem Bereich somit komplett der Anode zugeordnet werden. Die Zellspannung U_{j_2} aus der Polarisationskurve steigt in Bereich (I) um 34 mV an. Dieser Wert stimmt gut mit dem Anstieg der Zellspannung im Langzeittest in Höhe von 36 mV überein. U_{j_2} liegt jedoch im Durchschnitt 15 mV niedriger als die Zellspannung im Dauertest.

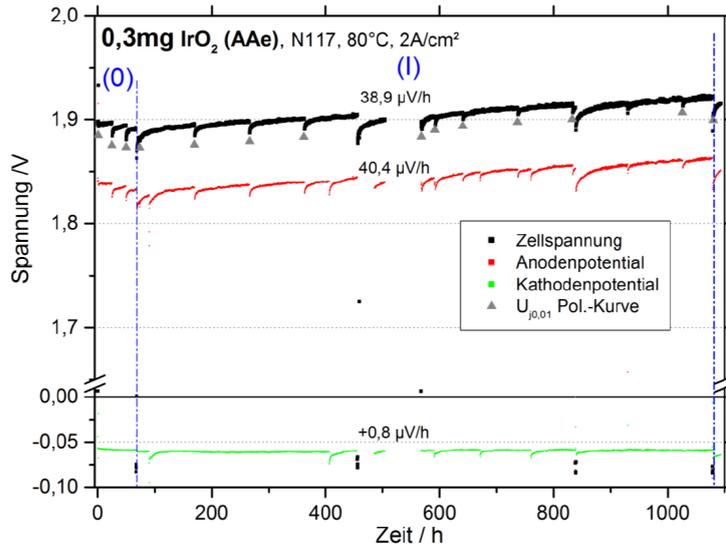


Abb. 74: Zellspannung und Einzelpotentiale im Zeitverlauf
Reduzierte Anodenbeladung mit $0,3 \text{ mg/cm}^2 \text{ IrO}_2 \text{ (AAe)}$

Eine Reduktion der Anodenbeladung von $2,25$ auf $0,3 \text{ mg/cm}^2$ hat keinen Einfluss auf die Zellspannung von $1,872 \text{ V}$ bei 2 A/cm^2 . Dies entspricht einer Iridiumreduktion um 87% . CCMs mit reduzierter Anodenbeladung zeigen jedoch erhöhte Alterungsraten. Während bei Standardbeladung ein Betrieb mit Alterungsraten 0 bis $6 \mu\text{V/h}$ gezeigt wurde, steigt die Alterung bei $0,6 \text{ mg/cm}^2$ auf $14 \mu\text{V/h}$ und bei $0,3 \text{ mg/cm}^2$ auf $39 \mu\text{V/h}$. Die Hauptalterungsursache stellt hierbei die abnehmende Austauschstromdichte dar. Diese umfasst kathodische und anodische Beiträge. Für die kathodischen wurde eine reduzierte Platinoberfläche ermittelt, die um 13 bis 22% abfällt. Änderungen des ohmschen Widerstandes spielen bei der Alterung dieser Zellen eine untergeordnete Rolle.

4.5 Festoxid-Brennstoffzellensystem mit integrierter Schutzgaserzeugung

Zu den Herausforderungen bei den SOFC-Systemen gehört die relativ hohe Betriebstemperatur von über 600 °C. Insbesondere die hohen Temperaturen in Verbindung mit der Verwendung von Nickel als Brennstoffkatalysator innerhalb der Brennstoffzelle und des Vorreformers stellen den Anlagenbetreiber während des Aufheizens, Abkühlens und in Notsituationen (z.B. Störungen in der Netzanbindung oder im System) vor besondere Herausforderungen. In diesen Fällen ist, abweichend zum Systembetrieb, keine reduzierende Brennstoffgasatmosphäre verfügbar. Daher besteht das Risiko einer oxidierenden Atmosphäre auf der Brenngasseite des Systems, z. B. durch Eintrag von Luftsauerstoff. In dem Fall reagiert der Nickelkatalysator bei Temperaturen über 300 °C mit Sauerstoff zu Nickeloxid:



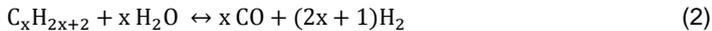
Diese Reoxidation verringert die Aktivität des Nickelkatalysators. Darüber hinaus erhöht die Sauerstoffaufnahme das Volumen der Nickelstruktur, was zu mechanischen Belastungen führt, die Risse im Elektrolyten verursachen und im schlimmsten Fall Ausfälle im Brennstoffzellensystem hervorrufen können. Daher erfordern die drei oben beschriebenen Betriebsfälle die Verwendung eines sogenannten Schutzgases, das im allgemeinen aus etwa 96 Vol% eines Inertgases (z.B. Argon oder Stickstoff) und 4 Vol% Wasserstoff besteht. Das Schutzgas fließt während aller drei Szenarien durch die Brenngasseite des Systems und verhindert somit die Entstehung einer sauerstoffhaltigen Atmosphäre.

Aufgrund der normalerweise nicht vorhandenen Inertgasinfrastruktur muss das Schutzgas in Druckgasflaschen bereitgehalten werden. Die erforderliche Schutzgasmenge und damit der erforderliche Lagerplatz sind signifikant. Typische Heizraten von SOFC-Systemen liegen im Bereich von 0,5-10 K/min. Geht man von einem Schutzgasstrom von 1 NI/min für jede Zelle aus, ergibt sich für ein 5 kW-Systems mit 36 Zellen für den Aufheizprozess allein eine Schutzgasmenge zwischen 2.430 und 48.600 NI. Aufgrund der hohen thermischen Masse eines SOFC-Systems kann die Abkühlzeit länger sein als die Aufheizzeit. Damit erhöht sich die erforderliche Schutzgasmenge nochmal deutlich. Neben dem großen Stauraum müssen die leeren Gasflaschen ausgetauscht oder nachgefüllt werden, bevor der nächste Heiz- oder Kühlprozess gestartet werden kann. Die großen logistischen Anforderungen und die kostenintensive Herstellung des Schutzgases stellen eine weitere Herausforderung dar.

Es wurde eine Lösung entwickelt und realisiert bei der das Schutzgas innerhalb des Systems generiert wird. Dieser Schutzgaserzeuger ermöglicht die On-Demand-Erzeugung einer reduzierenden Atmosphäre unter Nutzung der bestehenden Infrastruktur (d.h. Wasser, Erdgas und Elektrizität). Das Schutzgas wird bei Bedarf direkt im System erzeugt, mit dem Vorteil, dass keine Lagerhaltung erforderlich ist, wodurch die Gesamtsystemgröße reduziert wird. Darüber hinaus müssen leere Gasflaschen nicht ausgetauscht werden, was logistischen Aufwand und Betriebskosten des Systems reduziert.

Der Schutzgasgenerator besteht aus Verdampfer- und Dampfreformer (Abb. 75). Er verfügt über eine elektrische Heizung, einen Erdgas- und einen Wasseranschluss sowie einen Gasauslass. Um den Schutzgasgenerator zu betreiben, muss der Verdampfer auf mindestens 100 °C und der Reformer auf ca. 400 °C aufgeheizt werden. Dies geschieht durch zwei elektrische Heizelemente, die sich im Verdampfer und Reformer befinden. Sobald die Zieltemperaturen erreicht sind, wird Wasser in den Verdampfer gepumpt, wo es verdampft und dann zum Reformereinlass strömt. Gleichzeitig wird Erdgas dem Dampfstrom

am Reformereinlass zugemischt. Die Brennstoff-Dampf-Mischung wird dann im Reformier über eine endotherme Dampfreformierung (Gl. 2):



und die konkurrierend ablaufende Wasser-Gas-Shift-Reaktion (Gl. 3) chemisch umgesetzt:



Das entstehende Gasgemisch am Schutzgasgeneratorausgang, bestehend aus Methan, Dampf, Kohlendioxid, Kohlenmonoxid und Wasserstoff, bildet das synthetische Schutzgas. Je größer die Menge an Wasserstoff und Kohlenmonoxid ist, desto größer ist die reduzierende Wirkung des Gasstroms und damit der Reoxidationsschutz des Nickels im System. Hohe Reformertemperaturen (über 400 °C) und hohe Dampfkonzentrationen verschieben das chemische Gleichgewicht der Dampfreformierungsreaktion (Gl. 2) auf die Produktseite. Damit erhöht sich die Wasserstoffproduktion und damit der Schutz vor Reoxidation.

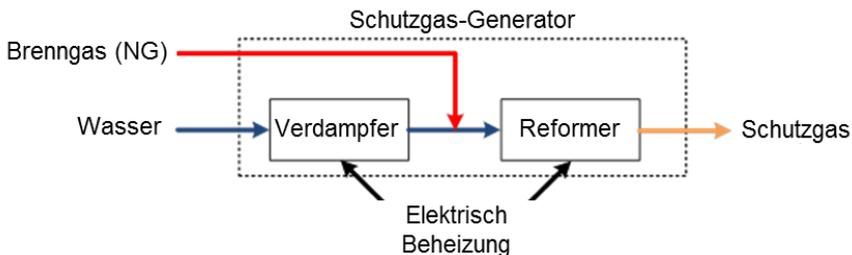


Abb. 75: Vereinfachtes Schema des entwickelten Schutzgasgenerators

Im Allgemeinen enthält ein SOFC-System einen Stack, einen Abgasbrenner, einen Vorreformer, einen Luftvorwärmer und einen Verdampfer. Als Brenngas würde üblicherweise Erdgas (NG) verwendet, da seine Verfügbarkeit hoch ist. Eine Herausforderung stellen die höheren Kohlenwasserstoffe im Brennstoff dar, weil sie sich bei Temperaturen über 150 °C zersetzen und die Kohlenstoffbildung im System fördern. Dies blockiert die Gasleitungen, erhöht den Druckverlust und kann zu Undichtigkeiten führen. Daher wird der Erdgasstrom am Vorreformereinlass (Position 3 in Abb. 76) mit Dampf vermischt. Dieser Dampf unterdrückt die Kohlenstoffbildung, wenn das Mischungsverhältnis S/C größer als 1,6 ist:

$$\frac{S}{C} = \frac{\dot{n}_{H_2O}}{\dot{n}_{NG}} \quad (4)$$

S/C wird als Dampf-zu-Kohlenstoffverhältnis (Steam to Carbon) bezeichnet, wobei \dot{n} den Molenstrom jeder Komponente beschreibt.

An der Position 4 in Abb. 76 fließt das wasserstoffreiche Brenngasgemisch in den Stack. Der Stack wandelt Wasserstoff und Kohlenmonoxid in Dampf und Kohlendioxid um und erzeugt dadurch elektrische Energie. Da der Stack nur bis zu 85% des ankommenden Brenngases nutzt, wird der verbleibende Brennstoff anschließend im Abgasbrenner verbrannt (Position 5 in Abb. 76). Die erzeugte Wärme (an Position 6 in Abb. 76) kann dann verwendet werden, um den zugeführten Luftstrom im Luftvorwärmer aufzuheizen, um den Verdampfungsprozess und die endotherme Dampfreformierungsreaktion im Vorreformer zu unterstützen.

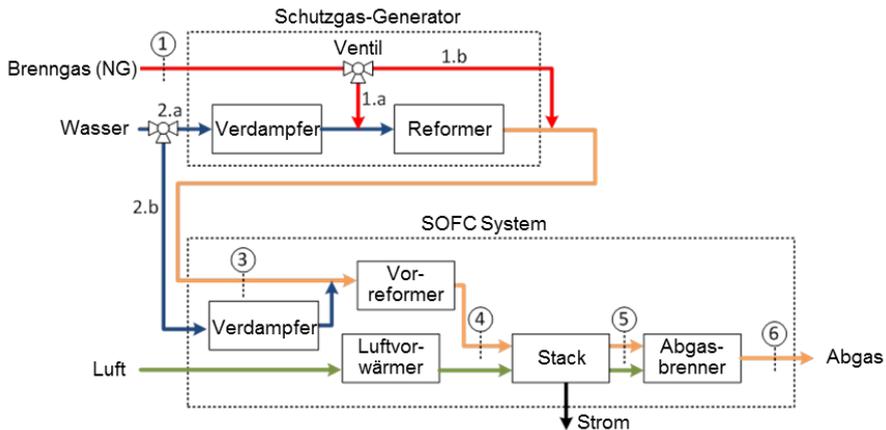


Abb. 76: Schema eines SOFC-Systems in Verbindung mit einem Schutzgasgenerator.

Um ein typisches SOFC-System mit dem Schutzgasgenerator zu verbinden, muss eine zusätzliche Einspeisestelle zwischen der Kraftstoffzufuhr und dem Schutzgasgenerator installiert werden. Die Aufheizstrategie beginnt mit der Erwärmung des SOFC-Systems durch Aufheizen von Vorreformer und Stack auf 300 °C. Dies kann entweder über einen Startbrenner oder mit elektrischen Heizelementen erfolgen. Während dieser Aufheizsequenz findet keine Durchströmung der Brenngasseite des SOFC-Systems statt. Parallel dazu wird auch der Schutzgasgenerator aufgeheizt (der Verdampferteil auf über 100 °C und der Reformerteil des Schutzgasgenerators auf über 400 °C). Keinesfalls darf mit der Schutzgaserzeugung unterhalb einer Stack- oder Vorreformertemperatur von 180 °C begonnen werden. Eine Einleitung des Schutzgases unterhalb dieser Temperatur würde eine Reaktion zwischen Nickelkatalysator und Kohlenmonoxid, führen. Es würde sich Nickel-tetracarbonyl bilden:



Bei Temperaturen über 180 °C liegt das chemische Gleichgewicht dieser Reaktion (Gl. 5) auf der Eduktseite, was die Bildung von Nickel-tetracarbonyl verhindert. Um Wasser und Erdgas und damit Kosten zu sparen, wird die Schutzgasproduktion erst eingeschaltet, wenn eine Stacktemperatur von 300 °C erreicht ist, da erst bei Temperaturen über 300 °C das Reoxidationspotential von Nickel in Stack und Vorreformer erreicht wird. Kurz vor Beginn der Schutzgaserzeugung wird die Kraftstoffseite des SOFC-Systems mit Dampf aus dem Schutzgasgenerator gespült und damit inertisiert (Position 2.a in Abb. 76). Für das nachfolgend beschriebene Schutzgaserzeugungsverfahren wird Erdgas über Anschluss 1.a und Wasser über Anschluss 2.a in den Schutzgasgenerator eingeleitet. Das erzeugte Schutzgas fließt dann durch die gesamte Brenngasseite des SOFC-Systems. Im Anschluss wird das SOFC-System auf eine Betriebstemperatur von 700 °C gebracht. Sobald die Betriebstemperatur erreicht ist, wird der Schutzgasgenerator ausgeschaltet und das Erdgas fließt direkt über den Anschluss 1.b in das System. Gleichzeitig wird Wasser (Position 2.b in Abb. 76) zum Verdampfer geleitet, um Kohlenstoffbildung im Vorreformer zu vermeiden. Danach kann die Stromproduktion im Stack beginnen.

Die Funktionalität des entwickelten Schutzgasgenerators wurde mit einem Experiment untersucht. Zu diesem Zweck wurde ein Schutzgasgenerator für ein 5 kW-System, basierend auf einem Stack mit 36 Zellen, hergestellt. Seine Reformerkomponente wurde für den Betrieb bei einem Temperaturbereich zwischen 400 und 700 °C ausgelegt. Die Abmessungen des entwickelten Schutzgasgenerators sind 0,15 x 0,2 x 0,4 m.

Die CAD-Geometrie des Schutzgasgenerators ist in Abb. 77 dargestellt. Der verwendete Verdampfer ist als Doppelrohr-Wärmetauscher ausgeführt. Das Innenrohr enthält eine Heizpatrone mit einer elektrischen Leistung von 400 W. Die Außen- und Innenrohre bilden einen Spalt von 1 mm, durch den das Wasser strömt und durch den Wärmeeintrag der Heizpatrone verdampft wird. Der Reformer besteht aus einem von Johnson Matthey gelieferten Katalysatorbett. Der Katalysator besteht aus Elementen der Platingruppe, die auf einem Metalloxid-Trägermaterial abgeschieden werden. Eine weitere Heizpatrone mit einer elektrischen Leistung von 400 W befindet sich im Reformer, wo er die Energie für die endotherme Dampfreformierungsreaktion bereitstellt.

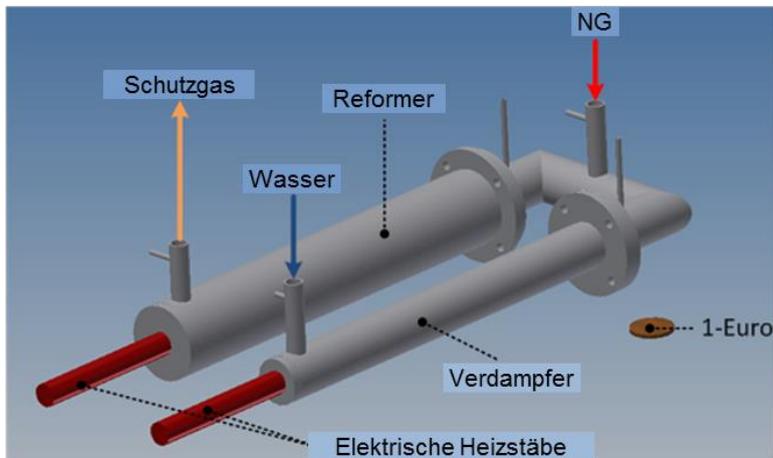


Abb. 77: CAD-Bild des Schutzgasgenerator-Prototyps

Abb. 78 a veranschaulicht einen beispielhaften Zyklus des Heiz- und Kühlprozesses eines 4-Zellen-Stacks in Kombination mit dem Schutzgasgenerator. Während des Übergangs von Phase 1 zu 2 erhöht sich die Zellspannung aufgrund des einströmenden synthetischen Schutzgases sehr schnell. Eine zusätzliche Erwärmung des Stackes erhöht die Stackspannung weiter, bis sie das Nernstpotential erreicht. An dieser Stelle ist in Abb. 78 a eine schwankende Spannung zu sehen. Diese entsteht durch den fluktuierenden Wasserverdampfungsprozess des Schutzgasgenerators. Die Phase 3 wurde durch Umschalten von Schutzgas auf Wasserstoffversorgung eingeleitet. Innerhalb dieser Phase wurde eine Kennlinie gemessen, um die Stackeigenschaften zu charakterisieren. Phase 4 umfasst die Abkühlung des Stackes auf 300 °C mit Schutzgas. Beim Übergang von Phase 4 zu 5 wird die Schutzgasversorgung abgeschaltet, was zu einem plötzlichen Stackspannungsabfall führt.

Abb. 78 b zeigt die einzelnen Zellenspannungen und die Stacktemperatur bei einer Stromdichte von 500 mA/cm² bei jedem der 11 durchgeführten Zyklen. Die Zyklen 1 bis 3 wurden als Referenzzyklen durchgeführt, bei denen der herkömmliche Aufheizvorgang verwendet wurde. Dazu gehört die Versorgung mit konventionellem Schutzgas (96 Vol% Argon und

4 Vol% Wasserstoff) während des Aufheizvorgangs von Raumtemperatur auf Betriebstemperatur und während der Abkühlphase. Diese drei Referenzzyklen zeigen, dass ein thermischer Zyklus (Aufheizen und Abkühlen) die Zellspannungen nicht nachteilig beeinflusst.

Bei den Zyklen 4 und 5 wurde der Stack ohne jegliche Schutzgasversorgung auf 300 °C erwärmt. Oberhalb dieser Temperatur wurde das konventionelle Schutzgas eingeschaltet und das gleiche wurde während der Abkühlphase durchgeführt. Diese beiden Zyklen zeigen, dass das Zuschalten von Schutzgas erst bei 300 °C keinen negativen Einfluss auf die Zelleistung hat und daher nicht zu einer Nickel-Reoxidation führt. Die Zellenspannungen wurden durch diese Veränderung nicht beeinträchtigt.

Bei den Zyklen 6 bis 11 wurde in den Heiz- und Kühlphasen der Schutzgasgenerator eingesetzt. Wie Abb. 78 b zeigt, verschlechtern sich die Zellenspannungen während der sechs Zyklen nicht, was zeigt, dass der entwickelte Schutzgasgenerator die herkömmliche Schutzgasversorgung ersetzen kann.

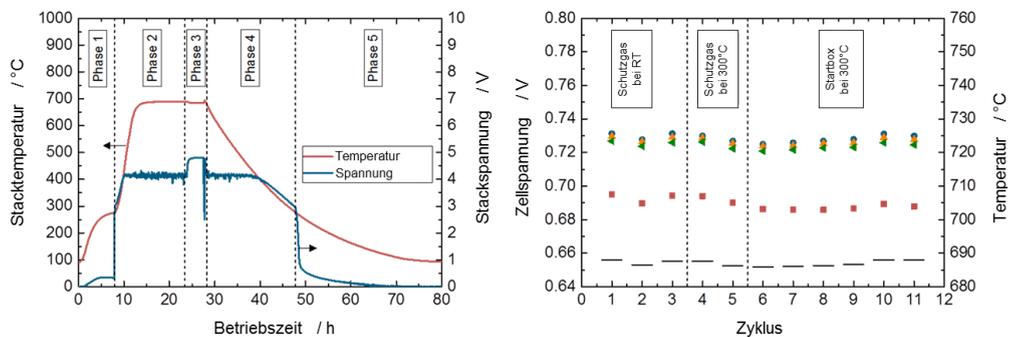


Abb. 78: Beispiel für einen Testzyklus: a) Stacktemperatur und die Stackspannung als Funktion der Testzeit (links); b) Zellenspannungen und Stacktemperatur bei 500 mA/cm² und 4,5 NI/min Wasserstoff als Funktion der Zyklen (rechts); SG: Schutzgas, SGG: Schutzgasgenerator

4.6 PRECORS: Ein „Spin-off“ für korrosionsbeständige Beschichtungen

Das Kernprodukt des Gründungsvorhabens Precors umfasst ein kohlenstoffbasiertes Material, das aus einer Schichtstruktur mit funktionellen Gruppen besteht. Hierbei handelt es sich um eine Anordnung von übereinander gestapelten Schichten, die ein kompaktes und stabiles Schichtgefüge ausbilden. Der Einsatz des Materials fokussiert sich in erster Linie auf die Anwendungen in Brennstoffzellen. Die hergestellten Kohlenstoffschichten haben eine hohe elektrische Leitfähigkeit sowie chemische Stabilität gegenüber aggressiven Medien. Diese Eigenschaften werden bei der Anwendung als Korrosionsschutz ausgenutzt. Hierbei handelt es sich um das Überziehen von metallischen Komponenten, um diese vor Korrosionsschäden zu schützen und gleichzeitig die elektrische Leitfähigkeit beizubehalten. Für diese Anwendung kommen metallische Werkstoffe in Betracht, die sich in Kontakt mit einer korrosiven Umgebung befinden, wie beispielsweise sauren oder salzhaltigen Lösungen.

Diese neuartige Beschichtung wurde im Rahmen der Promotion von Vitali Weißbecker am Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-3) in der Abteilung von Herrn Prof. Lehnert mit dem Ziel entwickelt, metallische Bipolarplatten von Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen vor Degradationserscheinungen zu schützen und gleichzeitig die Langlebigkeit sowie Leistungsdichte zu erhöhen. Für die Weiterentwicklung und Kommerzialisierung der Technologie wurde im März 2017 das Start-up Precors gegründet. Finanziell unterstützt wurde die Ausgründung initial durch den Geschäftsbereich T (TT-Fond-Finanzierungen für Vitali Weißbecker für 6 Monate in 2015 und für zwei wiss. Mitarbeiter für je 6 Monate in 2016/17) sowie anschließend durch die eingeworbene Förderung im Rahmen des BMWi-Programms EXIST (1,2 Mio. €). Zudem wurde die wissenschaftsbasierte Ausgründung bereits durch verschiedene externe Gutachter ausgezeichnet, unter anderem wurde Precors mit dem F-Cell-Award 2016 prämiert und belegte den ersten Platz beim Businessplan-Wettbewerb AC² im Jahr 2015.

Die Bipolarplatte, beispielhaft gezeigt in Abb. 79, ist eine wichtige Komponente der Wiederholeinheit eines Brennstoffzellenstapels. Ihre Hauptfunktionen bestehen darin die elektrische Kontaktierung benachbarter Zellen herzustellen, den An- und Abtransport bzw. die gleichmäßige Verteilung der beteiligten Gase sowie die Abführung des gebildeten Wassers sicherzustellen.

Gegenüber graphitbasierten Kompositmaterialien²⁹, die derzeit als Bipolarplatten Verwendung finden, haben metallische Bipolarplatten folgende Vorteile:

- Verbesserung der Leistung durch höhere elektrische und thermische Leitfähigkeit
- Erschütterungs- und Vibrationsstabilität durch hohe Flexibilität
- Höhere Langlebigkeit, da kein Elektrolytverlust durch Aufnahme in Materialgefüge
- Kostengünstige Serienfertigung durch Stanzen oder Hydro-Forming³⁰ und
- Gewichts- und Volumensparnis durch Reduzierung der Bipolarplattendicke

²⁹ Stand der Technik: Graphitgefüge mit Polymerbeimischungen für erhöhte mechanische Stabilisierung

³⁰ Innen-Hochdruckumformung: Umformen von metallischen Werkstoffen mittels Wasserstrahl

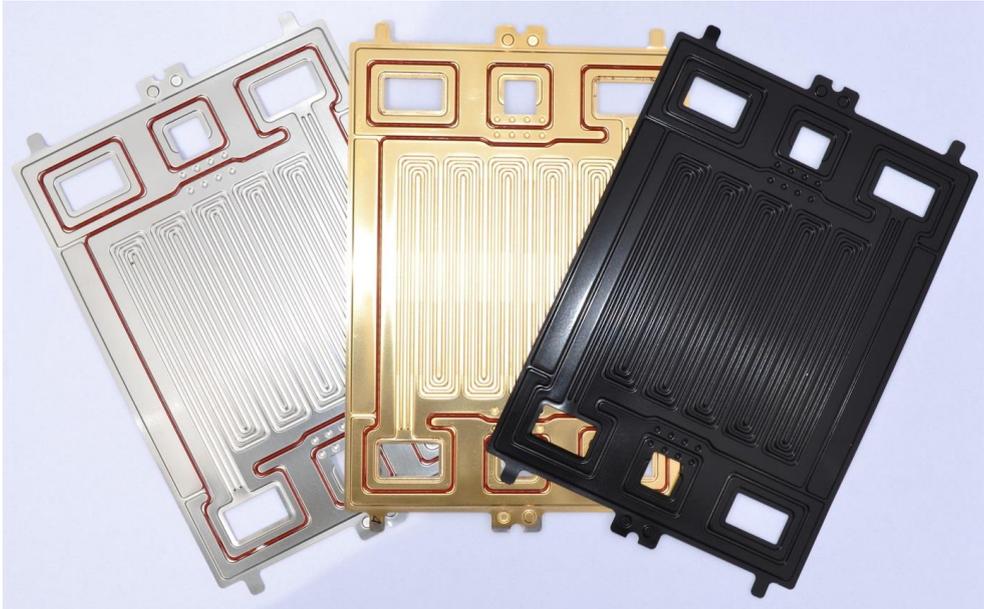


Abb. 79: Beschichtete metallische Bipolarplatten (Basismaterial 1.4301) mit unterschiedlichen Schichtdicken. Unbeschichtete Platten hergestellt im Projekt MIFULAS

In Tab. 7 wird beispielhaft ein typischer Chrom-Nickel-Edelstahl (Werkstoff 1.4301) mit einem Graphitkomposit-Material verglichen. Graphitbasierte Bipolarplatten haben trotz geringer Materialdichte je nach Hersteller und Herstellungsverfahren³¹ eine fertigungstechnisch bedingte Bauteildicke von 1,5 – 3 mm. Metallische Bipolarplatten hingegen können als dünne Folien mit einer Dicke von nur 0,1 mm kosteneffizient gefertigt werden. Dieser Aspekt bringt letztendlich den entscheidenden Vorteil der Gewichtsreduzierung von über 70%³².

Material	Dichte [g/cm ³]	Plattendicke [mm]	Spezifische Plattenmasse [g/cm ²]	Leistungsgewicht bei 0,5 W/cm ² [kg/kW]
Graphitkomposit	~1,9	1,5	0,29	1,14
Edelstahl 1.4301	7,9	0,1	0,08	0,32

Tab. 7: Vergleich des Leistungsgewichts verschiedener Materialien für Bipolarplatten

Gleichzeitig erreicht man bei der Verwendung von metallischen Bipolarplatten eine Verringerung des Bauraums eines Brennstoffzellenstapels um 60%. Hierbei bestimmt die Kanaltiefe (0,6 mm) für die Reaktionsmedien die Bipolarplattendicke.

³¹ Spritzguss- oder Fräsverfahren

³² Die Berechnung orientiert sich an der minimalen Materialstärke von 1,5 mm von Graphitkomposit-Materialien und einer durchschnittlichen Zelleistung von 0,5 W/cm².

Derartige Verbesserungen von Brennstoffzellenstacks machen die Brennstoffzellentechnologie attraktiver für den Markt, vor allem für die Automotive-Anwendung, wo Gewicht und Bauraum entscheidende Faktoren sind. Um metallische Bipolarplatten verwenden zu können, benötigt man neben einer langzeitstabilen Beschichtung auch ein kostengünstiges und serientaugliches Beschichtungsverfahren. Die entwickelte Beschichtung, die mittels Sprühverfahren aufgetragen wird, erfüllt alle Anforderungen im Vergleich zu literaturbekannten Gasphasenabscheidungsprozessen, die zum einen deutlich höhere Kosten und zum anderen eine schlechte Skalierbarkeit aufweisen.

Durch die Gewichts- und Volumeneinsparnis weisen metallische Bipolarplatten deutlich höhere spezifische Leistung auf (gravimetrisch und volumetrisch). Zusätzlich sind die Produktionskosten (Hydroforming, Stanzen) von metallischen Bipolarplatten geringer als bei graphitischen Platten, die im kapitalintensiven Spitzguss- oder im Heißpressverfahren hergestellt werden.

Bei den momentan konkurrierenden Beschichtungstechnologien für metallische Bipolarplatten erfolgt die Beschichtung mittels physikalischer Gasphasenabscheidung (englisch: Physical Vapor Deposition, PVD) bei hohen Temperaturen über 300 °C im Ultrahochvakuum. Dabei handelt es sich um dünne Schichten auf Basis von Gold, dotiertem Diamant oder Chrom- bzw. Titanitriden. Beschichtungstechnologien basierend auf einer Gasphasenabscheidung erfordern hohe Investitions- und Materialkosten. Durch die nicht gegebene Integrierbarkeit in eine bestehende Fertigungslinie und die hohen Durchlaufzeiten ist die Skalierbarkeit der Technologie begrenzt.

Die von Precors entwickelte Beschichtungstechnologie stellt eine qualitativ hochwertige, skalierbare und wirtschaftlich sinnvolle Substitutionstechnologie für die Beschichtung von metallischen Bipolarplatten dar. Die beschichteten metallischen Bipolarplatten erreichen somit eine optimale elektrische Leitfähigkeit sowie einen niedrigen Kontaktwiderstand. Das Leistungsniveau ist hierbei vergleichbar mit mittels PVD-Technik vergoldeten metallischen Bipolarplatten, die momentan die höchste elektrische Leitfähigkeit bieten. Langzeittests (aktuell > 4000 Betriebsstunden) haben eine hohe Korrosionsbeständigkeit und somit eine hohe Langzeitstabilität nachgewiesen, siehe Abb. 80 unten. Der Vergleich von typischen Strom-Spannungs-Kennlinien zeigt zum einen eine sehr geringe Alterungsrate von < 5 μV pro Stunde (zurückzuführen u.a. auf Membran-Elektroden-Einheit), und zum anderen ein Betriebsverhalten wie mit vergoldeten Bipolarplatten im PVD-Verfahren. Unbeschichtete Bipolarplatten weisen hingegen eine signifikante Verringerung der Zelleistung auf. Im Vergleich zu anderen Beschichtungen zeigt die Precors-Beschichtung zudem ein hydrophiles Benetzungsverhalten auf, wodurch ein verbesserter Wasseraustrag aus der Brennstoffzelle ermöglicht wird. Dies wirkt sich ebenfalls vorteilhaft auf die Zelleistung aus.

Zusätzlich zu dem beschriebenen Qualitätsgewinn liefert die vorgestellte Beschichtungstechnologie ein enormes Kosteneinsparpotential. Dies resultiert aus der Verwendung von günstigem und umweltfreundlichem Produktionsmaterial sowie aus niedrigen Investitionskosten. Durch diese Kosteneinsparpotentiale ist insgesamt eine Kostenersparnis von ca. 50 % gegenüber PVD beschichteten Bipolarplatten möglich.

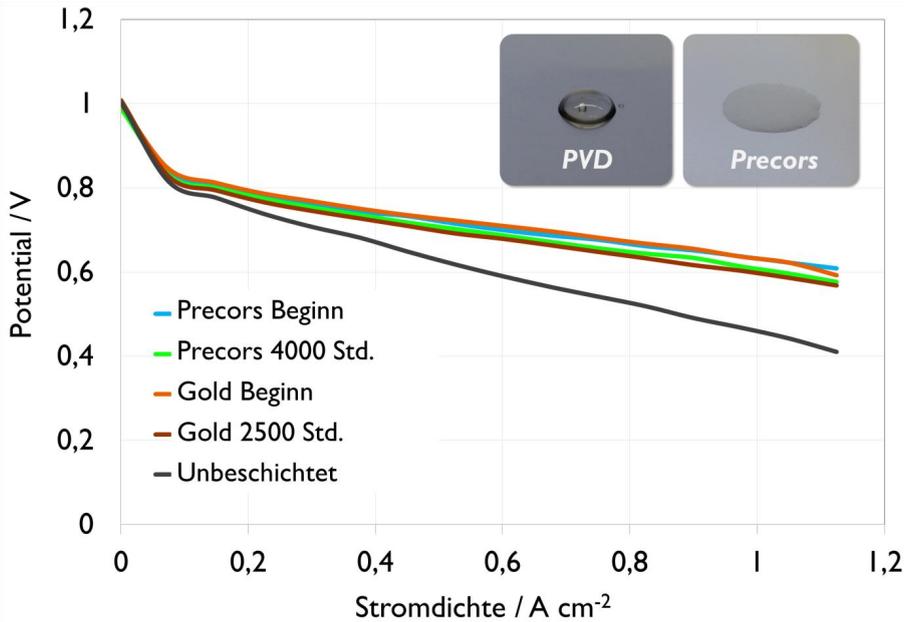


Abb. 80: Charakteristische Strom-Spannungskennlinien von Brennstoffzellen mit Precors-Bipolarplatten und vergoldeten Bipolarplatten (Stand der Technik) zu Beginn (engl. Begin of Life, BOL) und nach über 4000 Stunden bzw. 2500 Stunden

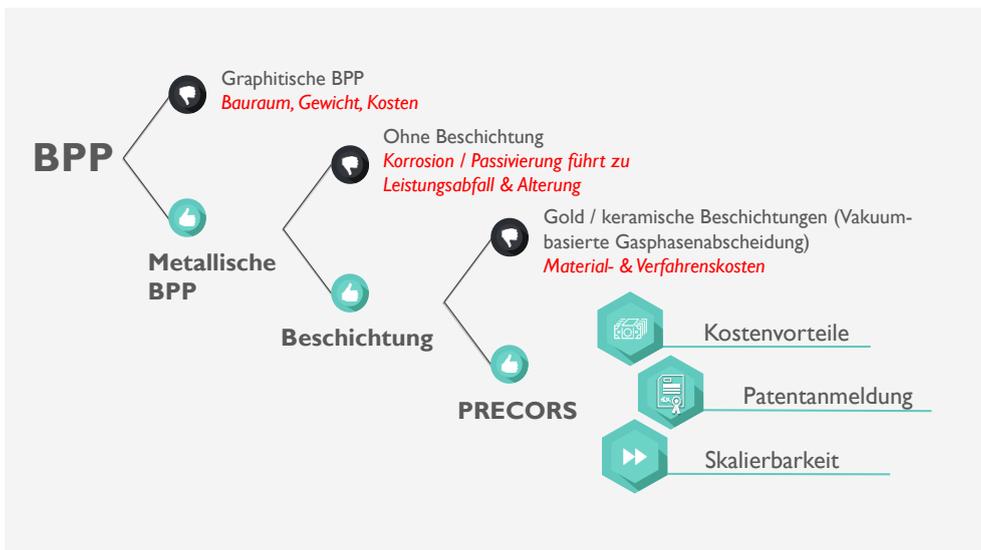


Abb. 81: Vergleich von graphitischem und metallischem Bipolarplattendesign sowie die Vorteile der am IEK-3 entwickelten kohlenstoffbasierten Beschichtungs-technologien im Vergleich zum Stand der Technik.

Das ausgearbeitete serientaugliche Beschichtungskonzept umfasst einen skalierbaren Sprühprozess. Im Gegensatz zu den aktuell verfügbaren Beschichtungstechnologien, die auf einem PVD-Beschichtungskonzept basieren, ist die vom Projektteam entwickelte Technologie somit in bestehende Produktionsstraßen von Bipolarplatten integrierbar. Abb. 81 illustriert zusammenfassend den Kundennutzen und das Alleinstellungsmerkmal des Gründungsvorhabens.

Das Gründerteam hat ein erweitertes branchenspezifisches Netzwerk aufgebaut. Hierfür zählen vor allem Kontakte zu Experten, Branchenkennern, Industrie-/Kooperationspartnern. Die Beschichtungstechnologie wurde von Automobilherstellern, Brennstoffzellenproduzenten sowie Bipolarplattenherstellern in internen Tests und Feldversuchen erfolgreich getestet und validiert. Der weitere Ausbau des Netzwerkes durch regelmäßige Besuche von Fachmessen sowie die gezielte Kontaktaufnahme zu weiteren potentiellen Kunden ist ein wichtiger Bestandteil der derzeitigen Aktivitäten im Rahmen des EXIST-Forschungstransfers. Das Team vereinbart zudem regelmäßig Coaching-Termine mit einem Business Angel, der durch seine Expertise und erweiterte Automotive-Kenntnisse eine wichtige Unterstützung in verschiedenen Fragestellungen und Feedbackrunden bietet. Zusätzlich steht man mit Technologieförderzentren (Technologietransfer FZJ, AGIT Aachen, RWTH Aachen) sowie anderen Start-ups in engem Kontakt.





5

Ausblick

Ausblick auf neue FuE-Vorhaben

- Festoxidzellen für reversiblen Anlagenbetrieb
- Multiskalenmodellierung von Brennstoffzellen
- Photolyse – Photoeletrische Wasserstoffherstellung
- Versorgungssysteme für alternative Kraftstoffe
- Neue Themen aus der Energiesystemanalyse und -integration

5.1 Festoxidzellen für reversiblen Anlagenbetrieb

Eine neue Möglichkeit zur zeitlichen Entkopplung von Stromproduktion und Verbrauch ist die reversible Festoxidzellenanlage (kurz rSOC-Anlage). Diese verwendet überschüssigen Strom aus regenerativen Energiequellen, um Elektrolyse zu betreiben. Der dabei erzeugte Wasserstoff wird zwischengespeichert und in Zeiten von Strombedarf, bei denen die regenerative Energiequelle nicht zur Verfügung steht, mit Festoxidbrennstoffzellen effizient rückverstromt. Es konnte bereits gezeigt werden, dass mit demselben elektrochemischen Festoxidzellenstapel sowohl der Elektrolyse- als auch der Brennstoffzellenbetrieb durchgeführt werden kann, wodurch sich die Anlagenkosten deutlich reduzieren. Außerdem zeigen Festoxidzellen geringe Aktivierungsüberspannungen, was eine hohe Effizienz bei der Strom- bzw. Gasproduktion ermöglicht. Jülich's rSOC-Anlage wird atmosphärisch betrieben und verwendet die umweltfreundlichen Gase: Wasserstoff, Wasserdampf und Luft. Der prinzipielle Aufbau einer rSOC-Anlage ist in Abb. 82 dargestellt.

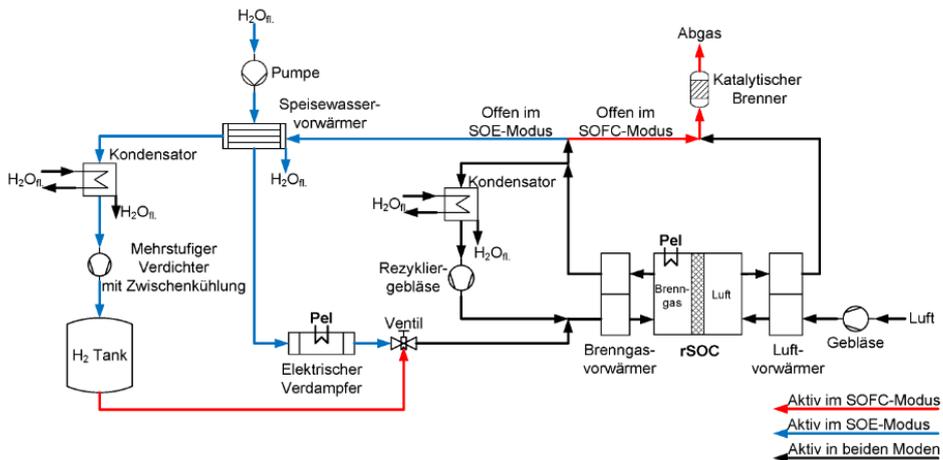


Abb. 82: rSOC Anlagenkonzept. Der Brennstoffzellenbetrieb (SOFC-Betrieb) ist mit einer roten Linie dargestellt und die Elektrolyse (SOE-Betrieb) ist mit einer blauen Linie dargestellt. Die schwarzen Leitungen sind in beiden Betriebsmoden aktiv

Beim Elektrolysebetrieb (SOE-Betrieb) wird das Speisewasser zunächst vorgewärmt und anschließend über den elektrischen Verdampfer vollständig verdampft. Hierbei muss beachtet werden, dass oxidierende Bedingungen (wie z.B. reiner Wasserdampf) am Eintritt der Brenngasseite die Nickelelektrode degradieren. Daher wird dem Wasserdampf 10 vol.-% Wasserstoff zugemischt, bevor dieser den Stack betritt. Der Wasserstoff kann dafür entweder aus dem H_2 -Tank entnommen oder über die Abgasrezyklierung zugeführt werden. Das aus dem Stack austretende Produktgas enthält neben dem produzierten Wasserstoff auch nicht umgesetzten Wasserdampf. Dieser wird über eine flüssig/gas-Phasentrennung im Kondensator vor dem Verdichter abgetrennt. Die anschließende mehrstufige Verdichtung mit Zwischenkühlung verdichtet den Wasserstoff auf einen Speicherdruck von 70 bar. Um den produzierten Sauerstoff aus der Anlage abzuführen, wird auf der Luftseite ein minimaler Luftstrom gefördert.

Im Brennstoffzellenbetrieb (SOFC-Betrieb) wird der im Tank gespeicherte Wasserstoff dem Stack zugeführt. Um die Stacktemperatur zu regulieren, muss auf der Luftseite über einen erhöhten Luftstrom gekühlt werden. Damit im Festoxidzellenstapel keine kritischen thermomechanischen Spannungen entstehen, müssen die in den Stack eintretenden Gase vorgewärmt werden. Um auftretende Abwärmeverluste möglichst gering zu halten und eine kompakte Bauform zu realisieren, sind die Hochtemperaturkomponenten Stack, Heizplatten, Luft- und Brenngasvorwärmer in einer integrierten Modulbauweise ausgeführt. Die Gasaustrittstemperaturen aus dem integrierten Modul liegen unterhalb von 300 °C. Das Abgas enthält nicht umgesetzten Wasserstoff, der aus Sicherheitsgründen im katalytischen Nachbrenner oxidiert wird. Um die thermomechanischen Spannungen auch während eines Umschaltvorgangs so gering wie möglich zu halten, wird die mittlere Stacktemperatur in beiden Betriebsmoden konstant gehalten. Im Elektrolysebetrieb wird der Stack unterhalb der thermoneutralen Spannung betrieben, wobei der Stack über die Heizplatten auf der vorgegebenen Temperatur gehalten wird. Im Brennstoffzellenbetrieb wird die Temperatur über die Regelung der Luftmenge angepasst.

Die Eckdaten der rSOC-Anlage sind in Tab. 8 aufgeführt. Die rSOC-Anlage besitzt im Auslegungspunkt des Brennstoffzellenmodus eine Leistung von 5 kW. Im Elektrolysemodus erzeugt die Anlage eine Wasserstoffmenge von ca. 3,3 Nm³/h.

	SOE	SOFC	Einheit
T_{Stack}	750	750	°C
p_{Stack}	1	1	bar
j_{max}	0,6	0,5	A/cm ²
$H_{2\text{min}}$	10	-	vol.%
P_{Tank}	100	-	bar
$H_{\text{Luftgebläse}}$	30	30	%
$\eta_{\text{Rezirkulationsgebläse}}$	20	20	%
η_{Inverter}	94	94	%
Parasitärer Verbrauch	50	50	W
$T_{\text{Kond Rezirkulation}}$	75	35	°C
$T_{\text{aus Kondensator}}$	40	40	°C

Tab. 8: Eckdaten der rSOC-Anlage

Um eine hohe Effizienz im Brennstoffzellenbetrieb zu erzielen, muss der aus dem Tank entnommene Wasserstoff maximal genutzt werden. Daher wurde eine brenngasseitige Rezyklierung eingebunden. Diese führt das Brenngas vom Stackaustritt zurück an den Stackeintritt (Abb. 82). Da hohe Wasserdampfanteile die Zellspannungen im SOFC-Betrieb herabsetzen, wird innerhalb der Rezyklierschleife, in einem Kondensator, der Wasserdampfanteil im Gasstrom reduziert. Die Abkühlung des Gasstroms erfolgt auf 35°C dadurch kon-

densiert der vorhandene Wasserdampf weitestgehend aus. Mit diesem Rezyklierkonzept kann die Systembrenngasnutzung bei konstanter Stackbrenngasnutzung nahezu beliebig erhöht werden. Dadurch kann ein Betriebspunkt gefahren werden, der im Brennstoffzellenbetrieb eine hohe Systembrenngasnutzung > 95% und gleichzeitig eine unschädliche Stackbrenngasnutzung ermöglicht. Im Elektrolysebetrieb kann die Rezyklierung den für den Schutz der Brenngaselektrode notwendigen Wasserstoffanteil bereitstellen.

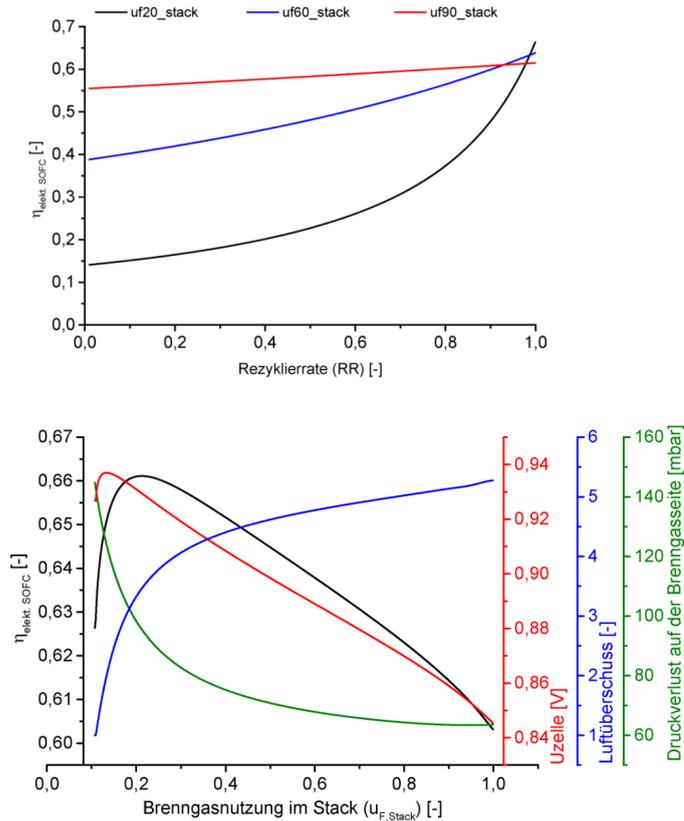


Abb. 83: rSOC Anlagenkonzept: a) Elektrischer Anlagenwirkungsgrad als Funktion der Rezykulationsrate für unterschiedliche Stackbrenngasnutzung (oben); b) Elektrischer Anlagenwirkungsgrad, Druckverlust der Brenngasrezirkulationsschleife, Zellspannung und Luftüberschuss als Funktion der Stackbrenngasnutzung für eine Rezykulationsrate von 99% (unten)

In Abb. 83 a sind die SOFC-Wirkungsgrade für Stackbrenngasnutzungen zwischen 20% und 90% dargestellt. Wird der nicht umgesetzte Wasserstoff über die Rezyklierung zurückgeführt, steigt die Systembrenngasnutzung bei konstanter Stackbrenngasnutzung mit steigender Rezyklierate an. Dementsprechend weniger Wasserstoff muss aus dem Tank entnommen werden. Bei Rezyklieraten, die größer als 90% sind, überschneiden sich die Kennlinien. Niedrige Stackbrenngasnutzungen verursachen hier einen hohen Anteil an Wasserstoff auf der Brenngasseite. Neben einer höheren Zellspannung wirkt die höhere Brenngasmenge als zusätzliche Kühlung. Dadurch kann die Luftmenge, welche die Kühlung des Stacks über-

nimmt, im Brennstoffzellenbetrieb herabgesetzt werden. Hierdurch wird die luftseitige Verdichterleistung reduziert und der Wirkungsgrad weiter verbessert. In Abb. 83 b sind die Ergebnisse für eine Rezyklierrate von 99% aufgeführt. Damit kann eine Systembrenngasnutzung von nahe 100% bei beliebiger Stackbrenngasnutzung erreicht werden. Das Wirkungsgradmaximum von etwa 66,2% liegt bei einer Stackbrenngasnutzung von ca. 20%. Bedingt durch die hohe Rezykliermenge auf der Brenngasseite steigt mit kleiner werdender Brenngasnutzung der Druckverlust an. Ebenso steigt die Zellspannung an, da der H₂-Anteil im Stack vergrößert wird. Bei Stackbrenngasnutzungen < 20% fällt die Zellspannung aufgrund der stark reduzierten Luftmenge in diesem Bereich ab. Die Luftmenge wird wegen des Kühleffekts auf der Brenngasseite reduziert. Sofern eine permanente vollständige Abgasrückführung im Brennstoffzellenbetrieb angestrebt wird, kann der Nachbrenner entfallen.

Beim Elektrolysebetrieb kann die Dampfnutzung im Stack analog zur Brennstoffnutzung im Brennstoffzellenbetrieb nicht vollständig erfolgen. Die Energiemenge, die für den nicht umgesetzten Wasserdampf investiert wurde, verlässt das System in Form von Abwärme am Kondensator, der sich innerhalb der Rezyklierschleife befindet. Dort ist eine Abkühlung des Gasstroms auf 75 °C vorgesehen, um die thermische Anforderung an das Gebläse herabzusetzen. Der Einfluss einer Rezyklierung mit und ohne Abkühlung auf 75°C wurde näher untersucht. In beiden Fällen wird neben dem Wasserdampf auch Wasserstoff zurückgeführt. Die Gase können bei der Elektrolyse nicht einfach getrennt werden, wie es im Brennstoffzellenbetrieb durch Kondensation der Fall ist. Dadurch steigt die zurückgeführte Wasserstoffmenge mit steigender Rezyklierrate an. Bei einer Dampfnutzung von 90% im Stack sind 10 vol.-% Wasserdampf am Austritt vorhanden, die potentiell zurückgeführt werden können. Bei einem Dampfnutzungsgrad von 40% beträgt der Wasserdampfanteil am Austritt 60%, der mit der Rezyklierung zurückgeführt werden könnte. Durch die Rezyklierung wird auf eine Wasserstoffentnahme aus dem Druckspeichertank verzichtet, die Verdichterleistung zur Speicherung im Tank wird reduziert. Dadurch steigen alle Wirkungsgrade mit steigender Rezyklierung zunächst leicht an, bis die vorgegebenen 10 vol.-% H₂ bereitgestellt sind. Auf Basis dieser Überlegungen konnte mit der so entwickelten Anlage ein maximaler Wirkungsgrad von 75% bei einer Dampfnutzungsrate im Stack von 90% und einer Rezyklierrate von 11% erreicht werden. Unter Verwendung der Definitionen für den Wirkungsgrad im Brennstoffzellenbetrieb bzw. im Elektrolysebetrieb

$$\eta_{el,SOFC} = \frac{P_{AC,net}}{\dot{m}_{H_2} \cdot LHV} \quad \eta_{H_2,SOE} = \frac{\dot{m}_{H_2} \cdot LHV}{P_{AC,stack} + P_{AC,BoP}}$$

resultieren folgende Werte:

	j [A/cm ²]	T [°C]	η _{LHV} [%]	η _{HHV} [%]
SOFC	0,5	750	66	55,8
SOEC	0,6	750	73,5	86,9

Daraus ergibt sich bezogen auf den Heizwert des verbrauchten bzw. erzeugten Wasserstoffs unter Berücksichtigung einer Kompression des erzeugten Wasserstoffs auf 70 bar ein Gesamtwirkungsgrad des reversiblen Systems von:

$$\eta_{tot} = \eta_{el,SOFC} \cdot \eta_{H_2} = 0,66 \cdot 0,735 = 0,485$$

dies entspricht 48,5%.

5.2 Multiskalenmodellierung von Brennstoffzellen

Numerische Strömungssimulation in porösen Strukturen von Brennstoffzellen

Hinter dem einfachen Brennstoffzellenprinzip verbirgt sich in realen technischen Systemen ein sehr komplexes System, das die Grundlage für verschiedenste Forschungsbereiche bietet. Wesentlich für eine effiziente Funktionsweise ist das möglichst optimale Management der ein- und ausströmenden Medien. Für Polymerelektrolyt Brennstoffzellen (PEFC) trägt die Gasdiffusionsschicht entscheidend zur Gleichverteilung der Gase an den Elektroden bei. In Simulationen wird diese Schicht oft nicht gesondert aufgelöst, sondern geht als Parameter – oft experimentell ermittelt - in das jeweilige Modell ein. Die Arbeiten zur Simulation von Stofftransportphänomenen in den porösen Brennstoffzellenkomponenten knüpfen genau an diesem Punkt an und liefern ein mit strömungsmechanischen Methoden gewonnenes Verständnis über die mikrometergroße Struktur der Gasdiffusionsschicht und über ihre Wirkungsweise in der Brennstoffzelle.

Die Strömungssimulation erfolgt auf der Basis des Lattice-Boltzmann-Algorithmus. Dieser ermöglicht es aufgrund der guten Parallelisierbarkeit des Codes die Strömungssimulationen auf einem makroskopisch relevanten Bereich auszuführen. Die mikroskopische Struktur der Gasdiffusionsschicht wird dabei bis in die Faserstruktur aufgelöst und bei der Analyse berücksichtigt. Aus der Validierung des Algorithmus an experimentellen und analytischen Referenzwerten für verschiedene Geometrien lassen sich seine optimalen Eingangsparameter bestimmen. Dies gilt generell und insbesondere für seinen Einsatz in Bezug auf Gasdiffusionsschicht-Strukturen.

Die zu Grunde liegenden geometrischen Strukturen stammen aus zwei Quellen: Am Helmholtz-Zentrum Berlin wurde die Mikrostruktur von GDLs im BESSY-Synchrotron ermittelt und für Transportsimulationen im IEK-3 zur Verfügung gestellt. Darüber hinaus wurden vom Institut für Stochastik der Universität Ulm stochastische Modelle der Mikrostruktur von GDLs verschiedener Hersteller entwickelt. Diese führen zu künstlichen Strukturen, die mit der Realstruktur stochastisch äquivalent sind. Diese Strukturen stehen ebenfalls für Transportsimulationen zur Verfügung.

Die Verteilung der Gase über der aktiven Fläche einer Brennstoffzelle wird durch geeignete Strömungsverteiler (sogenannte flow fields) realisiert. Die Mikrostruktur der GDL beeinflusst die Strömung in den Kanälen der Strömungsverteiler. Abb. 84 zeigt den schematischen Aufbau einer Simulationsdomäne. In diesem Schema fließt das Strömungsmedium von vorne durch die GDL, deren Mikrostruktur durch eine Serie von binären Bildern gegeben ist – in diesem Beispiel ein faserbasiertes Papiermaterial.

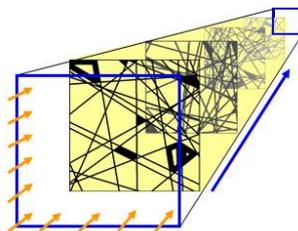


Abb. 84: Schematischer Aufbau des Simulationsbereiches

Durch die Kanal-Steg-Struktur der Strömungsverteiler entsteht ein Ungleichgewicht in der Gasversorgung an der Elektrode: eine überdurchschnittliche Versorgung unter dem Kanal und eine unterdurchschnittliche Versorgung unter dem Steg. Durch die GDL kann die Fläche unter dem Steg genutzt werden, indem durch die poröse Struktur eine Querströmung ermöglicht wird, die das Gas möglichst homogen an der Elektrode verteilt. Während des Betriebes von PEFCs entsteht auf der Kathodenseite flüssiges Wasser, das durch die GDL in die Kanäle transportiert werden muss. Der Transport des Wassers in der GDL wird unter Verwendung der Lattice-Boltzmann-Methode simuliert. Die Fasern der GDL sind teilweise mit PTFE benetzt, was dazu führt, dass sie sich dort gegenüber flüssigem Wasser hydrophob verhalten, ansonsten eher hydrophil. Die Modellparameter zur Berechnung der Kohäsions- und Adhäsionskräfte bestimmen letztendlich den Kontaktwinkel zwischen der Flüssig/Gas-Grenzschicht des Wassers und der Oberfläche des Feststoffmaterials. Dabei wird beispielsweise durch einen Kontaktwinkel von 0° ein hydrophiles Verhalten repräsentiert, durch einen Kontaktwinkel von 120° ein hydrophobes Verhalten. Abb. 85 zeigt ein unterschiedliches Verhalten von flüssigem Wasser in einer hydrophoben (links) und einer hydrophilen (rechts) Situation. Es wird ein kleiner Ausschnitt (ca. 0.1 mm x 0.1 mm) eines faserbasierten Vliesmaterials gezeigt.

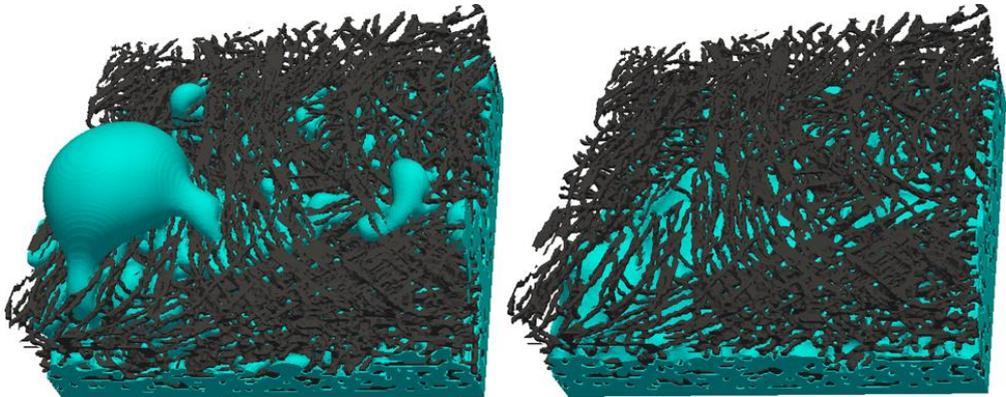


Abb. 85: Transport von flüssigem Wasser durch einen Ausschnitt der GDL bei verschiedenen Kontaktwinkeln (links: 120° , rechts: 0°)

Mit Hilfe der Lattice-Boltzmann Simulationen ist eine umfassende Analyse von ein- und zweiphasigen Stofftransportprozessen in verschiedenen Gasdiffusionsschicht-Strukturen möglich. Aus den Strömungssimulationen werden effektive Parameter zur Beschreibung von Transportphänomenen generiert, die ansonsten oftmals nur über Experimente zugänglich sind.

Die Transportsimulationen wurden auf Hardware des Jülich Supercomputing Centre (JSC) durchgeführt (JUOPA und JURECA).

5.3 Photolyse – Photoelektrische Wasserstoffherstellung

In Deutschland deckt die elektrische Energie aus Photovoltaik heute schon mehr als 7 Prozent des Nettostrombedarfs. An sonnigen Tagen kann dieser Wert in der Mittagszeit sogar an die 50 Prozent heran reichen (Quelle: ISE). Im Gegensatz zu anderen erneuerbaren Energien liefern die Photovoltaikzellen nachts oder bei schlechtem Wetter jedoch keine elektrische Energie, eine durchgängige Energieversorgung lässt sich also nur mit Hilfe einer geeigneten Speichertechnik erreichen.

Eine Möglichkeit der Energiespeicherung liegt in der Zerlegung von Wasser mit Hilfe der elektrochemischen Wasseraufspaltung mittels Elektrolyse. Die Elektrolyse lässt sich in unterschiedlichen Konfigurationen direkt mit der Photovoltaik verbinden, so dass ein Modul entsteht, das Wasserstoff direkt erzeugt. Dieser solar erzeugte Wasserstoff ist ein vielseitiger Brennstoff, der die Energie des Lichts in chemischer Form speichert. Der so erzeugte Wasserstoff kann zum Beispiel als Treibstoff für ein Heizgerät dienen oder wieder mit einer Brennstoffzelle in elektrische Energie gewandelt werden.

Ziel des Projektes PECSYS (Technology demonstration of large-scale photo-electrochemical system for solar hydrogen production) ist die Entwicklung eines Demonstrationssystems mit bis zu zehn Quadratmetern Fläche zur direkten Erzeugung von Wasserstoff mittels Photovoltaik. Die Solarenergie wird in chemische Energie umgewandelt und im Brennstoff Wasserstoff gespeichert. Dabei sollen die Wasserstoffherstellungskosten perspektivisch unter fünf Euro pro Kilogramm Wasserstoff liegen, die Wasserstoffkosten liegen heute bei rund acht Euro pro kg. Zum Abschluss planen die Partner aus Deutschland, Schweden und Italien den Aufbau mehrerer Module mit einer Gesamtfläche von zehn Quadratmetern, um Stabilität und Ertrag auf großer Fläche zu demonstrieren. Das Projekt läuft im Rahmen des EU-Forschungsprogramms Horizon2020 über vier Jahre und wird mit 2,5 Millionen Euro gefördert („Fuel Cells and Hydrogen 2 Joint Undertaking“ unter der Nummer 735218).

Die Investitionskosten für die neue Technologie, einschließlich der vollständigen Gasanalyse (Wasserstoff- und Sauerstoffgewinnung, Reinigung, Online-Analyse, Lagerung usw.), sollten, sobald die Herstellungsmethode skaliert wurde, einen Kostenaufwand für die Wasserstoffproduktion von deutlich unter fünf Euro pro Kilogramm ermöglichen, berechnet durch eine sozio-techno-ökonomische Bewertung. Die für das System verwendeten Komponenten sollen frei von toxischen oder knappen Materialien wie III/V-Halbleitern oder Platin sein. Unter Umständen kann jedoch der Einsatz von geringen Platinmengen als Katalysatormaterial für die Elektrolyse sinnvoll sein. Die Photoabsorber werden aus Silicon, CIGS oder Perovskite hergestellt.

Eines der Systeme soll beim Forschungszentrum Jülich in Jülich, Deutschland (globale Bestrahlung: ~ 1250 kWh/m²/Jahr) errichtet werden. Es muss eine H₂-Erzeugungsrate > 15 g/h aufweisen und mehr als 10 kg Wasserstoff über einer sechsmonatigen Betriebszeit erzeugen. Die Effizienz von Solarenergie und Wasserstoff soll durch gleichzeitige Messung der globalen und diffusen Bestrahlung auf den 10 m² und über 5 % im Vollbetrieb beurteilt werden. Das System soll eine maximale Degradation der Wandlungseffizienz von Solarenergie zu Wasserstoff unter 10 % über mehr als sechs Monate Betrieb unter rauen Bedingungen aufweisen.

5.3.1 Electrolysis

Zwei Typen von Niedertemperatur-Elektrolyseuren, die auf den gut etablierten Elektrolyten basieren, stehen im Mittelpunkt dieses Projektes: die alkalische Elektrolyse und die PEM-Elektrolyse (siehe Abb. 86).

Die alkalische Elektrolyse ist eine etablierte Technologie. Der große Vorteil liegt in der Verwendung von kostengünstigen Nickel-basierten Katalysatormaterialien, die im alkalischen Regime gut stabil sind und die vernünftige Zell-Überspannungen sowohl für Kathoden- als auch für Anodenelektroden aufweisen. Die Zelle muss mit einer Wasser- und Kaliumhydroxidmischung versorgt werden und innerhalb jeder Zelle findet ein Wasserfluss von der Anode zur Kathode statt. Beim Verbinden mehrerer Elektrolyse-Module in einem Testfeld ist eine Umwälzung des Elektrolyten erforderlich. Dies zeigt sich auch in der folgenden Abbildung; Unter Sicherheitsüberlegungen ist die Zirkulation von Lauge herausfordernd, und dies könnte ein Grund dafür sein, dass die Implementierung eines solchen alkalibasierten Systems nachteilig ist.

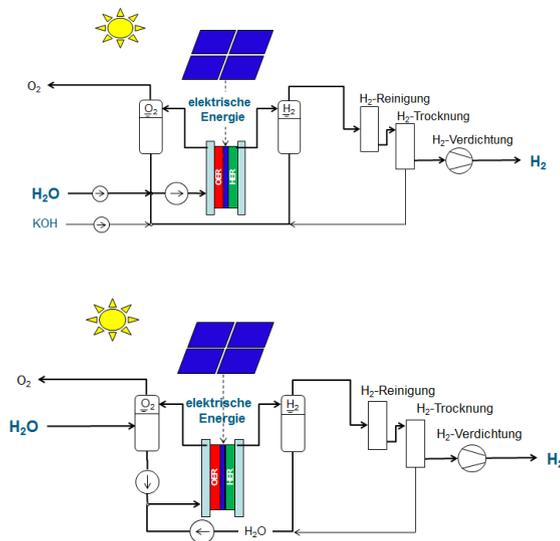


Abb. 86: Schema eines alkalischen (oben) und PEM (unten) Elektrolysesystems

Die PEM-Wasser-Elektrolyse hat einige Vorteile in Bezug auf ihre Einfachheit und den sichereren Betrieb im Vergleich zu einem alkalischen Regime. Darüber hinaus stellt sie einen viel breiteren Leistungsbetriebsbereich aufgrund kleinerer Zellwiderstände zur Verfügung, was auf die dünnen (<200 µm) Membranelektrolyten zurückzuführen ist. Darüber hinaus ist es ebenfalls möglich, die benötigten Gasabscheider (erzeugte Wasserstoff aus Wasser) in die gleiche Kassette wie die Elektrolyse zu integrieren. Dies bedeutet, dass nur ein Zulaufschlauch für Wasser und ein zusätzlicher Schlauch zum Sammeln des Wasserstoffs notwendig sind. Nachteil des Einsatzes von reinem Wassers ist die Möglichkeit des Einfrierens der Systeme bei Temperaturen unter null Grad.

Innerhalb des Projektes soll nun geklärt werden, wie man den Betrieb bei Temperaturen unter Null Temperaturen realisiert und es erreichen kann, die Edelmetallbelegung weiter zu reduzieren, um so die Investitionskosten zu vermindern.

5.4 Versorgungssysteme für alternative Kraftstoffe

Der Bedarf an flüssigen Kraftstoffen wird nach den vorliegenden Prognosen bis 2050 weltweit stark ansteigen. Als Alternative zu fossilen Kraftstoffen sind flüssige, synthetische Kraftstoffe auf Biomassebasis (BtL) oder aus Power-to-Fuel-Prozessen (PtF) unter Nutzung von Kohlendioxid und Wasserstoff, Wasserstoff und Methan aus Power-to-Gas-Prozessen (PtG), sowie Methan aus der Biomassefermentation (Bio-CH₄) zu nennen.

5.4.1 Kraftstoffbedarf

Die Begrenzung des Anstiegs der Durchschnittstemperatur auf 2 K ist die Basis politischer Entscheidungen die CO₂-Emissionen drastisch zu reduzieren. Die CO₂-Reduzierung muss in allen Bereichen erfolgen: in der Stromerzeugung, im Verkehr, in Industrieprozessen, im verarbeitenden Gewerbe und in Haushalten und bei Kleinverbrauchern. Dabei werden bisher etablierte Grenzen zwischen stationärer Stromerzeugung und Verkehr und anderen Bereichen aufgebrochen. Die deutsche Mobilitäts- und Kraftstoffstrategie (MKS) erachtet eine integrierte Betrachtungsweise der Erzeugung von erneuerbarem Strom und dessen Nutzung zur Dekarbonisierung des öffentlichen Personenstraßenverkehrs als notwendig. Weiterhin wird eine Erweiterung der Kraftstoffbasis für Lkw um den Energieträger Erdgas und für die Luftfahrt um Biokraftstoffe, insbesondere Biokerosin, sowie eine Umstellung der Kraftstoffe in der Seeschifffahrt in Richtung Diesel und LNG vorgeschlagen und angestrebt. Als Zielwerte zur Reduktion des Endenergieverbrauchs im Verkehr werden 10 % bis 2020 und 40 % bis 2050, jeweils bezogen auf 2005, angegeben.

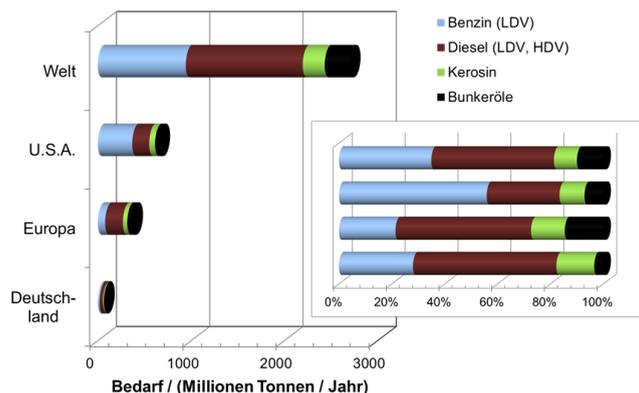


Abb. 87: Bedarf in Mio. t/a an Benzin, Diesel, Kerosin und Bunkerölen in Deutschland, Europa, U.S.A. und weltweit in den Jahren 2014-2015^{33,34,35}

Der Bedarf an Kraftstoffen für den Verkehr ist in Abb. 87 in Mio t/a für die vier Kategorien Benzin, Diesel, Kerosin und Bunkeröle angegeben. Die Daten stammen aus unterschied-

³³ Hua, T., Ahluwalia, R., Eudy, L., Singer, G., Jermer, B., Asselin-Miller, N., et al.: Status of hydrogen fuel cell electric buses worldwide, *Journal of Power Sources*, 269 (2014), 975-993

³⁴ Administration, U. S. E. I. (2015, 2.6.2015), *International Energy Statistics*, verfügbar: <http://www.eia.gov/cfapps/ipdbproject/iedindex3.cfm?tid=5&pid=63&aid=2&cid=r3.&syid=2009&eyid=2013&unit=TBPD>

³⁵ FuelsEurope, (2014, 2.6.2015), *Statistical report fuels Europe*, verfügbar: <https://www.fuelseurope.eu/dataroom>

lichen Studien aus den Jahren 2014-2015^{33,34,35}. Wie Abb. 87 zeigt, hat Deutschland aufgrund seiner geographischen Lage nur einen geringen Anteil am Kraftstoffbedarf für Überseeschiffe. Benzin- und Dieselanteile sind mit denen weltweit gut vergleichbar. In den U.S.A. ist der Benzinanteil sehr dominant. Auffällig ist zunächst der geringe Kerosinanteil. Bezogen auf die Bevölkerungszahl ergibt sich aber ein durchschnittlicher pro-Kopf-Verbrauch von 5,1 GJ/a/Einwohner in Deutschland und 8,5 GJ/a/Einwohner in U.S.A.

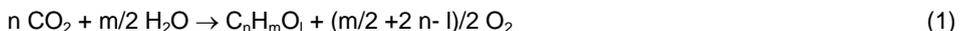
Die aktuellen Zahlen lassen aber noch keinen Rückschluss auf zukünftige Trends zu. Seitens des Mineralölwirtschaftsverbands e.V. (MWV) wurden Prognosen für den Zeitraum bis 2025 für Benzin, Diesel und Kerosin publiziert, die eine Reduktion bei PkW- Benzin und -Diesel, eine Zunahme von LkW-Diesel und Kerosin vorhersagen³⁶. Ausgangspunkt war der Stand 2009. Demnach wird der Benzinverbrauch in Deutschland von 19,7 auf 11,7 Mio. t/a stark sinken. Diesel für PkW folgt dem Trend leicht mit einer Reduktion von 12,1 auf 10,8 Mio. t/a. LkW Diesel steigt hingegen von 18,3 auf 19,7 Mio t/a, Kerosin von 8,7 Mio. t/a auf 10,9 Mio. t/a. Dabei bleiben die zugelassenen Fahrzeuge in Deutschland bis 2040 laut der Shell-Studie³⁷ nahezu konstant. Auch in dieser Studie werden niedrigere Verbräuche aufgrund von Effizienzsteigerungen im Motor prognostiziert.

Aus diesen Vorhersagen heraus ist eine intelligente marktorientierte Strategie für zunächst Deutschland und Europa notwendig, die aber schrittweise in andere Länder weltweit übertragen werden kann. Die weltweit hohen Zuwachsraten, für die insgesamt ein mehr als verdoppelter Bedarf prognostiziert wird, lassen einen möglichen Deckungsanteil von 25 – 40 % bezogen auf den heutigen Stand als gering erscheinen. Um hohe Deckungsanteile alternativer Kraftstoffe zu erreichen, müssen alle Optionen zur Kraftstoffherstellung berücksichtigt werden. Dabei spielen Rohstoffverfügbarkeit, Effizienz und auch die Herstellungskosten des Kraftstoffs eine wichtige Rolle. Anhand dieser Betrachtungen lässt sich also abschätzen, mit welchem weltweiten Rohstoffpotential sich welche Mengen an Kraftstoff produzieren lassen.

5.4.2 Potentielle Synthesepfade für Kraftstoffe

Um in Zukunft flüssige Kraftstoffe bereitstellen zu können, ist eine Reihe von Optionen zu prüfen. Diese lassen sich unterteilen in Prozessketten unter Verwendung von Biomasse und solche über CO₂-Nutzung unter Einbindung von Wasserstoff.

Abb. 88 zeigt ein differenziertes Bild auf. Aus Kohlendioxid und Wasser werden in photolytischen Prozessen in einer Pflanze verschiedene Kohlenwasserstoffe C_nH_mO_l unter Sauerstofffreisetzung synthetisiert.



Liegt die Biomasse vor, existiert eine Reihe von Optionen Kraftstoffe aus dieser Biomasse zu generieren. Auf die Arten nutzbarer Biomassen wird in den nächsten Abschnitten eingegangen. Prinzipiell lässt sich Pflanzenöl direkt ohne weitere Umwandlung in Verbrennungsmotoren verwenden. Verbreiteter ist der Weg der Umesterung unter Methanolzugabe

³⁶ Mineralölwirtschaftsverband: MWV-Prognose 2025 für die Bundesrepublik Deutschland, (2011), Mineralölwirtschaftsverband e. V., Berlin

³⁷ Adolf, J.: SHELL Pkw-Szenarien bis 2040, präsentiert bei: Mobilität im Wandel, (2014), Düsseldorf

oder die Hydrierung von Pflanzenölen in einem industriellen Prozess (grau unterlegter Pfeil in Abb. 88). Letzterer nimmt einen zunehmenden Anteil am Biodieselmärkte ein^{38,39}.

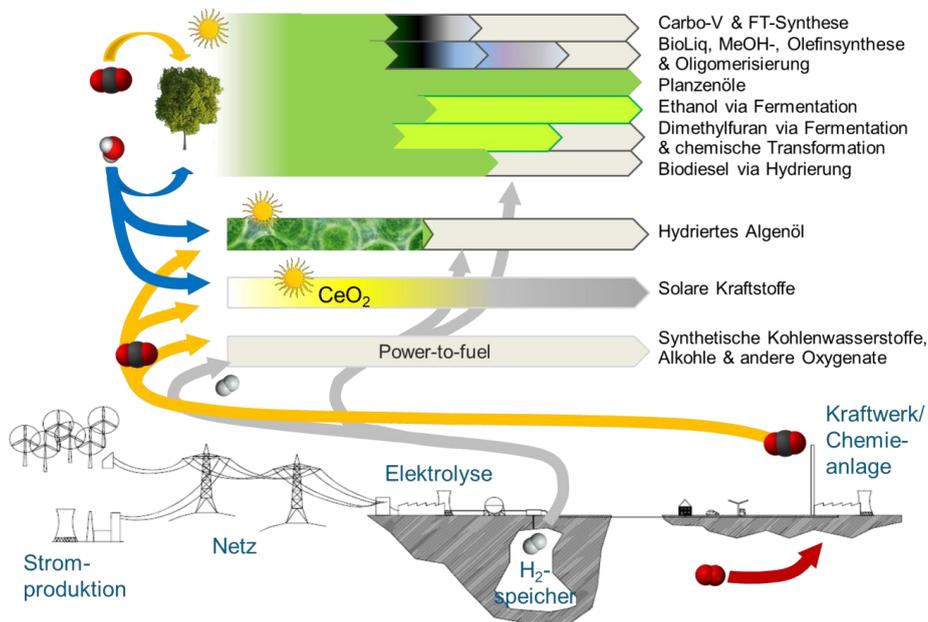


Abb. 88: Verschiedene Synthesepfade für Kraftstoffe aus Biomasse und Kohlendioxid

Ethanol als Biokraftstoffkomponente im Benzin wird auf biochemischen Weg (hellgrün unterlegter Pfeil in Abb. 88) aus der Vergärung von Zucker oder Stärke durch Hefebakterien gewonnen. Eine Kombination aus biochemischen und chemischen Prozessen wird bei der Synthese von Dimethylfuran als Benzinersatzkraftstoff gewählt⁴⁰. Algenöle weisen eine sehr hohe flächenspezifische Produktionsrate auf^{41,42}. Algen werden dazu in geschlossenen Reaktoren oder in offenen Zuchtbecken mit Nährstoffen, Wasser und Kohlendioxid versorgt. Industrielle Abgase, z.B. aus Kraftwerken dienen nach entsprechender Aufbereitung als Quelle für Kohlendioxid. Thermosolare Prozesse imitieren diesen Prozess unter Verwendung von CeO_2 - und TiO_2 -Katalysatoren nach^{43,44}.

³⁸ FNR, (2012, 16.4.2014), Biokraftstoffe, verfügbar: <http://biokraftstoffe.fnr.de/kraftstoffe/>

³⁹ UFOP, (2014, 16.4.2014), Rohstoffbasis der Biodieselanteile in Dieselmotorkraftstoffen, verfügbar: http://www.ufop.de/files/9413/9176/4863/UFOP_Analyse_Biodiesel_Rohstoffbasis

⁴⁰ Roman-Leshkov, Y., Barrett, C. J., Liu, Z. Y., Dumesic, J. A.: Production of dimethylfuran for liquid fuels from biomass-derived carbohydrates, *Nature*, 447 (2007), 982-985

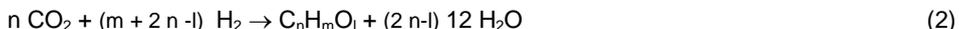
⁴¹ Chisti, Y., Yan, J.: Energy from algae: Current status and future trends, *Algal biofuels – A status report*, *Applied Energy*, 88 (2011), 3277–3279

⁴² Weyer, K. M., Bush, D. R., Darzins, A., Willson, B. D.: Theoretical maximum algal oil production, *BioEnergy Research*, 3 (2009), 204-213

⁴³ Endres, C., Falter, C., Roth, A., Riegel, F., Sizmann, A.: Renewable aviation fuels - assesment of three selected fuel production pathways, in *Deutscher Luft- und Raumfahrtkongress 2012*, Berlin, DocumentID: 281191

⁴⁴ Somnath C. Roy, Varghese, O. K., Paulose, M., Grimes, C. A.: Toward solar fuels: photocatalytic conversion of carbon dioxide to hydrocarbons, *ACS Nano*, 4 (2010), 1259-1278

Ein weiterer Weg ist die Nutzung von CO₂-Emissionen zur Synthese von Kraftstoffen unter Einbindung von Wasserstoff. Dieser Wasserstoff wird via Elektrolyse aus Überschussstrom hergestellt.



Von Nachteil ist das bei dieser Reaktion Sauerstoff in Form von Wasser und nicht wie beim photokatalytischen Prozess molekularer Sauerstoff frei wird. Ein Teil des Wasserstoffs wird daher wieder direkt im Syntheseprozess verbrannt. Ein anschauliches Beispiel ist die Synthese von Methanol. Ein Anteil von 1/3 des generierten Wasserstoffs dient der Aufnahme des Sauerstoffs.



Welche Mengen an alternativen Kraftstoffen stehen nun zu Verfügung? Es können nur Abschätzungen innerhalb gewisser Bandbreiten gemacht werden. Im Kern stellt sich die Frage den limitierenden Faktoren bei der Herstellung dieser alternativen Kraftstoffe. Tab. 9 listet diese Faktoren auf und benennt abhängige Prozessketten und Nutzungskonkurrenten. In der Betrachtung der Nutzungskonkurrenzen der Rohstoffe liegt der Schlüssel für zu erwartenden, starken Abweichungen zwischen Kraftstoffpotentialen und später möglichen Marktanteilen. Es kann aber nicht exakt vorhergesagt werden, wie sich die den Pfaden zugehörigen Umwandlungstechniken und die spätere Preisgestaltung in den konkurrierenden Märkten entwickeln werden. Deshalb werden Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt, um die Bandbreiten abzuschätzen.

	Quelle	Nutzungskonkurrenz	Prozessketten
H ₂	Via Elektrolyse mit Strom aus Windenergie	Stromproduktion	PTF, HVO
CO ₂	Industrie Biomasse-Vergasung	Chemie Biogas	PTF, Solarer Kraftstoff HVO aus Algen
Fläche	Agrarwirtschaft Stillgelegte Äcker Kultivierter Wald Naturlandschaft Ödland	Nahrung Möbel, Wärme Kochen, Wärme	Pflanzenöl, Ethanol aus Mais, KUP FT aus KUP FT aus Restholz Pflanzenöl, Halophyten, Miscanthus
H ₂ O	Frischwasser Abwasser Meerwasser	Nahrung Entsalzung	Pflanzen- & Algenöle, Solarer Kraftstoff, Ethanol aus Mais, FT aus KUP Algenöl Algenöl, Halophyten, Miscanthus
Sonnenenergie	Sonnenlicht		Solarer Kraftstoff, Pflanzen- & Algenöle
Restholz	Kultivierter Wald	Wärme	FT
Reststroh	Nahrungsmittelproduktion	Tierfutter, Rezykling	FT, Bioliq
Tier- und Fischfette	Nahrungsmittelproduktion	Tierfutter, Kosmetika	HVO

Tab. 9: Limitierende Faktoren in der Herstellungskette alternativer Kraftstoffe. FT: Fischertropsch; HVO: Hydriertes Pflanzenöl; KUP: Anbauholz; Bioliq: Strohvergasung

Welche Schlüsse lassen sich nun aus den Angaben in Tab. 9 ziehen?

- Wasserstoff aus regenerativen Energieketten wird im Wesentlichen für alle Power to Fuel (PTF) – Prozesse und für die Hydrierung von Pflanzenölen benötigt.
- Kohlendioxid aus Industrieabgasen oder aus der Biomassevergasung limitiert die Produktionsmengen für solare Kraftstoffe, Algenöle und PTF.
- Die für den Anbau von Energiepflanzen zur Verfügung stehende Fläche ist durch die Nutzungskonkurrenz zur Nahrungsmittelproduktion begrenzt. Deshalb können nur still gelegte Flächen oder solche die aufgrund Ihrer Bodenbeschaffenheit nicht für den Anbau von Nahrungsmitteln geeignet sind, genutzt werden.
- Wasser ist eine wichtige Ressource. Alle Prozessketten, die Wasser im Herstellungsprozess benötigen, das sind der Energiepflanzenanbau, solarer Kraftstoff und die Algenzüchtung, dürfen nicht den Anbau von Nahrungsmitteln behindern. Algen können je nach Stamm in Abwässern oder salzhaltigem Wasser gezüchtet werden. Halophyten können zum Teil mit Meerwasser kultiviert werden, Miscanthus als Energiegras weist eine hohe Toleranz auf und wächst auch auf mit Brackwasser versorgten Böden.
- Reststoffe aus der Forst- und Landwirtschaft, sowie aus der Fleisch- und Fischproduktion sind aufgrund der zur Verfügung stehenden Mengen und durch Nutzungskonkurrenzen sehr stark eingeschränkt.

5.4.3 Power to Fuel Kraftstoffe

Ob ein mittels Power-to-Fuel-Prozessen hergestellter Kraftstoff sich auf dem Markt durchsetzen kann, hängt von zwei grundsätzlichen Bedingungen ab. Zum einen muss er mit den derzeitigen Kraftstoffen und deren Infrastruktur harmonisieren. Zum anderen muss eine technisch umsetzbare und wirtschaftliche Produktion möglich sein. Für den Kraftstoff sollten keine signifikanten Veränderungen an Infrastruktur und Bestandsfahrzeugen nötig sein. Weiterhin sollten für die verschiedenen Einsatzbereiche im Verkehrssektor geeignete nicht-fossile und nicht-biologische Kraftstoffe verfügbar sein. Wie auch derzeit beim fossil-dominierten Markt ist eine Diversifizierung des Kraftstoffangebots nötig.

Am IEK-3 wird an einem vergleichendem Überblick verschiedener alternativer Kraftstoffe und deren Produktion erarbeitet, u.a. für Fischer-Tropsch-Kohlenwasserstoffe und für Polyoxymethyldimethylether (OME). Beide Produkte können mit konventionellem Diesel gemischt werden. Eine Markteinführung wird deshalb als denkbar angesehen. Trotz ihrer gleichen Anwendung ist der Vergleich der Prozesse und Produkte sehr differenziert. Abb. 89 fasst die Erkenntnisse aus AspenPlus Simulationen für beide Kraftstofftypen zusammen.

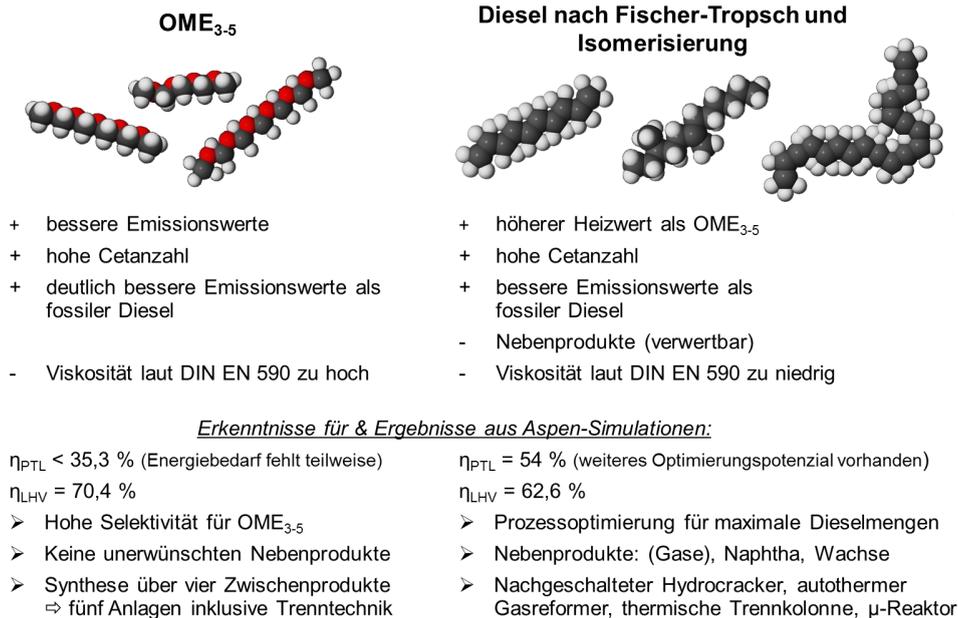


Abb. 89: Vergleich der Power-to-Fuel Routen OME-Synthese und Fischer-Tropsch

Auf molekularer Ebene sind Fischer-Tropsch-Kohlenwasserstoffe ähnlich dem fossilen Diesel. Das gilt für Ether, wie OME, nicht. OME hat zwar einen geringeren Heizwert, allerdings herausragendes Potenzial zur Verbesserung der Abgaswerte. Großtechnische Fischer-Tropsch-Prozesse gehören seit Jahrzehnten zum Stand der Technik. Wegen der geringen Produktnachfrage gilt dies für OME-Prozesse nicht. Für beide Prozesse gibt es verschiedene grundlegende Möglichkeiten bei der Anlagenauslegung. Anlagenauslegung und Prozessparameter haben dabei Einfluss auf Edukt- und Energiebedarf sowie Produktqualität, Koppel- und Nebenprodukte. Die Herausforderungen der Produktaufbereitung sind bei Fischer-Tropsch- und OME₃₋₅-Synthese unterschiedlich. So liegt die Schwierigkeit bei den Kohlenwasserstoffen eher in der breiten Produktverteilung. Bei der OME₃₋₅-Synthese liegen die Schwierigkeiten bei der Flüssig-flüssig-Trennung auf Grund diverser Mischungslücken und Azeotrope. Wie die Analyse der Produktspezifikation spielt auch die techno-ökonomische Analyse der Produktionsprozesse eine wichtige Rolle bei der Umsetzungsstrategie eines klimagasneutralen Verkehrssektors. Erste Abschätzungen zeigen einen Vorteil bezüglich des Wirkungsgrades für die vollständige Kette „well-to-tank“ der FT-Synthese. Zukünftige Analysen werden diese Angaben verfeinern.

5.5 Neue Themen aus der Energiesystemanalyse und -integration

Neue Themen der Energiesystemanalyse und -integration lassen sich in drei Forschungsbereiche einteilen. Diese sind „Mobilität“, „stationäre Energiesysteme“, „Sektorkopplung & Infrastrukturen“. Die Forschungsbereiche zeigen auch gleichzeitig die aktuellen Themenschwerpunkte in der Abteilung Verfahrens- und Systemanalyse (VSA) und werden nun näher erläutert.

5.5.1 Mobilität

Die verpflichtenden Treibhausgas- (THG-) Reduktionsziele der Bundesregierung von mindestens 80 % bis 2050 erfordern drastische Minderungsbeiträge in allen Wirtschaftsbereichen. Für den Straßenverkehr wurde am IEK-3 das hohe THG-Reduktionspotential des Einsatzes von regenerativ erzeugtem Strom zur Wasserstoffherzeugung und dessen Nutzung in Pkw mit Brennstoffzellen (FCV) gezeigt. Davon ausgehend besteht nun die Herausforderung in der Entwicklung einer Einführungsstrategie für Wasserstoff, die auf der Grundlage zu entwickelnder Modelle und anhand von Stützjahren Perspektiven für einen kostenoptimierten Aufbau einer Wasserstoffversorgung zu erarbeiten. Dazu sollen die technoökonomischen und ökologischen Eigenschaften unterschiedlicher Versorgungspfade herausgearbeitet werden, so dass über den Zeitverlauf der Markteinführung deren Priorisierung in Abhängigkeit der orts- und zeitaufgelösten Bedarfsentwicklung möglich wird.

Einen weiteren Schwerpunkt der Betrachtung bildet die Frage nach dem Antriebsmix der Zukunft. Zu diesem Zweck sollen schwerpunktmäßig FCV und Batterie-Pkw (BEV) umfassend hinsichtlich ihrer Stärken und Schwächen im zukünftigen Mobilitätsumfeld analysiert werden. Neben den gegenüber heutigen Pkw, veränderten Umwelteigenschaften gehören dazu Performance-Parameter, wie zum Beispiel Leistung, Reichweite, und Betankungsdauer sowie den Kosten auch die Anforderungen an geeignete Betankungs- bzw. Ladeinfrastrukturen. Neben FCV und BEV sollen auch weiterentwickelte Pkw mit Verbrennungsmotoren sowie Hybridantriebe betrachtet werden. Neben einer Kosten- und Nachfragemodellierung soll auch die Konformität der THG-Emissionen der gesamten Pkw-Flotte mit der THG-Zielerreichung in die Betrachtung einfließen. Ziel ist es, den Antriebsmix der Zukunft modellbasiert beschreibbar zu machen.

Schließlich sollen mögliche Auswirkungen des autonomen Fahrens auf Pkw-Bestand und jährliche Fahrleistungen analysiert werden. Dabei sollen in besonderem Maße aktuelle Trends der Mobilitätsforschung aufgenommen und in die Analyse einbezogen werden. So wird bereits heute intensiv die private Eigentümerschaft an Pkw diskutiert und in Frage gestellt. In Kombination mit dem autonomen Fahren könnte davon ausgehend die Auslastung von Fahrzeugen zukünftig deutlich verbessert und damit der Fahrzeugbestand reduziert werden. Da die beschriebenen Veränderungen substantielle Auswirkungen auf die Art und Weise der zukünftigen Fahrzeugnutzung haben können, sollen der gewonnenen Erkenntnisse in die Betrachtung der Markteinführungsstrategie und des Verkehrsmodells einfließen.

5.5.2 Stationäre Energiesysteme

Der Anteil der gebäudeseitigen Klimagasemissionen an den gesamten nationalen Emissionen beträgt ca. 13,2%. Um die ambitionierten Klimagasreduktionsziele der

Bundesregierung zu erreichen, müssen die Klimagasemissionen auch in diesem Endverbrauchsbereich signifikant reduziert werden. Durch den forcierten Ausbau Erneuerbarer Energien wird Elektrizität zukünftig die dominierende Energieform einer zukünftigen Energieversorgung sein, mit der verschiedenste Versorgungsaufgaben zu erfüllen sind. Hierdurch kommt es zu einer engeren Verzahnung der Versorgungsaufgaben, die nicht mehr isoliert voneinander gesehen werden können und eine enge Kopplung der Sektoren bewirken. Vor diesem Hintergrund sollen zukünftig emissionsarme Versorgungskonzepte auf verschiedenen Systemebenen analysiert werden. Unter der Prämisse von Kosteneffizienz sollen auf Gebäudeebene Versorgungskonzepte entwickelt und Techniksysteme zur Wärme- und Stromversorgung untersucht werden. Hierzu soll für die Gebäudeversorgung ein bestehendes mathematisches Optimierungsmodell erweitert werden, das neben den einzelnen Versorgungstechniken auch die Wärmedämmmaßnahmen in das Optimierungskalkül einbezieht. Die Berücksichtigung von Speichertechniken von Strom und Wärme sowie die notwendige zeitliche Auflösung stellen eine besondere Herausforderung dar.

Neben Einzelgebäuden sollen vergleichbare Analysen zukünftig auch für die urbane Quartiersversorgung von Städten durchgeführt werden. In Kooperation mit einem Industriepartner sollen am Beispiel von ausgewählten realen Stadtquartieren Versorgungskonzepte abgeleitet werden, die sowohl die Wärme- und Stromversorgung sowie den Mobilitätsbereich umfassen. Hierfür sollen geeignete GIS-basierte Modellansätze entwickelt werden, die einen Vergleich verschiedener Versorgungskonzepte hinsichtlich Effizienz und Kosten erlauben und mit denen es möglich ist, den notwendigen Infrastrukturbedarf aufzuzeigen.

5.5.3 Sektorkopplung und Infrastrukturen

Die weitgehende Substitution der fossilen Energieträger kommt einer Decarbonsierung der Energieversorgung gleich. Die Stromproduktion auf der Basis Erneuerbarer Energien wird zukünftig die zentrale Rolle spielen. Hierbei wird es sich vor allem um fluktuierende Einspeisung von Wind- und Photovoltaikanlagen handeln. Bedingt durch die zeitungleiche Erzeugung und Verbrauch sowie durch Netzengpässen kommt es zu einer sogenannten negativen Residualenergie, welche für Power-to-X Anwendungen wie Power-to-Heat oder Power-to-Gas genutzt werden kann. Eine fundierte Abschätzung der negativen Residualenergie erfordert u.a. eine räumliche sowie zeitliche hohe Auflösung von Verbrauch, Produktion sowie die Simulation des Stromnetzes. Zu diesem Zweck werden derzeit ein Dispatch- sowie ein Stromnetzmodell entwickelt, das eine fundiertere Abschätzung von negativen Residualenergien erlaubt, die wiederum eine Basis für weitere wasserstoffbasierte Versorgungsaufgaben sein können.

Weiterhin umfasst das systemanalytische Modellportfolio der Abteilung VSA eine Vielzahl von Modellen, mit denen detaillierte Analysen für ausgewählte Bereiche (z.B. Gebäude, Verkehr, Elektrizitätssektor) der Energieversorgung durchgeführt werden können. Diese Arbeiten beruhen bisher auf dem Ansatz „verschiedener Teilmodelle“, welche zu einem Gesamtmodell verknüpft werden. Dieses Vorgehen hat verschiedene Vor- und Nachteile, siehe Kapitel 3.6.2.1. Aus diesem Grund ist geplant, weiterhin ein hochaggregiertes Gesamtmodell zu entwickeln, mit denen nationale Klimagaseminderungsstrategien generiert und analysiert werden können und das eine nationale Gesamtschau erlaubt.

Deutschland verfügt über eine historisch gewachsene Infrastruktur für die Versorgung mit Erdgas. Eine auf Wasserstoff basierende Energieversorgung erfordert eine Transport- und Verteilungsstruktur. Im Rahmen neuer Themen soll der Frage nachgegangen werden, ob und inwieweit eine bestehende Erdgasversorgungsinfrastruktur auch für eine reine Wasserstoffversorgung genutzt werden kann. In diesem Zusammenhang soll die prinzipielle Machbarkeit sowie der notwendige Modifikationsbedarf hinsichtlich Effizienz und Kosten analysiert werden.





6

Daten

Zahlen, Daten und Fakten

- Das Institut für Elektrochemische Verfahrenstechnik IEK-3
- Abteilungskompetenz im Überblick
- Publikationen, Technologietransfer und Ressourcen
- Gremienarbeit
- Beiträge zu Messen und Ausstellungen
- Anfahrtsbeschreibung
- Abkürzungsverzeichnis

6.1 Das Institut für Elektrochemische Verfahrenstechnik IEK-3

Der zurückliegende Berichtszeitraum 2015 und 2016 war für das IEK-3 dadurch gekennzeichnet, dass die Forschungs- und Entwicklungsschwerpunkte Brennstoffzellen und Elektrolyse des Instituts nun einen wesentlichen Bestandteil des neu formierten Programms „Speicher und vernetzte Infrastrukturen (SVI)“ neben anderen Themenschwerpunkten der Helmholtz-Gemeinschaft (HGF) wie Batterien, Synthetische Kohlenwasserstoffe, Wärmespeicher sowie Supraleitung, Netze und Systemintegration darstellen. Gemeinsam mit zwei weiteren HGF-Programmen für Erneuerbare Energien sowie Energieeffizienz, Materialien und Ressourcen wird in dem neuen SVI-Programm an Lösungen für die Energieversorgung gearbeitet, die ökonomisch, ökologisch und gesellschaftlich tragbar sind. FuE-Gegenstand des SVI-Programms sind adäquate Energiespeichersysteme, um die volatile Energiebereitstellung zu kompensieren und saisonale Fluktuationen zu überbrücken, effiziente Infrastrukturen, um die Herausforderungen der Energieübertragung und -verteilung zu bewältigen und eine Sektor-übergreifende Vernetzung, um die Flexibilität, Effizienz und Wirtschaftlichkeit der Energiesysteme zu erhöhen.

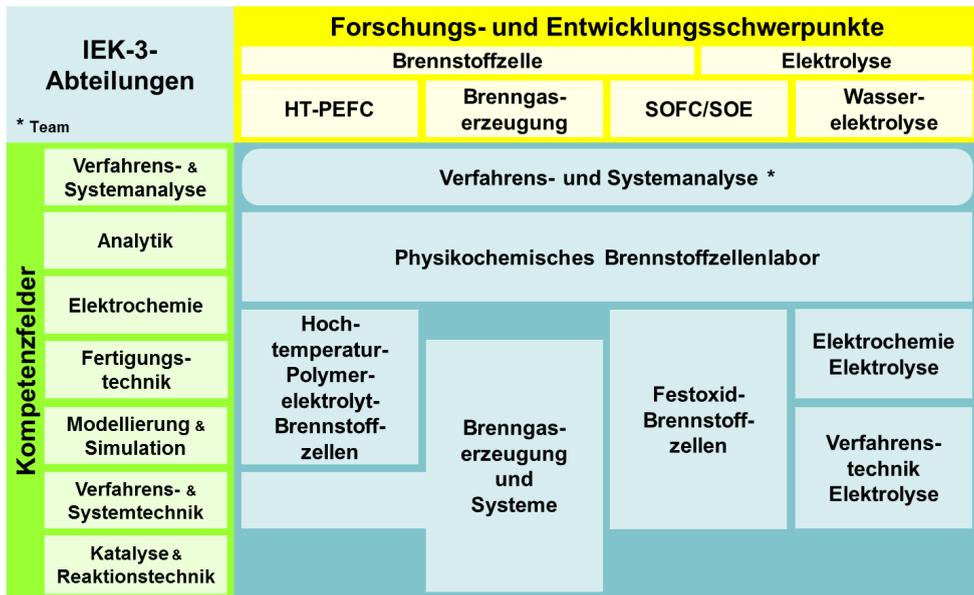


Abb. 90: Fachabteilungen im Kreuzungsbereich von Kompetenzfeldern und FuE-Schwerpunkten

Mit dem Start der novellierten HGF-Programme wurde die Initiative Energie System 2050 des HGF-Forschungsbereichs Energie ins Leben gerufen, um bis 2019 greifbare und verwertbare systemtechnische Erkenntnisse und technologische Lösungen zu erarbeiten, die Politik und Wirtschaft aufgreifen können. Das IEK-3 ist im Rahmen dieses systemanalytischen Verbundvorhabens für das Forschungsthema „Energie- und Rohstoffpfade mit Wasserstoff“ verantwortlich. In Kooperation mit den HGF-Zentren GFZ, HZB, DLR und untersuchen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des IEK-3 die Rolle von Wasserstoff bei der Reduktion von Treibhausgasen, erarbeiten Konzepte zum Aufbau einer integrierten Strom- und Wasserstoff-Versorgungsinfrastruktur, bewerten Optionen der energetischen und

stofflichen Selbstversorgung von Industrie und Haushalten und analysieren die Chancen globaler Bereitstellungsinfrastrukturen für erneuerbare Energien und Wasserstoff. Diese neuen Aktivitäten haben einen erheblichen, personellen Aufwuchs bei der Verfahrens- und Systemanalyse zur Folge gehabt, so dass die Arbeitsgruppe seit 2016 als Abteilung unter neuer Leitung aufgewertet wurde. Noch Ende 2016 wurde ein weiteres Verbundvorhaben der mit Energiesystemanalyse beschäftigten HGF-Zentren von einem international besetzten Gutachtergremium zur Förderung aus dem HGF-Impuls- und Vernetzungsfonds (IVF) freigegeben. Das zugrundeliegende Zukunftsthema „Energiesystemintegration“ soll der Vorbereitung des entsprechenden Programms für die nächste Programmförderperiode dienen. Bei insgesamt drei Arbeitspaketen ist das IEK-3 an dem Arbeitspaket 1 „Multimodales Energiesystem 2050+“ beteiligt.

Ein weiteres Großvorhaben mit IEK-3-Beteiligung ist das vom BMBF geförderte und ebenfalls 2016 gestartete Kopernikus-Projekt „Power-to-X (P2X)“. Insgesamt 62 Arbeitsgruppen aus den Bereichen Akademia, Industrie und Sozio-Ökonomie arbeiten koordiniert durch Dechema, Forschungszentrum Jülich und RWTH Aachen für bis zu 10 Jahre an der flexibleren Nutzung erneuerbarer Ressourcen. Durch Beiträge zur Hochtemperatur-Coelektrolyse und zu flüssigen Wasserstoffträgern ist das IEK-3 mit zwei Fachabteilungen eingebunden.



Institut für Energie- und Klimaforschung
IEK-3: Elektrochemische Verfahrenstechnik
Forschungszentrum Jülich GmbH
52425 Jülich



Institutsleiter
Prof. Dr.-Ing. Detlef Stolten
Tel.: 02461-61-3076
e-mail: d.stolten@fz-juelich.de

Durch eine den neuesten Entwicklungen Rechnung tragende Fokussierung wurden die Forschungsschwerpunkte des IEK-3 auf drei FuE-Themen verschlankt. Die Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen (HT-PEFC) und die Brenngaserzeugung aus flüssigen Energieträgern, die zur Wasserstoffversorgung von Brennstoffzellen genutzt werden sollen, bilden zusammen das Thema „Systeme für die Bordstromversorgung“. Die keramische Hochtemperatur-Brennstoff- und Elektrolysezelle SOFC/SOE sowie die Niedertemperatur-elektrolyse sind weitere Themen des IEK-3, die in Abb. 90 mit der entsprechenden Kompetenzzuordnung dargestellt sind. Bei enger Fokussierung auf konkrete Anwendungsfelder ist es dem IEK-3 möglich, diese FuE-Schwerpunkte jeweils von den grundlegenden Phänomenen bis zur Verfahrenstechnik des Gesamtsystems mit Teams überkritischer Größe und mit Untersuchungseinrichtungen bis zum Technikumsmaßstab zu bearbeiten. Dabei werden auch Synergien zwischen den Fachdisziplinen genutzt. Als strategische Orientierungsbasis dienen den technologieorientierten Fachabteilungen des IEK-3 die Analyse- und Studienergebnisse der technikbasierten Verfahrens- und Energiesystemanalyse, die zukunftsweisende Prozesse und Energiesysteme analysiert, konzipiert, auslegt, bewertet und vergleicht. Die diesbezügliche Herangehensweise berücksichtigt technische, ökonomische sowie ökologische Aspekte und führt zu quantitativen Aussagen über die Leistungsfähigkeit und Nachhaltigkeit eines Energiesystems. Darüber hinaus werden die anwendungsorientierten FuE-Arbeiten von grundlegender Forschung zur Auflösung von Strukturwirkungsbeziehungen mittels gezielt ausgewählter und weiterentwickelter Analysemethoden begleitet. Schwerpunkt dieser Aktivitäten liegt im Bereich des Physikochemischen Brennstoffzellenlabors, das synergetisch mit den technologieorientierten Fachabteilungen des Instituts zusammenarbeitet.

Jülich stellt im Brennstoffzellen- und Elektrolysebereich die größte institutionelle Forschungsmannschaft in Europa mit etwa 150 Mitarbeitern. Davon ist etwa die Hälfte im Bereich der SOFC/SOE tätig, wovon wiederum etwa 1/5 auf die entsprechenden Aktivitäten des IEK-3 entfallen. In der SOFC/SOE sind drei weitere Institute tätig. Das IEK-1 ist zuständig für die Werkstoffherstellung, das IEK-2 ist verantwortlich für die Werkstoffprüfung und Stahlforschung, das IEK-9 bearbeitet die Elektrochemischen Grundlagen und das Zentralinstitut für Engineering und Technologie (ZEA-1) kümmert sich um den Stackbau. Mit 86 der etwa 101 Mitarbeiter des IEK-3 (ohne Gastwissenschaftler, studentische Hilfskräfte und Auszubildende) werden die technologische Entwicklung bei den Niedertemperatur-Brennstoffzellen und Elektrolyseuren sowie die Energiesystemanalyse vorangetrieben. Für die Arbeitsfelder des IEK-3 gibt es einen Koordinator, der als Ansprechpartner für übergreifende Themen gerne bereitsteht.



**Ständiger Vertreter des
Institutsleiters und Wissen-
schaftlicher Koordinator**

Dr.-Ing. Bernd Emonts

Tel.: 02461-61-3525

e-mail: b.emonts@fz-juelich.de

6.2 Abteilungskompetenz im Überblick

Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen

Brenngaserzeugung und Systeme

Arbeitsgebiete, Leistungsangebote

Die HT-PEFC wird von der Elektrode bis zum Stack mit in- und externen Partnern bearbeitet. Neue Elektrodenstrukturen und -präparationsmethoden werden erarbeitet. MEAs werden hergestellt und elektrochemisch charakterisiert. Darüber hinaus werden die Strukturwirkungsbeziehungen von MEA-Komponenten untersucht. Metallische und graphitische Bipolarplatten werden entwickelt und in Zellen und Stacks getestet. Umfassende Modellierungs- und Simulationsaktivitäten von Komponenten- bis Stack-Ebene unterstützen deren Entwicklung. Im Bereich der NT-PEFC werden Zweiphasen-Strömungsphänomene experimentell und theoretisch untersucht.

H₂, hergestellt aus handelsüblichen Kraftstoffen, ermöglicht den frühen Einsatz der Brennstoffzellentechnik. Die Arbeiten sind auf die Reformierung im Leistungsbereich zwischen 3 und 50 kW_{el} von Mitteldestillaten – Kerosin, Diesel, Heizöl – und dieselähnlichen Biokraftstoffen fokussiert. Als Brennstoffzellen werden bei der Entwicklung von Bordstromversorgungssystemen im mobilen Bereich eigene HT-PEFC-Stacks zwischen 5 und 10 kW_{el} bevorzugt. Darüber hinaus kommen PEFC- und SOFC-Systeme mit Dieselreformierung in Kooperation mit Projektpartnern und im Rahmen der Systemanalysen in Betracht.

Anlagen, Verfahren, Methoden

Einrichtungen

- Teststände zur elektrochemischen Charakterisierung von MEAs
- Teststände zur elektrochemischen Untersuchung von Stacks bis 5 kW_{el}
- Apparaturen zur Herstellung von Gasdiffusionselektroden

Modelle

- Simulationsmodelle zur Beschreibung von Stoff-, Ladungs- und Wärmetransportprozessen in Zellen und Stacks
- Lattice Boltzmann Simulationstools
- CFD-Simulationstools (OpenFOAM und kommerzielle Tools)

Einrichtungen

- Teststände zur Untersuchung von Reaktoren und Gesamtsystemen
- Teststände zum Screening und zur Untersuchung von Katalysatoren hinsichtlich Aktivität und Selektivität
- Analysegeräte zur Konzentrationsbestimmung (GC, GC/MS, NDIR, FTIR) von Reaktionsgasen
- Apparaturen zur fraktionellen Destillation von Kraftstoffen

Modelle

- CFD-Simulationsprogramme zur Auslegung von Reaktoren und Systemen

Ansprechpartner



Prof. Dr. Werner Lehnert
Tel.: 02461-61-3915
e-mail: w.lehnert@fz-juelich.de



Prof. Dr.-Ing. Ralf Peters
Tel. 0261-61-4260
e-mail: ra.peters@fz-juelich.de

Festoxid-Brennstoffzellen

Elektrochemie Elektrolyse

Arbeitsgebiete, Leistungsangebote

Wissenschaftlich-technische Kernkompetenz ist die Entwicklung und Optimierung von Stacks und Systemen für Hochtemperatur-Brennstoffzellen sowie für die Hochtemperatur-Elektrolyse. Hierzu werden Stacks sowie Anlagen und Anlagenkomponenten konzipiert, ausgelegt, konstruiert, aufgebaut und getestet. Zur Optimierung und Konzeptbewertung werden parallel zu den experimentellen Untersuchungen thermomechanische und verfahrenstechnische Modelle entwickelt. Schwerpunkte sind elektrochemische Charakterisierung von Stacks und Entwicklung, Test und Bewertung neuer Anlagen-, Steuerungs- und Regelungskonzepte auch gemeinsam mit der Industrie.

Fortschrittliche PEM-Elektrolyseure ermöglichen die wirtschaftliche H₂-Erzeugung aus regenerativen Stromüberschüssen. Unterstützt von Projektpartnern aus Forschung und Industrie werden Membran-Elektroden-Einheiten (MEAs) entwickelt, die mit weniger Platingruppemetallen für die katalytischen Reaktionen bei vergleichbaren Leistungen auskommen oder die vollständige Substitution dieser Metalle erlauben. Neue Membrantypen sollen geplanten Großsystemen zu ausreichender Stabilität verhelfen. Weitere Arbeitsthemen sind die Identifikation kostengünstiger Materialien und die Entwicklung von reproduzierbaren Herstellverfahren für die MEA-Entwicklung und Produktion.

Anlagen, Verfahren, Methoden

Teststände

- Charakterisierung: Hochtemperatur-Wärmeaustauscher bis 850 °C @ 200 m³ Luft/h
- Charakterisierung: Reformier- und Nachverbrenner für Stacks bis 5 kW
- Charakterisierung: 20 kW-System
- Elektrochemische Charakterisierung: Stacks von 100 W bis 10 kW im Brennstoffzellen- und Elektrolysebetrieb

Modelle

- CFD/FEM-Modelle zur Ermittlung der Strömungs- und Spannungsverteilung in Stacks und Anlagenkomponenten
- Simulationsmodelle zur Auslegung von Brennstoffzellenanlagen

Einrichtungen

- Teststände zur Charakterisierung von Elektrokatalysatoren (Rotierende-Scheiben-Elektrode)
- Teststände zur Charakterisierung von Membranen (Gaspermeationsmessungen, Fluor-Release-Rate)
- Teststände zur elektrochemischen Charakterisierung von CCMs
- Teststand zur elektrochemischen Untersuchung von bis 30 kW_{el}
- Beschichtungsanlage (Rolle-zu-Rolle) zur kontinuierlichen Elektrodenherstellung

Ansprechpartner



Prof. Ludger Blum
Tel.: 02461-61-6709
e-mail: l.blum@fz-juelich.de



Dr. Marcello Carmo
Tel. 0261-61-5590
e-mail: m.carmo@fz-juelich.de

Verfahrenstechnik Elektrolyse

Physikochemisches Brennstoffzellenlabor

Arbeitsgebiete, Leistungsangebote

Ausgehend von neuen Konzeptideen werden Elektrolysestacks und -systeme entwickelt und modelliert. Zielsetzung ist die Verbesserung von Effizienz, Leistungsdichte und Haltbarkeit bei vermindertem Materialeinsatz. Die Validierung erfolgt über Komponententests bis hin zur Charakterisierung ganzer Stacks und Systeme. Mit Projektpartnern werden Beschichtungen, Stackkomponenten, Stacks und Systeme optimiert und charakterisiert. Im Zusammenspiel mit den im Technikumsmaßstab automatisierten Herstellungsmethoden stellen diese Arbeiten eine wichtige Brückenfunktion zwischen Wissenschaft und Technik dar.

Bei fortschreitender, technischer Entwicklung neuer zukunftsweisender Energiesysteme gewinnen wissenschaftliche Arbeiten zum Verständnis grundlegender Phänomene zunehmend an Bedeutung. Daher befasst sich die Abteilung mit der umfassenden Auflösung von Material-/Struktureigenschaften sowie physiko- und elektrochemischen Prozessen. Dabei kommen bildgebende, physikalische und ortsaufgelöste Analysemethoden zum Einsatz. Diese sind darauf ausgerichtet, die chemischen und strukturellen Veränderungen, die mechanische und thermodynamische Eignung sowie die fluiddynamische und elektrochemische Leistungsfähigkeit zu bestimmen.

Anlagen, Verfahren, Methoden

Einrichtungen

- Teststände zur elektrochemischen Untersuchung von Elektrolyseuren bis 100 kW_{el} und Brennstoffzellen (DMFC)
- Visualisierungstests
- Korrosionsprüfstände, zur Evaluation von Beschichtungen
- Untersuchung von Ionenauschermaterialien mit gezielt verunreinigten Medien
- Laserbeschichtung zur lokalen Modifikation von Oberflächen
- Roboteranlage zur reproduzierbaren Herstellung von Stacks

Modelle

- Beschreibung des Stoff-, Ladungs- und Wärmetransports

Einrichtungen und Methoden

- Bildgebende Analysemethoden: Hochauflösendes Rasterelektronenmikroskop (H-REM) mit EDX-Analytik, Lichtmikroskope, konfokales Laserscanmikroskop
- Ortsaufgelöste Analysemethoden: Segmentierte Zellentechnologie (SCT), Magnetotomographie und Massenspektroskopie (SRMS)
- Physikalisch-chemische Analysemethoden: Thermogravimetrische Analyse (TG, TGA), dynamische Differenzkalorimetrie (DSC), Kontaktwinkelmessung, KF-Analytik, Impedanzspektroskopie/CV, RDE, Klimaschrank, Zugprüfmaschine mit Klimakammer, BET und Standardporosimeter, Partikelgrößen-Meßgerät

Ansprechpartner



Dr.-Ing. Martin Müller
Tel.: 02461-61-1859
e-mail: mar.mueller@fz-juelich.de



PD Dr. Carsten Korte
Tel.: 02461-61-9035
e-mail: c.korte@fz-juelich.de

Verfahrens- und Systemanalyse

Arbeitsgebiete, Leistungsangebote

Auswahl, Entwicklung und Implementierung zukünftiger Energiesysteme erfordern gesamtsystemische Ansätze, die hinsichtlich Nachhaltigkeit und Wirtschaftlichkeit analysiert und bewertet werden. Grundlage dafür sind dafür sind technoökonomische Vergleiche konkurrierender Technologien der Energieumwandlung und -speicherung. Durch die breite experimentelle Basis und das weiterreichende Modeling im IEK-3 können Energiesysteme konzipiert, modellmäßig beschrieben und mit konkurrierenden Techniken realitätsnah verglichen sowie Entwicklungspotenziale und Defizite aufgezeigt werden. Studien für die Industrie werden auch mit Informationsschutz durchgeführt und Empfehlungen für die Politik auf neutraler Basis erarbeitet.

Anlagen, Verfahren, Methoden

Methoden

- Energiesystemmodellierungen mittels beispielsweise „METIS“ (Models for Energy Transformation an Integration Systems) einer Python- und Datenbank-basierten am IEK-3 entwickelten Modellumgebung
- Potenzialanalysen von erneuerbaren Energien im europäischen Gesamtsystem
- Dyn. Simulation (Python, Matlab/ Simulink)
- Well-to-wheel Analysen (Tab.-Kalkulation)
- Technologie-Benchmarking
- Ökonomische Bewertungen (SWOT, WACC, CAPM, Monte Carlo Simulation)
- Prozessanalyse und -optimierung (Fluent, AspenPlus)

Ansprechpartner



Dr.-Ing. Martin Robinius
Tel.: 02461-61-3077
e-mail: m.robinius@fz-juelich.de

6.3 Publikationen, Technologietransfer und Ressourcen

Die wissenschaftlich-technischen Arbeitsergebnisse des IEK-3 wurden sowohl in einschlägigen Journalen veröffentlicht als auch auf internationalen wie nationalen Konferenzen zum Arbeitsthema des Instituts einer interessierten Fachwelt präsentiert. In Journalen mit hohem Einfluss d.h. hohem Impact-Faktor konnten die Wissenschaftler des IEK-3 insbesondere 2015 vier Artikel veröffentlichen (siehe Tab. 10).

Journal	Impact-Faktor	2015	2016
Energy & Environmental Science	25,427	1	0
Progress in Energy & Combustion Science	16,784	1	0
American Chemical Society	13,038	1	0
Nanoscale	7,760	1	0
Power Sources	6,333	2	12
Chemistry – A European Journal	5,771	1	0
Applied Energy	5,746	1	2
Chemical Engineering Journal	5,310	0	2
Electrochimica Acta	4,803	2	2
Energy Conversion and Management	4,801	0	1
Electrochemistry Communications	4,569	1	0
Energy	4,292	0	2
Dalton Transactions	4,177	0	1
Physical Chemistry	4,173	2	0
Greenhouse Gas Control	4,064	1	1
Colloid and Interface Science	3,782	1	0
Computer Physics Communications	3,635	1	0
Hydrogen Energy	3,205	12	6
Electrochemical Society	3,014	10	7
Magnetic Resonance	2,889	0	1
Electroanalytical Chemistry	2,822	1	0
Materials	2,728	0	1
Energy Technology	2,557	0	1
Energy Research	2,529	0	1
Solid State Ionics	2,380	1	0
Applied Electrochemistry	2,223	1	0
Energies	2,077	0	1
Fuel Cells	1,769	2	3
Computing in Science and Engineering	1,361	0	1
Review of Scientific Instruments	1,336	1	0
Chemie-Ingenieur-Technik	0,798	2	0
Advanced ElectronicMaterials	keine Angabe	1	0

Tab. 10: Publikationsleistung des IEK-3 in referierten Journalen

Daneben wurden weitere Journale adressiert, die im Hinblick auf ihre thematische Ausrichtung über eine große Übereinstimmung mit den Arbeitsschwerpunkten des IEK-3 verfügen. Dies führte zu maximalen, jährlichen Veröffentlichungsleistungen in den drei favorisierten Journalen, die zwischen 6 bis 12 Artikel pro Journal und Jahr lagen. Die

jährliche Gesamtpublikationsleistung des IEK-3 in referierten Journalen betrug 47 Artikel in 2015 und 45 Artikel in 2016 (siehe Tab. 11).

Insgesamt beteiligten sich die Wissenschaftler des IEK-3 in 2015 mit 45/9 und 2016 mit 53/19 Vorträgen/Postern an nationalen und internationalen Konferenzen. Die wichtigsten Konferenzen mit IEK-3-Beteiligungen waren 2015 das 228th ECS Meeting in Phoenix, USA mit 5 Vorträgen und die ECS Conference on the Electrochemical Energy Conversion & Storage in Glasgow, UK mit 4 Vorträgen. 2016 beteiligte sich das IEK-3 mit jeweils 7 Beiträgen an der 21th WHEC in Zaragoza, Spanien, am 12th European SOFC & SOE Forum in Luzern, Schweiz und am 13th Symposium for Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation in Lausanne, Schweiz. Außerdem beteiligte sich das IEK-3 mit 5 Beiträgen am 230th ECS Meeting in Honolulu, USA. Auf zahlreichen weiteren Fachkonferenzen im In- und Ausland leistete das IEK-3 mit Einzelbeiträgen aus den wissenschaftlichen Fachabteilungen seinen spezifischen Beitrag.

Darüber hinaus wurden im Berichtszeitraum 2015 und 2016 13 Doktorarbeiten in den FuE-Schwerpunkten SOFC (3), HT-PEFC (2), BGS (3), PEM-EL (3) und BAT (2) sowie vier Dissertationen zur Bewertung von zukunftsweisenden Energiesystemen fertiggestellt (siehe Tab. 11). Darüber hinaus prüfte Professor Stolten 2015 vier weitere Promotionsvorhaben externer Doktoranden erfolgreich.

Jahr		2015	2016
Publikationen	Referierte Journale ¹⁾	47	45
	Bücher und Journale	19	10
	Aufsatz in einem Buch	15	17
	Dissertationen ²⁾	9	8
Technologie-transfer	Laufende Drittmittelprojekte	36	30
	HGF-Initiativen & Fonds	3	3
	Patentanmeldungen	7	6
	Patenterteilungen	3	8
Ressourcen³⁾	Personal (PoF ⁴⁾ /Drittmittel)	112 (92/20)	115 (98/17)
Erläuterungen	¹⁾ nach ISI-Zitationsindex ²⁾ Interne Doktoranden ³⁾ Angaben in PJ/a ⁴⁾ PoF: Programmorientierte Förderung		

Tab. 11: Kerndaten des IEK-3 für 2015 und 2016

Zur Gewährleistung eines substanziellen Wissens- und Technologieaustauschs beteiligt sich das IEK-3 an zahlreichen nationalen und internationalen FuE-Projekten (2015: 36; 2016: 30), die von der Europäischen Kommission (EC; 2015: 5; 2016: 4), den Bundesministerien für

Wirtschaft (BMWi; 2015: 8; 2016: 7), für Bildung und Forschung (BMBF; 2015: 5; 2016: 3) und verschiedenen Ministerien der Länder Nordrhein-Westfalen und Bayern (2015: 5; 2016: 3) sowie der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG; 2015: 5; 2016: 5) finanziell gefördert oder von der Wirtschaft (2015: 6; 2016: 7) finanziert wurden (siehe Tab. 11). Dabei übernahm das IEK-3 in einigen Projekten auch die Leitung und Koordination.

Aus der Zusatzförderung der Helmholtz-Gemeinschaft wurden während des zweijährigen Berichtszeitraums insgesamt zwei größere FuE-Projekte sowie eine Projektbeantragung unterstützt. Aus den HGF-Ausbauinvestitionen erhielt das IEK-3 Mittel zum Aufbau einer MW-Elektrolyseanlage als ein Jülicher Baustein für zukünftige Power-to-Gas-Prozesse des zentrenübergreifenden Energy Lab 2.0. Die Antragsphase zur Vorbereitung einer HGF-Initiative „Stadtforschung“ wurde von dem eigens eingesetzten Gutachtergremium nicht zur Förderung aus dem Impuls und Vernetzungsfonds (IVF) des HGF-Präsidenten empfohlen. Im Rahmen der von acht HGF-Zentren getragenen Initiative des Forschungsbereichs Energie konnte das IEK-3 weitere HGF-Mittel aus dem IVF für die technoökonomische Bewertung eines zukunftsweisenden „Energie Systems 2050“, das sich u.a. auf Energie- und Rohstoffpfade mit Wasserstoff abstützt, einwerben. Darüber hinaus konnte das IEK-3 zur finanziellen Unterfütterung erfolgversprechender Innovationen mit Kommerzialisierungsaussichten zusätzliche Mittel für Geräteinvestitionen aus dem Jülicher Technologietransfer-Fonds erhalten. Weitere Bausteine zum geordneten Technologietransfer sind die zahlreichen Patentanmeldungen (2015: 7, 2016: 6) und Patenterteilungen (2015: 3, 2016: 8) im Berichtszeitraum (siehe Tab. 11).

Das IEK-3 beschäftigte im Berichtszeitraum zwischen 112 (2015) und 115 (2016) Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, die zum einen aus Mitteln der Programmorientierten Förderung (PoF) der Helmholtz Gemeinschaft (HGF) und zum anderen aus Drittmitteln finanziert wurden (siehe Tab. 11). Für den zugrundeliegenden Berichtszeitraum war im Gegensatz zu den Jahren zuvor neben den Teilzeitbeschäftigten ein nennenswerter Teil des IEK-3-Personals weniger als ein Jahr angestellt, so dass sich die effektive Personalkapazität in 2015 auf 96 PJ/a und in 2016 auf 94 PJ/a belief.

6.4 Gremienarbeit

Die national wie international anerkannte Kompetenz des IEK-3 auf dem Gebiet der Brennstoffzellen- und Wasserstofftechnik schlägt sich auch in der Repräsentanz und Mitarbeit von IEK-3-Wissenschaftlern in nationalen und internationalen Gremien nieder. Die Wirkung zahlreicher Wissenschaftler des IEK-3 in leitenden Positionen für das Technology Collaboration Programme on Advanced Fuel Cells der International Energy Agency (IEA) verleiht dem IEK-3 eine hohe internationale Sichtbarkeit. Auf nationaler Ebene ist Professor Stolten Vorstands- und Beiratsmitglied des VDI-GVC Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen und wirkt für ProcessNet als Vorsitzender der Fachgruppe Energieverfahrenstechnik und als Mitglied des Beirats mit. Eine Zusammenstellung der Gremienarbeiten der IEK-3-Mitarbeiter ist im Folgenden aufgelistet und erläutert:

Technology Collaboration Programme on Advanced Fuel Cells/Advanced Fuel Cells Implementing Agreement der International Energy Agency

seit 2000, Prof. D. Stolten

Leiter der Deutschen Delegation im Executive Committee

seit 2002, Prof. D. Stolten

Stellvertretender Vorsitzender des Executive Committee

seit 2009, Dr. R.C.Samsun

Mitglied des Executive Committee

seit 2011, Prof. D. Stolten

Vorsitzender des Executive Committee

seit 2011, Prof. D. Stolten

Operating Agent für Annex 36 „Systems Analysis“

seit 2011, Dr. R.C. Samsun

Mitglied des Annex 36 „Systems Analysis“

seit 2013, Prof. L. Blum

Mitglied des Annex 32 „Solid Oxide Fuel Cells“

seit 2014, Prof. S. Beale

Operating Agent für Annex 37 „Modeling of Fuel Cell Systems“

seit 2014, J. Mergel

Operating Agent für Annex 30 „Electrolysis“

seit 2014, Prof. D. Stolten, Prof. L. Blum, Dr. M. Carmo, Dr. W. Lüke, Dr. M. Müller

Mitglieder des Annex 30 „Electrolysis“

seit 2014, Prof. W. Lehnert

Mitglied des Annex 31 „Polymer Electrolyte Fuel Cells“

seit 2014, Dr. T. Grube

Mitglied des Annex 34 „Fuel Cells for Transportation“

seit 2014, Dr. M. Müller

Mitglied des Annex 35 „Fuel Cells for Portable Applications“

seit 2014, Prof. L. Blum, Dr. D. Fritz, D. Froning, Prof. A. Kulikovskiy, Prof. W. Lehnert, Dr. U. Reimer

Mitglieder des Annex 37 „Modeling of Fuel Cell Systems“

Institute of Mechanical Engineering (IMechE), Vereinigtes Königreich

seit 1980, Prof. S. Beale

Mitglied

American Society of Mechanical Engineers (ASME), USA

seit 1981, Prof. S. Beale

Mitglied

Professional Engineers Ontario, Kanada

seit 1985, Prof. S. Beale

Mitglied

Arbeitsgemeinschaft Elektrochemischer Forschungsinstitutionen (AGEF)

seit 1990, Dr. K. Wippermann

Mitglied

seit 2000, Prof. D. Stolten

Mitglied

seit 2010, J. Mergel

Mitglied des Vorstands

Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)

seit 1990, Dr. K. Wippermann

Mitglied der GDCh und Mitglied der Fachgruppe Angewandte Elektrochemie der GDCh

seit 1999, Prof. W. Lehnert

Mitglied

Deutsche Physikalische Gesellschaft e. V. (DPG)

seit 1993, Prof. W. Lehnert

Mitglied

seit 2010, Dr. U. Reimer

Mitglied des Arbeitskreises Energie

Deutsche Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie (DBG)

seit 1993, PD Dr. C. Korte

Mitglied

Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), USA

seit 1996, Prof. S. Beale

Mitglied

International Society of Electrochemistry (ISE), Switzerland

seit 1998, Prof. W. Lehnert

Mitglied

seit 2005, Prof. A. Kulikovskiy

Mitglied

Electrochemical Society (ECS), USA

seit 1999, Prof. W. Lehnert

Mitglied

seit 2005, Prof. A. Kulikovskiy

Mitglied

Verein Deutscher Ingenieure (VDI)

seit 1999, Prof. W. Lehnert

Mitglied

seit 2013, Dr. T. Grube

Mitglied

Gesellschaft für Informatik

seit 2002, D. Froning

Mitglied

Gesellschaft für Informatik – Arbeitskreis „Numerische Simulation“

seit 2015, D. Froning

Mitglied

ProcessNet Fachgruppe Energieverfahrenstechnik

seit 2003, Prof. D. Stolten

Mitglied

seit 2006, Prof. D. Stolten

Stellvertretender Vorsitzender

seit 2008, Prof. D. Stolten

Vorsitzender

seit 2012, Prof. R. Peters

Mitglied des Beirats

Deutscher Wasserstoff- und Brennstoffzellen-Verband (DWW)

seit 2004, Prof. W. Lehnert

Mitglied

seit 2011, Prof. D. Stolten

Vertreter des Vollmitglieds Forschungszentrum Jülich GmbH

Initiative Qualifizierung – Brennstoffzelle

seit 2005, Dr. B. Emonts

Mitglied des Führungskreises

Fachausschuß BREZEL der VDI-Gesellschaft

seit 2005, Prof. L. Blum

Mitglied des Fachausschusses

WILEY-VCH Zeitschrift “Fuel Cells“

seit 2006, Prof. D. Stolten

Mitglied des Beirats

Nationale Organisation Wasserstoff- und Brennstoffzellentechnologie GmbH (NOW)

2008 – 2013, 2015 – 2016 Prof. D. Stolten

Mitglied des Beirats und Vertreter des Interessenbereichs HGF/BMBF

N.ERGHY im FCH Undertaking der EU

seit 2008, Prof. D. Stolten

Vertreter des Vollmitglieds Forschungszentrum Jülich GmbH

seit 2008 – 2012, Prof. R. Peters

Mitglied des Fachausschusses „AA Transport und Betankungsinfrastruktur“

seit 2013, Prof. R. Peters

Mitglied des Arbeitskreises „Transport Säule“

ProcessNet Fachgemeinschaft SuPER

seit 2008, Prof. D. Stolten

Mitglied des Lenkungskreises

ASME K-10 Heat Transfer Technical Committee (heat transfer equipment)

seit 2008, Prof. S. Beale

Mitglied

Computational Thermal Sciences Journal, begellhouse

seit 2008, Prof. S. Beale

Mitglied des Redaktionsausschusses

Forschungsverbund Erneuerbare Energien (FVEE)

seit 2009, Dr. B. Emonts

Vertreter des Mitglieds Forschungszentrum Jülich GmbH für Brennstoffzellen

h2-netzwerk-ruhr

seit 2009, Dr. B. Emonts

Mitglied des Beirats

seit 2012, Dr. B. Emonts

Stellvertretender Vorsitzender des Beirats

seit 2015, Dr. B. Emonts

Vorsitzender des Beirats

ASME K-20 Heat Transfer Technical Committee (computational heat transfer)

seit 2010, Prof. S. Beale

Mitglied

ASME Research Committee on Energy-Water Nexus

seit 2010, Prof. S. Beale

Mitglied

ASME Research Committee on Sustainable Products and Processes

seit 2010, Prof. S. Beale

Mitglied

Thermopedia Journal, begellhouse

seit 2010, Prof. S. Beale

Mitglied des Redaktionsausschusses

Max Planck Institute for Dynamics of Complex Technical Systems Magdeburg

seit 2011, Prof. D. Stolten

Mitglied des Wissenschaftlichen Beirats

Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. (DECHEMA)

seit 2011, Prof. D. Stolten

Mitglied

VDI-GVC Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen

seit 2011, Prof. D. Stolten

Mitglied des Vorstands und des Beirats

VDI-Vieweg Verlag – VDI-Fachbuch, Berlin

seit 2011, Prof. R. Peters

Mitglied des Beirats

Netzwerk Brennstoffzelle und Wasserstoff NRW

seit 2012, Dr. B. Emonts und Dr. T. Grube

Vorsitzende der Plattform Wasserstoff und der Expertengruppe H₂-System

Wuppertal Institut für Klima, Umwelt, Energie

seit 2012, Prof. D. Stolten

Mitglied des Aufsichtsrats

International Association of Hydrogen Energy (IAHE)

seit 2012, Prof. D. Stolten

Vizepräsident des Vorstands

seit 2012, Dr. B. Emonts

Mitglied

Applied Energy Journal, Elsevier
seit 2012, Prof. D. Stolten
Mitglied des Redaktionsausschusses

seit 2015 – 2016, Prof. D. Stolten
Fachredakteur

Institute of Electrochemistry and Energy Systems der Bulgarischen Akademie der Wissenschaften
seit 2012, Prof. W. Lehnert
Mitglied des Beirats

Clean Power Net
seit 2012, Dr. M. Müller
Mitglied

Hydrogen Power Storage & Solutions East Germany (HYPOS)
seit 2013 - 2015, Prof. D. Stolten
Mitglied des Vereinsvorstands

VDMA Arbeitsgemeinschaft Brennstoffzellen - PG HT-BZ (SOFC)
seit 2013, Prof. L. Blum
Mitglied

Journal of Hydrogen Energy, Elsevier
seit 2014, Prof. D. Stolten
Mitglied des Redaktionsausschusses

Journal of Energy Storage, Elsevier
seit 2014, Prof. D. Stolten
Mitglied der Redaktionsleitung und des Redaktionsausschusses

TRENDS2015 - Transition to Renewable Energy Devices, Aachen
2015, Prof. D. Stolten
Konferenzleiter und Leiter des Organisationskomitees

2015, Prof. R. Peters
Stellvertretender Leiter der Konferenz und des Organisationskomitees

Projekthaus Technikbasierte Energiesystemanalyse TESYS
seit 2015, Prof. D. Stolten
Sprecher des Steering Committee

seit 2015, Dr. B. Emonts
Geschäftsstellenleiter

Profilbereich Energy, Chemical & Process Engineering (ECPE) der RWTH Aachen University
seit 2015, Prof. D. Stolten
Mitglied

JARA-Energy – Säule Processes
seit 2015, Prof. D. Stolten
Leiter des Bereichs (zusammen mit Prof. Leitner, RWTH Aachen University)

Richtlinienausschuss VDI 4657 Planung und Integration von Energiespeichern
seit 2015, Dr. P. Stenzel
Mitglied

Scientific Advisory Committee for the 12th European SOFC & SOE Forum, Switzerland
2016, Prof. D. Stolten
Mitglied

Deutsche Akademie der Technikwissenschaften e.V. (acatech)

seit 2016, Dr. M. Robinius

Mitglied der Arbeitsgruppe „Pfadabhängigkeiten und Entscheidungsstrategien“

BMWi-Forschungsnetzwerk Energie-Systemanalyse AG Modellkopplungen und Gesamtsystem

seit 2016, Dr. P. Markewitz

Arbeitsgruppensprecher

Advances Journal der Royal Society of Chemistry

seit 2016 – Dr. J. Pasel

Mitherausgeber

Verband der Elektrotechnik Elektronik Informationstechnik e. V. (VDE)

seit 2016, Dr. M. Robinius

Mitglied

Hydrogen Implementing Agreement der International Energy Agency – Task 38 Power to Hydrogen to X

seit 2016, Dr. M. Robinius

Mitglied

6.5 Beiträge zu Messen und Ausstellungen

Zur Demonstration seiner Innovationskraft und seiner FuE-Ergebnisse bieten Fachmessen und –ausstellungen ein exzellentes Umfeld mit vielseitigen Möglichkeiten der Kontaktaufnahme zu interessierten Besuchern sowie dem Informationsaustausch mit Partnern und fachnahen Experten. Im Berichtsjahr 2015 wirkte das IEK-3 an fünf Messen und Ausstellungen in Hannover, Frankfurt am Main, Glasgow, Hamburg und Stuttgart mit. Die Einzelheiten können der folgenden Auflistung entnommen werden:

2015

Hannover Messe 2015

13. - 17.04.2015, Hannover

Brennstoffzellen- und Elektroyseforschung

ACHEMA

15. - 19.06.2015, Frankfurt am Main

Forschungsbeiträge für eine nachhaltige Energiebereitstellung

ECS SOFC XIV

26. - 31.07.2015, Glasgow, Schottland

SOFC-Forschung und Technologieentwicklung

H2 expo

23. - 26.09.2015, Hamburg

Bordstromversorgung mit Brennstoffzellen für den Einsatz mit Diesel bzw. Kerosin

f-cell

12. - 14.10.2015, Stuttgart

Batteriegestützte Brennstoffzellensysteme und Elektrolyseure für die Energiespeicherung

Alljährlicher Höhepunkt ist der Gemeinschaftsstand Wasserstoff und Brennstoffzellen anlässlich der Technologiemesse in Hannover (siehe Abb. 91). 2015 präsentierte das IEK-3 die neuesten Technologieentwicklungen auf den Gebieten der Brennstoffzellen- und Elektrolyseforschung. Mit einem Reaktor aus industrieller Fertigung sowie einem HT-PEFC-Stack mit metallischen Interkonnektorplatten wurde der Entwicklungsstand bei der autothermen Reformierung und der elektrochemischen Umwandlung von Reformaten in Strom gezeigt. Daneben wurde am Beispiel eines Systems zur unterbrechungsfreien Stromversorgung (USV) die vielseitige Einsetzbarkeit der DMFC als Batterieersatz demonstriert. Aufbau und Funktion eines SOFC-Stack zur direkten Wandlung von Erdgas oder Wasserstoff wurde durch einen aufgeschnittenen Zellstapel und verschiedene Zellkomponenten einleuchtend demonstriert. Erste Ansätze für eine großtechnische Wasserstofferzeugung mittels PEM-Elektrolyse konnten durch die Demonstration einer Zelle mit etwa 1,5 m² aktiver Fläche und eines Fertigungsmusters aus der Rolle-zu-Rolle-Elektrodenfertigung des IEK-3 dem Messepublikum nahe gebracht werden. Ein Höhepunkt des Messeauftritts war der Informationsbesuch von Staatssekretär Rachel auf dem Jülicher Messestand (siehe Abb. 91, Bildmitte). Im Rahmen des sogenannten Technical Forum berichtete Herr Dr. Martin Robinius unter dem Titel „Assessment of excess power for different scenarios of wind power extension in Germany“ von seinen neuesten Analyseergebnissen beim Ausbau der deutschen Windenergienutzung. Im parallel laufenden Public Forum stellte sich Dr. Robinius den Fragen des Moderators zum Thema „Preparing the electricity market for integrating large quantities of renewable power“.



Abb. 91. Hannover Messe 2015 - Jülicher Messestand und Betreuererteam mit Staatssekretär Rachel (Bildmitte)

Einen Überblick der 2016 besuchten Veranstaltungen und thematischen Ausrichtung gibt die folgende Auflistung.

2016

10. IRES 2016

15. - 17.03.2016, Düsseldorf

Energie- und Rohstoffpfade mit Wasserstoff

Hannover Messe 2016

25. - 29.04.2016, Hannover

Brennstoffzellen- und Elektroyseforschung

ADB-Jahrestagung

2. - 5.05.2016, Frankfurt am Main

Technikbasierte Energiesystemanalyse

21th World Hydrogen Energy Conference 2016

13. – 16.06.2016, Saragossa, Spanien

Forschung für die effiziente Erzeugung und Nutzung von Wasserstoff

12th European SOFC & SOE Forum

5. - 8.07.2016, Luzern/Schweiz

Forschung für Energiewandler mit keramischem Elektrolyt

Wenn der Wind unser Gas liefert: PtG als Langzeitspeicher

16.09.2016, Düsseldorf

Nachhaltige und flexible Energiepfade mit Wasserstoff

World of Energy Solutions 2016

10. – 12.10.2016, Stuttgart

Batteriegestützte Brennstoffzellensysteme und Elektrolyseure für die großtechnische Energiespeicherung

Unter dem Motto „Engineering the Energy Future“ präsentierte sich das IEK-3 zusammen mit IEK-1 und ZEA-1 auf der Hannover Messe 2016. Das Spektrum der Exponate reichte von Zellkomponenten, Zellen und Stacks zur PEM-Elektrolyse, SOFC und HT-PEFC bis hin zu Reaktoren für die Brenngaserzeugung (siehe Abb. 92, links). Auf den zeitgleich den Messebesuchern angebotenen Foren präsentierte Herr Dr. Weißbecker sein „Spin-up“ Vorhaben mit einem Beitrag unter dem Titel „Unraveling the challenges of metallic bipolar plates for PEM fuel cells“. Auf dem Public Forum berichtete Herr Dr. Marcelo Carmo unter dem Titel „Towards the establishment of cost efficient water electrolyzers“ von den neuesten Forschungsergebnissen im Hinblick auf den sparsameren Einsatz von Edelmetallen bei den Elektrodenkatalysatoren von PEM-Elektrolyseuren (siehe Abb. 92, rechts).



Abb. 92: Hannover Messe 2016 - Jülicher Messestand und Betreuersteam (links) und Interview mit Dr. Carmo (rechts)

6.6 Anfahrtsbeschreibung

6.6.1 Mit dem PKW

Aus Richtung Köln kommend über die Autobahn A 4 (Köln - Aachen) bis Abfahrt Düren, dort rechts abbiegen in Richtung Jülich (B 56), nach etwa 10 km rechts in die L 253 abbiegen, der Beschilderung zum Forschungszentrum folgen.

Aus Richtung Aachen kommend über die Autobahn A 44 (Aachen - Düsseldorf) bis Abfahrt Jülich-West, am ersten Kreisverkehr links in Richtung Jülich, am zweiten Kreisverkehr rechts abbiegen in Richtung Düren (B 56); nach ca. 5 km links in die L 253 einbiegen, der Beschilderung "Forschungszentrum" folgen.

Vom Flughafen Düsseldorf die Autobahn A 52 (Richtung Düsseldorf/Mönchengladbach), dann die A 57 (Richtung Köln) bis Neuss-West, weiter auf der A 46 (Richtung Jüchen/Grevenbroich), dann A 44 (Richtung Aachen). Weiter wie "aus Richtung Düsseldorf kommend".

Aus Richtung Düsseldorf über die Autobahn A 44 (Düsseldorf - Aachen) kommend gibt es zwei Möglichkeiten:

1. (kürzere Strecke mit Stadtverkehr) bis Abfahrt Jülich-Ost, rechts abbiegen, auf der B55n ca. 500 m rechts abbiegen in Richtung Jülich, nach 200 m vor den Sendeanlagen links abbiegen, weiter bis zum Kreisverkehr "Merscher Höhe", dort links abbiegen, vorbei am Solar-Campus der Fachhochschule, immer geradeaus entlang der Brunnenstraße, Kreuzung Römerstraße überqueren, weiter auf der Wiesenstraße, hinter dem Kreisverkehr und dem Wohnwagenhändler links abbiegen bis zum Forschungszentrum (beschildert).
2. (längere Strecke, aber zügigere Verkehrsführung) bis Abfahrt Jülich-West, am ersten Kreisverkehr links in Richtung Jülich, am zweiten Kreisverkehr rechts abbiegen in Richtung Düren (B 56); nach ca. 5 km links in die L 253 einbiegen, der Beschilderung "Forschungszentrum" folgen.



Abb. 93: Anfahrtsplan Euregio Rheinland

Navigation: In Ihr Navigationssystem geben Sie bitte als Ziel "Wilhelm-Johnen-Straße" ein. Von dort sind es nur wenige hundert Meter zum Haupteingang; bitte beachten Sie die Be-

schilderung. Das Forschungszentrum selbst ist nicht Bestandteil des öffentlichen Straßennetzes und wird von Navigationssystemen daher nicht erkannt.

6.6.2 Mit dem Flugzeug

Flughafen Köln/Bonn: Vom Bahnhof am Flughafen entweder zum Hauptbahnhof Köln mit der S13, von dort mit dem Regional-Express zum Bahnhof Düren oder zum Bahnhof Köln-Ehrenfeld mit dem Regional-Express und von dort mit der S12 zum Bahnhof Düren. Von Düren weiter: siehe "Mit der Bahn"

Mit der Bahn **Flughafen Düsseldorf:** Vom Bahnhof am Flughafen zum Hauptbahnhof Köln und weiter zum Bahnhof Düren. Manche Züge fahren direkt durch, bei anderen muss man am Hauptbahnhof Köln umsteigen. Von Düren weiter: siehe "Mit der Bahn"

6.6.3 Mit der Bahn

Bundesbahn von Aachen oder Köln kommend bis Bahnhof Düren, von dort mit der Dürener Kreisbahn ("Rurtalbahn") bis Station "Forschungszentrum". Von dort rechts gehen, dann sind es etwa 20 Minuten zu Fuß zum Haupteingang des Forschungszentrums.



Abb. 94: Lageplan Forschungszentrum Jülich

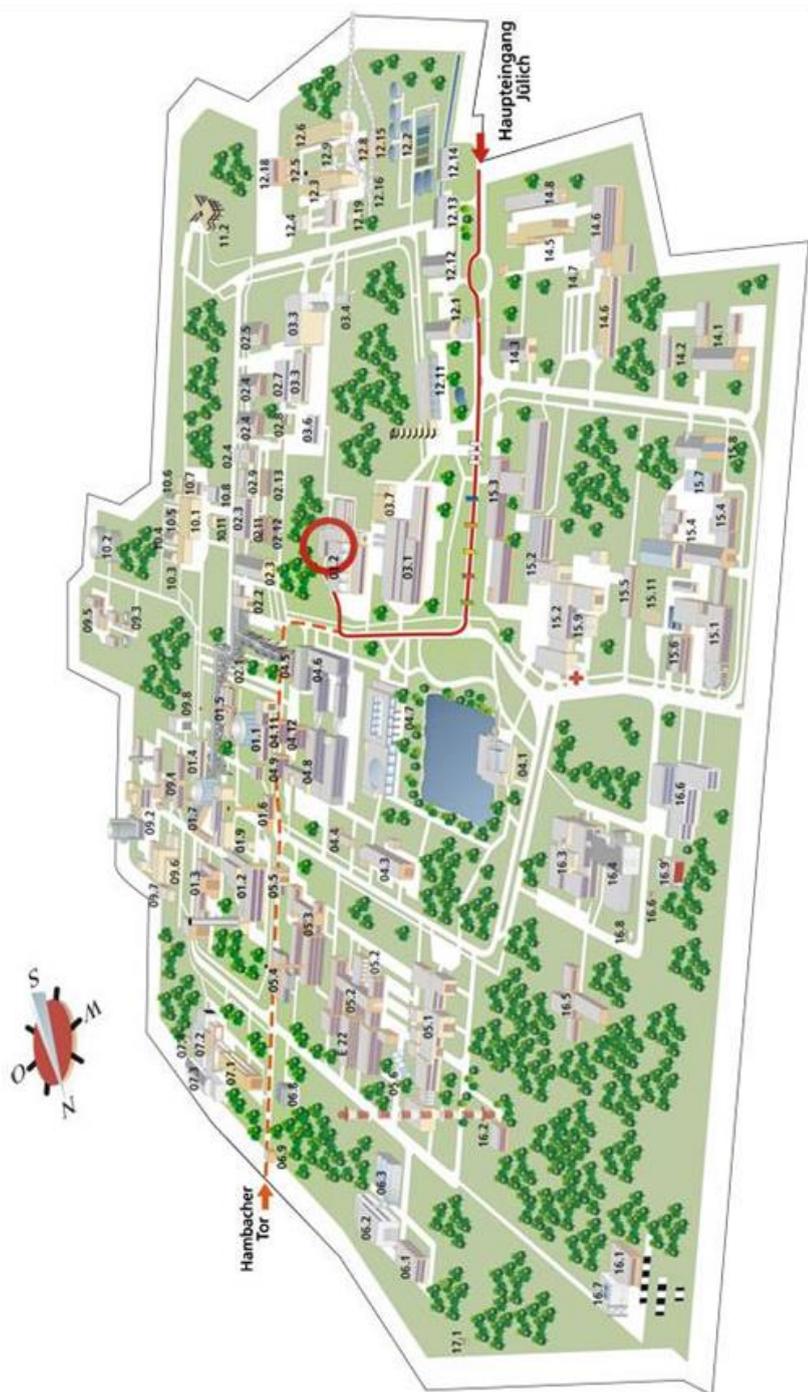


Abb. 95: Lageplan für Energie- und Klimaforschung, IEK-3: Elektrochemische Verfahrenstechnik, Helmholtz-Ring H8, Geb. 03.2

6.7 Abkürzungsverzeichnis

acatech	Deutsche Akademie der Technikwissenschaften e.V.
ACHEMA	Ausstellungstagung für chemisches Apparatewesen
ADB	Asian Development Bank
ADELHEID	NRW-Projekt "Aus dem Labor heraus in die Lüfte"
AGEF	Arbeitsgemeinschaft Elektrochemischer Forschungsinstitutionen
AGIT	Aachener Gesellschaft für Innovation und Technologietransfer mbH
APS	Atmosphärisches Plasmasprühen (engl.: atmospheric plasma spray)
ASC	Anodengetragene Zelle (engl.: Anode-Supported Cell)
ASME	Amerikanische Gesellschaft der Maschinenbau-Ingenieure (engl.: American Society of Mechanical Engineers)
ATR	Autotherme Reformierung
BAT	Batterie
BESSY	Berliner Elektronenspeicherring-Ges. für Synchrotronstrahlung m.b.H
BET	Analyseverfahren zur Größenbestimmung von Oberflächen (Brunauer-Emmett-Teller)
BEV	Batteriefahrzeug (engl.: Battery Electric Vehicle)
Bio-CH4	Biologisch erzeugtes Methan
BMBF	Bundesministerien für für Bildung und Forschung
BMWi	Bundesministerien für Wirtschaft
BOL	Betriebsstart (engl.: Beginning of Life)
BOS	Behörden und Organisationen mit Sicherheitsaufgaben
BREZEL	Expertenkomitee Brennstoffzelle des Vereins Deutscher Ingenieure (VDI)
BtL	Biomasse zu Flüssigkraftstoff (engl.: Bio-to-Liquid)
CAB	Katalytbrenner (engl.: Catalytic Burner)
CAD	Rechnerunterstütztes Konstruieren (engl. computer-aided design)
CAN	Centrum für Angewandte Nanotechnologie
CAPM	Preismodell für Kapitalgüter (engl.: capital asset pricing model)
CCM	Katalysatorbeschichtete Membran (engl.: Catalyst Coated Membrane)
CCS	CO ₂ -Abtrennung und Speicherung (engl.: Carbon Capture and Storage)
CCU	CO ₂ -Abtrennung und Nutzung (engl.: Carbon Capture and Utilisation)
CFD	Rechnergestützte Fluidodynamik (engl.: Computational Fluid Dynamics)
CIGS	Kupfer-Indium-Gallium-Deselenid (engl.: copper indium gallium selenide)
CPE	Konstantphasenelement (engl.: Constant Phase Element)
CS-Design	Kassettdesign (engl.: Cassette Design)
CV	Cyclovoltametrie
CVD	Gasphasenabscheidung (engl.: Chemical Vapour Deposition)
DBG	Deutsche Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie
DC	Gleichstrom (engl.: Direct Current)
DFG	Deutsche Forschungsgemeinschaft
DLR	Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt
DMC	Dimethylcarbonat
DME	Dimethylether
DMFC	Direkthethanol-Brennstoffzellen (engl.: Direct Methanol Fuel Cell)
DPG	Deutsche Physikalische Gesellschaft e. V.
DRT	Verteilungsfunktion der Relaxationszeiten (engl.: Distribution of Relaxation Times)
DSC	Differenzthermoanalysator (engl.: Differential Scanning Calorimeter)

DWV	Deutscher Wasserstoff- und Brennstoffzellen-Verband
EBSO	Elektrodenbeugungsverfahren
EC	Ethylencarbonat
ECPE	Profilbereich Energie, Chemische und Verfahrenstechnik der RWTH Aachen (engl.: Energy, Chemical & Process Engineering)
ECS	Elektrochemische Gesellschaft (engl.: Electrochemical Society)
EDX	Energiedispersive Röntgenspektroskopie (engl.: Energy-Dispersive X-ray Spectroscopy)
EEL	Abteilung Elektrochemie Elektrolyse
EIS	Elektrochemische Impedanzspektroskopie
EOL	Lebensende (engl.: End of Life)
EU	Europäische Union
EXIST	Förderprogramm des BMWi zur Existenzgründung aus der Wissenschaft
FCGEN	EU Projekt für Brennstoffzellenbasierte Stromerzeugung (engl.: Fuel Cell Based Power Generation)
FCV	Elektrofahrzeug mit Brennstoffzellen (engl.: Fuel Cell Electric Vehicle)
FLEXSIM	NRW Projekt für ein flexibles Simulationspaket für Mehrphasenströmung in Brennstoffzellen
FTIR	Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometrie (engl.: Fourier-transform infrared spectroscopy)
FT	Fischer-Tropsch
FVEE	Forschungsverbund Erneuerbare Energie
FZJ	Forschungszentrum Jülich GmbH
GC/MS	Gaschromatograph gekoppeltes Massenspektrometer
GDC	Gadolinium-dotierte Ceroxid
GDCh	Gesellschaft Deutscher Chemiker
GDL	Gasdiffusionsanlage
GFZ	Deutsches GeoForschungsZentrum
GIZ	Deutsche Gesellschaft für internationale Zusammenarbeit GmbH
HDH	Hydriert und Dehydriert (Behandlungsprozess für Titanpulver)
HEV	Hybridelektrisches Fahrzeug mit Verbrennungsmotor (engl.: Hybrid Electric Vehicle)
HGF	Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren
HM-RDE	Rotierende Platinscheibenelektrode mit hängendem Meniskus (engl.: Hanging Meniscus Rotating Disk Electrode)
H-REM	Hochauflösendes Rasterelektronenmikroskop
HT-PEFC	Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen
HV-	Hochvolt-
HYPOS	Projekt des BMBF für eine Wasserstoffinfrastruktur (engl.: Hydrogen Power Storage & Solutions East Germany)
HZB	Helmholtz-Zentrum Berlin
IAHE	Internationale Organisation für Wasserstoffenergie (engl.: International Association of Hydrogen Energy)
IEA	Internationale Energieagentur (engl.: International Energy Agency)
IEEE	Institut der Elektro- und Elektronikingenieure (engl.: Institute of Electrical and Electronics Engineers)
IEK-1	Institut für Energie- und Klimaforschung - Werkstoffsynthese und Herstellungsverfahren
IEK-2	Institut für Energie- und Klimaforschung - Werkstoffstruktur und -eigenschaften
IEK-3	Institut für Energie- und Klimaforschung - Elektrochemische Verfahrenstechnik

IEK-9	Institut für Energie- und Klimaforschung - Grundlagen der Elektrochemie
IMechE	Institution für Maschinenbau-Ingenieure (engl.: Institution of Mechanical Engineers)
IQ-BZ	Initiative Qualifizierung Brennstoffzelle
IRES	Internationale Konferenz für erneuerbare Energiespeicherung (engl.: International Renewable Energy Storage Conference)
ISE	Internationale Gesellschaft für Elektrochemie (engl.: International Society of Electrochemistry)
IVF	Impuls- und Vernetzungsfonds der HGF
JARA	Jülich Aachen Forschungsallianz (engl.: Jülich Aachen Research Alliance)
JCNS	Jülicher Zentrum für Neutronenforschung (engl.: Jülich Centre for Neutron Science)
JESS	Gemeinsame Europäische Sommerschule (engl.: Joint European Summer School)
JSC	Jülicher Großrechnerzentrum (engl.: Jülich Supercomputing Centre)
JuLab	Jülicher Schülerlabor
JULABOS	Jülicher Softwaretool für eine Lattice-Boltzmann Simulation
JURECA	Jülicher Großrechnerforschung für Exascale-Cluster (engl.: Jülich Research on Exascale Cluster Architectures)
JUROPA	Jülicher Großrechnerforschung für Petaflop-Architekturen (engl.: Jülich Research on Petaflop Architectures)
KF	Bestimmung des Wassergehalts mittels Karl-Fischer-Methode
LiBs	Lithiumionenbatterien
LLZO	Lithium-Lanthan-Zirconat
LNG	Flüssigerdgas (engl.: Liquefied Natural Gas)
LOHC	Flüssige organische Wasserstoffträger (engl.: Liquid Organic Hydrogen Carriers)
LSCF	Lanthanum-Strontium-Eisen-Kobaltit
MBE	Molekularstrahlepitaxie
MCF	Mangan-Kobalt-Eisen-Schutzschicht
MEA	Membran-Elektroden-Einheiten (engl.: Membrane Electrode Assembly)
METIS	Modelle für die Energietransformation und Systemintegration (engl.: Models for Energy Transformation and Integration Systems)
MIFULAS	Projekt des BMBF für mikrostrukturierte Funktionsschichten aufgetragen mit Laser-Auftragsschweißen
MILP	Programm für eine gemischt ganzzahlige, lineare Optimierung (engl.: Mixed-Integer Linear Program)
MKS	Mobilitäts- und Kraftstoffstrategie
MnOx	Manganoxid-Schutzschicht
MWV	Mineralölwirtschaftsverbands e.V
NCA	Anode bestehend aus Lithium-Nickel-Kobalt-Aluminium-Oxid
NDIR	Nichtdispersiver Infrarotanalysator (engl.: Nondispersive Infrared Adsorption Analyser)
NG	Erdgas (engl.: Natural Gas)
NMC	Anode bestehend aus Lithium-Nickel-Mangan-Kobalt-Oxid
NMHCs	Kohlenwasserstoffe außer Methan (engl.: Non-Methane Hydrocarbons)
NOW	Nationale Organisation Wasserstoff- und Brennstoffzellentechnologie GmbH
NRW	Nordrhein-Westfalen
NT-PEFC	Niedertemperatur Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle
OME	Oxymethylenether

OpenFOAM	Freies Simulationssoftwarepaket für kontinuumsmechanische Probleme (engl.: Open Source Field Operation and Manipulation)
ORR	Sauerstoffreduktionsreaktion (engl.: Oxygen Reduction Reaction)
P2X	Power-to-X
PBI	Polybenzimidazol
PECSYS	Projekt der EU für die Demonstration eines großtechnischen, fotoelektrochemischen Systems zur solaren Wasserstoffherzeugung (engl.: photo-electrochemical system)
PEFC	Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen (engl.: Polymer Electrolyte Fuel Cell)
PEM	Polymerelektrolytmembran
PILs	Protonenleitende, ionische Flüssigkeiten (engl.: Proton Conducting Ionic Liquids)
PLD	gepulste Laserdeposition (engl.: Pulsed Laserdeposition)
PoF	Programmierorientierten Förderung der HGF
PRECORS	Innovatives Spin-off-Unternehmen (GmbH) aus dem IEK-3 für vorbeugende Korrosionssysteme (engl.: Preventive Corrosion System)
PtF	Strom zu Kraftstoff (engl.: Power-to-Fuel)
PTFE	Polytetrafluoroethylen
PtG	Strom zu Gas (engl.: Power-to-Gas)
PV	Photovoltaik
PVD	Physikalische Gasphasenabscheidung (engl.: Physical Vapor Deposition)
RDE	rotierende Platinscheibenelektrode (engl.: Rotating Disk Electrode)
REM/EDX	Rasterelektronenmikroskop mit Energiedispersive Röntgenspektroskopie
RoBiPo	Projekt des BMWi für Robuste Bipolarplatte für HT-PEFC
rSOC	Reversible Festoxid-Brennstoffzelle (engl.: Reversible Solid Oxide Cell)
RW	Kurzbezeichnung für DMFC-Stacks des IEK-3
RWTH	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen
SAED	Ausgewählte Elektronen-Feinbereichsbeugung (engl.: Selected Area Electron Diffraction)
SCT	Segmentierte Zellentechnologie (engl.: Segmented Cell Technology)
SEI	Festelektrolyt-Grenzschicht (engl.: Solid Electrolyte Interface)
SEM	Rasterelektronenmikroskop (engl.: Scanning Electron Microscope)
SG	Schutzgas
SGG	Schutzgasgenerator
SLEI	Fest-flüssig Elektrolyt-Deckschicht (engl.: Solid-Liquid Electrolyte Interphase)
SOE	Festoxid-Elektrolyse (engl.: Solid Oxide Electrolysis)
SOEC	Festoxid-Elektrolysezelle (engl.: Solid Oxide Electrolysis Cell)
SOFC	Festoxid-Brennstoffzelle (engl.: Solid Oxide Fuel Cell)
SRMS	Ortsaufgelöste Massenspektrometrie (engl.: Spatial Resolution Mass Spectroscopy)
SS	Sommersemester
SuPER	Fachgemeinschaft für nachhaltige Produktion, Energie und Ressourcen (engl.: Sustainable Production, Energy and Resources)
SVI	Speicher und vernetzte Infrastrukturen
SWOT	Methode zur Bewertung von Stärken, Schwächen, Chancen und Bedrohungen (engl.: strengths, weaknesses, opportunities, and threats)
SWPC	Siemens Westinghouse Power Corporation
SWS	Sommer-/Wintersemester
TEM	Transmissionselektronenmikroskop
TESYS	Projekthaus Technikbasierte Energiesystemanalyse
TG	Thermogravimetrische Analyse

TGA	Thermogravimetrie-Analysator
THG	Treibhausgas
TPD	Temperaturprogrammierte Desorption (engl.: Temperature Programmed Desorption)
TPO	Temperaturprogrammierte Oxidation (engl.: Temperature Programmed Oxidation)
TPR	Temperaturprogrammierte Reduction (engl.: Temperature Programmed Reduction)
TRENDS	Konferenz für den Übergang zu erneuerbaren Energieeinrichtungen und -systemen (engl.: Transition to Renewable Energy Devices and Systems)
USV	Unterbrechungsfreie Stromversorgung
VDI	Verein Deutscher Ingenieure
VDI-GVC	Verein Deutsche Ingenieure – Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen
VSA	Abteilung Verfahrens- und Systemanalyse
WACC	Methode zur Unternehmensbewertung auf der Grundlage gewichteter durchschnittlicher Kapitalkosten (engl.: Weighted Average Cost of Capital)
WBZU	Weiterbildungszentrum Brennstoffzelle Ulm e. V.
WGS	Wasser-Gas Shift Reaktion
WILEY-VCH	WILEY-Verlag Chemie
WPS	Nasspulverspritzen (engl.: Wet Powder Spraying)
WS	Wintersemester
XRD	Röntgenbeugung (engl.: X-Ray Diffraction)
YSZ	Yttriumoxid-stabilisiertes Zirkonoxid
ZEA-1	Zentralinstitut für Engineering, Elektronik und Analytik - Engineering und Technologie

Band / Volume 370

Performance of Plasma Facing Materials under Thermal and Plasma Exposure

I. Steudel (2017), XVI, 150 pp

ISBN: 978-3-95806-226-9

Band / Volume 371

The Impact of Transient Thermal Loads on Beryllium as Plasma Facing Material

B. Spilker (2017), XII, 134 pp

ISBN: 978-3-95806-227-6

Band / Volume 372

Analysis and Simulation of Macroscopic Defects in Cu(In,Ga)Se₂ Photovoltaic Thin Film Modules

B. Mistic (2017), iv, 147 pp

ISBN: 978-3-95806-228-3

Band / Volume 373

Chemical and physical properties of sodium ionic conductors for solid-state batteries

M. Guin (2017), ix, 126 pp

ISBN: 978-3-95806-229-0

Band / Volume 374

Prediction of Oxidation Induced Life Time for FCC Materials at High Temperature Operation

R. Duan (2017), vi, 180 pp

ISBN: 978-3-95806-230-6

Band / Volume 375

Microstructure Evolution of Laves Phase Strengthened Ferritic Steels for High Temperature Applications

J. K. Lopez Barrilao (2017), XVI, 134 pp

ISBN: 978-3-95806-231-3

Band / Volume 376

Drying front formation in topmost soil layers as evaporative restraint Non-invasive monitoring by magnetic resonance and numerical simulation

S. Merz (2017), xxii, 108 pp

ISBN: 978-3-95806-234-4

Band / Volume 377

Low Temperature Thin-Film Silicon Solar Cells on Flexible Plastic Substrates

K. Wilken (2017), 194 pp

ISBN: 978-3-95806-235-1

Band / Volume 378

**Dissolution Behaviour of Innovative Inert Matrix Fuels
for Recycling of Minor Actinides**

E. L. Mühr-Ebert (2017), xii, 164 pp
ISBN: 978-3-95806-238-2

Band / Volume 379

**Charakterisierung und Modifizierung von Kupferoxid- und Kupfersulfid-
Nanopartikeln für Dünnschichtsolarzellen**

J. Flohre (2017), 141, iii pp
ISBN: 978-3-95806-241-2

Band / Volume 380

**Einzelfaserkomposite aus Pulvermetallurgischem
Wolfram-faserverstärktem Wolfram**

B. Jasper (2017), v, 92, XVIII pp
ISBN: 978-3-95806-248-1

Band / Volume 381

**Untersuchungen zur Deckschichtbildung auf $\text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_4$ -
Hochvoltkathoden**

Die Kathoden/Elektrolyt-Grenzfläche in Hochvolt-Lithium-Ionen-Batterien
K. Wedlich (2017), xvi, 157, xvii-xxvi pp
ISBN: 978-3-95806-249-8

Band / Volume 382

**Charakterisierung gradiertter Eisen/Wolfram-Schichten
für die erste Wand von Fusionsreaktoren**

S. Heuer (2017), x, 234 pp
ISBN: 978-3-95806-252-8

Band / Volume 383

High resolution imaging and modeling of aquifer structure

N. Güting (2017), viii, 107 pp
ISBN: 978-3-95806-253-5

Band / Volume 384

IEK-3 Report 2017

Sektorkopplung –
Forschung für ein integriertes Energiesystem
(2017), 182 pp
ISBN: 978-3-95806-256-6

Weitere **Schriften des Verlags im Forschungszentrum Jülich** unter
<http://www.zb1.fz-juelich.de/verlagextern1/index.asp>

Das IEK-3 ist einer von derzeit 13 Institutsbereichen des Instituts für Energie- und Klimaforschung. Die Forschungsarbeiten des IEK-3 sind auf technische Lösungen für eine zukünftig nachhaltige Energieversorgung ausgerichtet. Dabei liegen die Schwerpunkte auf der Elektrochemie und der Verfahrenstechnik für Brennstoffzellen mit oder ohne Reformierung sowie für die Wasserelektrolyse. Diese Umwandlungstechniken werden mit einem interdisziplinären Wissenschaftlerteam von den wissenschaftlichen Grundlagen bis zur systemtechnischen Anwendung bearbeitet. Im IEK-3 stehen Labore für bildgebende, physikochemische und elektrochemische Untersuchungen zur Verfügung. Darüber hinaus erlauben universelle Testeinrichtungen die eingehende Betriebsuntersuchung und Charakterisierung der unterschiedlichen Wandler vom cm^2 - bis in den m^2 -Maßstab. Zur Vorbereitung eines Technologietransfers hat das IEK-3 ein Technikum geschaffen, das die parallele Entwicklung einer industrienahen, reproduzierbaren Fertigung funktionaler Schichtsysteme wie z.B. Elektroden, Gasdiffusionslagen und Membranelektroden-Einheiten sowie die präzise Assemblierung vierteiliger Stacks erlaubt. Durch die Ergebnisse der Verfahrens- und Systemanalyse ist es möglich, erfolgversprechende FuE-Themen für die Zukunft zu identifizieren und zu bewerten, die eigene Technologieentwicklung mit konventionellen Techniken zu vergleichen, Energiepfade und Energieversorgungsnetze auszulegen sowie Empfehlungen für die daran interessierten, gesellschaftlichen Bereiche auszuarbeiten und diese zu beraten. Aus- und Weiterbildungsangebote in Zusammenarbeit mit Universitäten, Fachhochschulen und anderen Ausbildungseinrichtungen runden die FuE-Dienstleistungen des IEK-3 ab.



Der Erzeugungsprozess von Wasserstoff aus Elektrizität, die aus fluktuierend arbeitenden Windenergie- und Photovoltaikanlagen stammt, wird als POWER-to-GAS bezeichnet. Dabei übernimmt die Wasserelektrolyse die großtechnische Umwandlung von elektrischer Energie in chemische Energie in Form von H_2 . Das energetisch wertvolle Gas eignet sich zur Speicherung in großvolumigen Salzkavernen, erlaubt einen Transport in Pipelines über große Distanzen und ermöglicht die direkte und indirekte Nutzung als Kraftstoff im Verkehr sowie als Chemierohstoff in der Industrie.



Der Energiepfad BIO-to-LIQUID nutzt biogene Rohstoffe zur Herstellung flüssiger Kraftstoffe und Chemikalien ohne dabei in Konkurrenz zu Lebensmitteln zu treten. Die Synthese kann auf Basis von H_2 und einer Kohlenstoffquelle durch verschiedene Umwandlungsprozesse erfolgen. Dafür werden beispielsweise Waldresthölzer durch Vergasung zu Synthesegas umgewandelt. Daneben kann abgetrenntes CO_2 aus Biogasanlagen mit Elektrolyse- H_2 für die Synthese verwendet werden. So erzeugte Flüssigkeiten können konventionelle Kraftstoffe ergänzen oder sogar substituieren und dabei die Effizienz von Fahrzeugen steigern sowie den Schadstoffausstoß reduzieren.



Die Erzeugung von Wärme oder Kälte aus Strom ist eine weitere Flexibilisierungsoption für eine erneuerbar dominierte Energieversorgung und wird als POWER-to-HEAT bezeichnet. Dabei wird regenerativ erzeugter Strom in Wärmepumpen und Heizstäben zur Wärmebereitstellung oder in Klimaanlage zur Kühlung eingesetzt. Eine unmittelbare Nutzung im Haushalt ist ebenso vorstellbar wie die Einspeisung von Wärme/Kälte in ein Versorgungsnetz für einen entfernten Nutzungsverbund.