

IEK-3 Report 2019

Maßgeschneiderte Energieumwandlung für nachhaltige Kraftstoffe

Detlef Stolten, Bernd Emonts (Editors)

Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 465

ISBN 978-3-95806-410-2

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

IEK-3 Report 2019

Maßgeschneiderte Energieumwandlung für nachhaltige Kraftstoffe

Detlef Stolten, Bernd Emonts (Editors)

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

Band / Volume 465

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-410-2

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
 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 2019

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band / Volume 465

ISSN 1866-1793
ISBN 978-3-95806-410-2

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 Internationale Konferenz für Festkörper-Ionentransport SSI-21	6
1.2 Vorbereitung, Durchführung und Resultat der TRENDS 2017	8
2 Aus- und Weiterbildung	13
2.1 Ausbildung an Hochschulen	14
2.2 Beiträge für die Information, Weiterbildung und Qualifizierung	19
3 Wissenschaftlich-technische Berichte	25
3.1 Festoxid-Wandler	26
3.2 Brenngaserzeugung und Systeme	38
3.3 Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen	50
3.4 Direktmethanol-Brennstoffzellen	68
3.5 Wasserelektrolyse	76
3.6 Verfahrens- und Systemanalyse	86
3.7 Physikalisch-Chemische Grundlagen / Elektrochemie	102
4 Besondere Ergebnisse	113
4.1 Jülicher Hochtemperatur-Brennstoffzelle besteht Langzeitversuch seit mehr als zehn Jahren	114
4.2 Reduktion der Edelmetallbeladung	115
4.3 Infrastrukturstudie	118
5 Ausblick auf neue FuE-Vorhaben	123
5.1 Festoxidzellen für verringerte Betriebstemperaturen von 400 bis 600°C ..	124
5.2 In-Situ-TEM Untersuchung von Elektrokatalysatoren	125
5.3 Ansätze zur Entwicklung von Mitteltemperaturzellen und -systemen	127
5.4 Versorgungssysteme für alternative Kraftstoffe	129
5.5 Bewertende Forschung an nachhaltigen Energiesystemen	136
6 Zahlen, Daten und Fakten	141
6.1 Das Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3)	142
6.2 Abteilungskompetenz im Überblick	145
6.3 Publikationen, Technologietransfer und Ressourcen	149
6.4 Preise und Auszeichnungen	152
6.5 Gremienarbeit	153
6.6 Beiträge zu Messen und Ausstellungen	160
6.7 Anfahrtsbeschreibung	163
6.8 Abkürzungsverzeichnis	166

Vorwort

Liebe Leser,

auch wenn die Umsetzung nicht immer ganz mit den steigenden Versprechen mithält, macht die Energiewende in der Umsetzung Fortschritte und gedanklich in Bezug auf das Gesamtsystem sogar große Fortschritte. Im internationalen Vergleich nimmt Deutschland hinsichtlich vernetzter Infrastruktursysteme eine führende Stellung ein. Anders als noch vor einiger Zeit kommen die wesentlichen Impulse und auch Techniken mittlerweile nicht mehr aus den USA, sondern aus Asien. Dort wird zunehmend auch der Blick auf die Infrastruktur gerichtet und Wasserstoff tritt gegenüber der reinen Elektromobilität mehr in den Vordergrund.

Der großen Herausforderung der Infrastruktur folgend haben sich auch die Themen des IEK-3 zunehmend in Richtung Elektrolyse verschoben. Elektrolyseaktivitäten sind nennenswert gestärkt worden, sowohl im Bereich der Polymer-Elektrolyt-Membran-Elektrolyse (PEM-Elektrolyse), als auch bei der alkalischen Elektrolyse. Der Themenschwerpunkt „Systeme für die Bordstromversorgung“ wurde in eine Aktivität zur Erforschung zukünftiger, flüssiger Kraftstoffe weiterentwickelt. Damit werden das umfangreiche Kraftstoff Know-how, die langjährigen Erfahrungen im Reaktordesign und in der Katalyse auf ein neues Zukunftsfeld im Rahmen der Energiewende fokussiert. Die Aktivitäten zu Hochtemperatur-Polymer-Elektrolyt-Brennstoffzellen werden auf die PEM-Elektrolyse und Brennstoffzelle gerichtet.

Die systemanalytischen Aktivitäten wurden fokussiert ausgebaut und beziehen sich jetzt auf das gesamte Energiesystem. Dabei spielt Wasserstoff nach wie vor eine Rolle, er wird jedoch wertneutral wie jede andere Technologie in den Systembetrachtungen bewertet. Eine Studie im Auftrag von H2 Mobility hat die Infrastruktur für batterieelektrische Fahrzeuge mit der von Wasserstofffahrzeugen verglichen. Mit dieser Studie, die aufzeigt, dass eine Wasserstoffinfrastruktur auch in der Initialphase deutlich günstiger ist als bisher vermutet, ist die Sichtbarkeit der Systemanalyse des IEK-3 stark gestiegen.

Mit 100.000 Betriebsstunden wurde der bisher am längsten betriebene SOFC Stack abgeschaltet. Mit diesem Stack konnte gezeigt werden, dass auch über eine derart lange Betriebsdauer keine neuen katastrophalen Degradationsmechanismen gegen Ende der Lebensdauer entstehen. Der Stack unterlag einer für die Zeit seines Betriebs üblichen Degradation, die mittlerweile auch durch Zwischenschichten und Materialveränderungen für neue Stacks stark reduziert worden ist.

Damit sind im Institut starke Entwicklungsfelder verstärkt worden und der Fokus ist komplett auf Technologien verschoben worden, die direkt in Zusammenhang mit der Energiewende stehen und auch das Potenzial eines hohen quantitativen Einflusses haben.



Jülich, im August 2019

Detlef Pollmann





1

Tagungen

Beiträge für internationale Konferenzen

- Internationale Konferenz für Festkörper-Ionentransport SSI-21
- Vorbereitung, Durchführung und Resultat der TRENDS 2017

1.1 Internationale Konferenz für Festkörper-Ionentransport SSI-21

Die Internationale Konferenz für Festkörper-Ionentransport ist eine wichtige Veranstaltung in diesem Themenfeld, die alle zwei Jahre stattfindet und die die Aufmerksamkeit einer weltweiten Teilnehmerschaft erfährt. Zwischen 18. und 23. Juni 2017 fand die 21. Konferenz in der italienischen Universitätsstadt Padua statt. Die Übersicht der Einzelveranstaltungen und des Zeitplans der SSI-21 ist in Abb. 1 dargestellt. Die Themen der SSI-21 behandeln grundlegende und anwendungsorientierte Aspekte ionenleitender Materialien sowohl mit konventionellem als auch innovativem Ansatz.

Programm & Zeitplanung	SAMSTAG 17. Jun	SONNTAG 18. Jun	MONTAG 19. Jun	DIENSTAG 20. Jun	MITTWOCH 21. Jun	DONNERSTAG 22. Jun	FREITAG 23. Jun
8:00 - 9:00		Registrierung	Plenar-Session Udo Knafl	Plenar-Session Masakazu Aono	Plenar-Session Mogens Mogensen	Plenar-Session Stanley Whittingham	Parallel-Sessions
9:00 - 10:00	TUTORIUM Impedanzspektroskope		Parallel-Sessions	Parallel-Sessions	Parallel-Sessions	ISSI-Wahlen	
10:00 - 11:00			Kaffeepause	Kaffeepause	Kaffeepause	Kaffeepause	
11:00 - 12:00		Parallel-Sessions	TUTORIUM Kernmagnetische Resonanz	Parallel-Sessions	Parallel-Sessions	Parallel-Sessions	Parallel-Sessions
12:00 - 13:00		Mittagessen		Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen	Parallel-Session Michael Graffzel Abschlusszeremonie
13:00 - 14:00			Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen	
14:00 - 15:00	Registrierung	TUTORIUM Nano-Ionentransport	Parallel-Sessions	Parallel-Sessions	Exkursion / Bankett	Parallel-Sessions	
15:00 - 16:00		Parallel-Sessions Kaffeepause	Parallel-Sessions	Parallel-Sessions		Parallel-Sessions	
16:00 - 17:00		Parallel-Sessions	Kaffeepause	Kaffeepause		Kaffeepause	
17:00 - 18:00		TUTORIUM Neutronenstreuungstechniken	Parallel-Sessions	Parallel-Sessions		Parallel-Sessions	
18:00 - 19:00			Poster-Session	Präsentationen der YSA-Finalisten & Empfänger des Forschungspreises		Poster-Session	
19:00 - 20:00	Eröffnungszereemonie & Begrüßungsparty Palazzo della Regione						
20:00 - 21:00							
21:00 - 22:00							
22:00 - 23:00				Opernhaus-Konzert			

Abb. 1: Programm und Zeitplan der SSI-21

Die Session "Hochtemperatur-Protonenleitende Polymermembranen" wurde von Werner Lehnert zusammen mit anderen internationalen Experten auf diesem Gebiet organisiert. Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen sind nützlich für stationäre Anwendungen sowie für Anwendungen zur Bordstromversorgung von Trucks, Bahnen und Flugzeugen. Derzeit sind Kosten und Leistungsfähigkeit von Brennstoffzellen mit Betriebstemperaturen oberhalb von 100 °C nicht wirklich zufriedenstellend, um eine Alternative zu den weitverbreiteten konventionellen Technologien darzustellen. Vor diesem Hintergrund konzentrieren sich die jüngsten Forschungsanstrengungen auf die Entwicklung von Katalysatoren und protonenleitenden Membranen. Wie bereits bei anderen Themen sind die wesentlichen Aspekte: (i) Minimierung der Beladung der Katalysatorschicht mit Platin; (ii) Verbesserung der reaktionsträgen Kinetik der Sauerstoff-Reduktionsreaktion (ORR) an der Kathode. Um letzteres zu erreichen, konzentrieren sich die FuE-Anstrengungen auf: (i) Maximierung der Membranbeständigkeit und (ii) Verbesserung der Protonenleitfähigkeit der Membran ohne die Stabilität zu mindern.

Dieses Symposium strebt danach, die jüngsten Entwicklungen im Bereich protonenleitender, polymerbasierter Membranen für Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen sowie zugehörige Anwendungen zur Diskussion zu stellen. Insbesondere behandeln dies folgende Themen: (i) Entwicklung neuer Komposit- und Mischmaterialien mit verbesserter Protonenleitfähigkeit, chemischer und elektrochemischer Stabilität und Haltbarkeit; (ii) neue

in-situ und operando Charakterisierungstechniken für MEAs; (iii) Multiskalenmodellierung (Mikro-, Meso- and Makroskala) isothermer und nicht-isothermer Prozesse in Membranen und Schnittstellen; (iv) theoretische/experimentelle Untersuchungen der Transportmechanismen in komplexen Systemen. Der im Symposium behandelte Betriebstemperaturbereich reichte von 100 °C bis 300°C. In der Hauptsache wurden Materialien auf der Basis von Polybenzimidazol diskutiert, andere Systeme (Pyridine-basierte u.a.) nahmen weniger Raum ein.

1.2 Vorbereitung, Durchführung und Resultat der TRENDS 2017

Unter dem Titel TRENDS – Transition to Renewable Energy Devices and Systems, organisierte das IEK-3 am 5.-6. Dezember 2017 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 Durchschlagskraft zu identifizieren und fehlende Bausteine zu benennen, die für die Umsetzung einer Reduktion von 80 % der CO₂-Emissionen bis 2050 entscheidend sind. Im Verkehrsbereich nimmt die Elektrifizierung in Zukunft zu. Thematisch fokussierte die Konferenz auf Wasserstoff für den Verkehr und auf maßgebliche Antriebskonzepte. Seitens der Kraftstoffe wurde das Potential alternativer Kraftstoffe, deren Herstellpfade und deren Kostenaspekte diskutiert.

Es existieren verschiedene Ansätze um die Nutzung der Volatilität der Stromerzeugung aus erneuerbaren Energien möglichst effizient in das heutige aber vor allem in das zukünftige Energiesystem zu transferieren. Daher ist es notwendig geeignete Speichertechnologien weiterzuentwickeln, um eine fluktuierende Stromerzeugung ausgleichen können. Die Hauptthemen der Konferenz waren der Stand und die Perspektiven von Wasserstofffahrzeugen und Batteriefahrzeugen, Power-to-Fuel, DC/DC-Netzen, Ideen zur Sektorkopplung und zum Anschluss von Klimazonen.

Die meisten Präsentationen der TRENDS 2017 sind mit einer kurzen Zusammenfassung in einem Tagungsband zusammengestellt worden¹.

Die Sektorenkopplung im deutschen Energiesystem wird sich bis zum Jahr 2050 im Wesentlichen zwischen den Bereichen elektrische Energieerzeugung und Transport realisieren. Das modellierte Energiesystem des IEK-3 geht heute von einer installierten Leistung von 60 GW aus, die auf einer Stromerzeugung von 528 TWh jährlich basiert. Zukünftig sind bis 2050 59 GW offshore Wind, 132 GW onshore Wind und 120 GW Photovoltaikanlagen, also insgesamt 311 GW erneuerbarer Stromerzeugung aufzubauen. Diese produzieren 629 TWh Strom. Der starke Überbau ist eine Konsequenz aus der Fluktuation der Erneuerbaren. Eine Energiemenge von 101 TWh wird via Elektrolyse in 2,1 Mill. Tonnen Wasserstoff für Brennstoffzellenfahrzeuge zur Verfügung gestellt. Dies werden bis 2050 75% des PKW-Fahrzeugbestands stellen. Weitere 200 TWh müssen zwischengespeichert werden. Eine Straffung der CO₂-Reduktionsziele von 80 – 95% wird für diesen Bereich als gleich herausfordernd gesehen wie die generelle Reduktion um 80%. Durch den Einsatz der PTX-Technologien wird der Bedarf an elektrischer Energie aber noch steigen. Eine Studie über die Produktion von Wasserstoff in Patagonien und den Transport nach Japan analysiert wie erneuerbare Energie zukünftig international verteilt werden kann. Es ergeben sich für diesen Fall Kosten von 4,44 €/kg. Die jährliche Produktion beträgt 8,8 Mill. Tonnen Wasserstoff. Die Kosten verteilen sich in etwa zu ¼ Wind, ¼ Elektrolyse, ¼ Schifftransport in flüssiger Form und jeweils ca. ein Achtel für Verflüssigung und Speicherung und für den Pipeline-Transport.

Eine weitere Möglichkeit der Kraftstofferzeugung 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 Polyoxymethyldimethylether (OME) 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

¹ D. Stolten, R. Peters (Eds.), TRENDS 2017 - Transition to Renewable Energy Devices and Systems, Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band 447, ISBN 978-3-95806-376-1

Kraftstoffherzeugung liegen in Abhängigkeit vom Prozess und der chemischen Zielsubstanz zwischen 30 – 50 %. Schwerpunkte der Analysen lagen auf Fischer-Tropsch-Produkten einerseits und auf OME andererseits. Wichtige positive Erkenntnisse bei Fischer-Tropsch-Produkten sind die gute „Drop-In“ Fähigkeit und die guten motorischen Verbrennungseigenschaften. Bei der Synthese aus Kohlenmonoxid und Wasserstoff entstehen letztendlich Wachse. Eine gezielte Reaktionsführung und Produktaufbereitung erfordert daher eine Reihe weiterer Apparate wie dem reverse Wassergas-Shiftreaktor, einem Cracker zum Aufbrechen der Wachsketten und einer Destillation. Wichtige Erkenntnisse bei OME-Mischungen sind die begrenzte „Drop-In“ Fähigkeit aber auch die guten Emissionseigenschaften bei einer technischen Verbrennung. Da hier keine direkte Synthese möglich ist, muss ein komplexer Syntheseweg beschritten werden. Insbesondere in diesen Stoffsystemen ist die Thermodynamik durch eine Vielzahl an Nichtidealitäten geprägt.

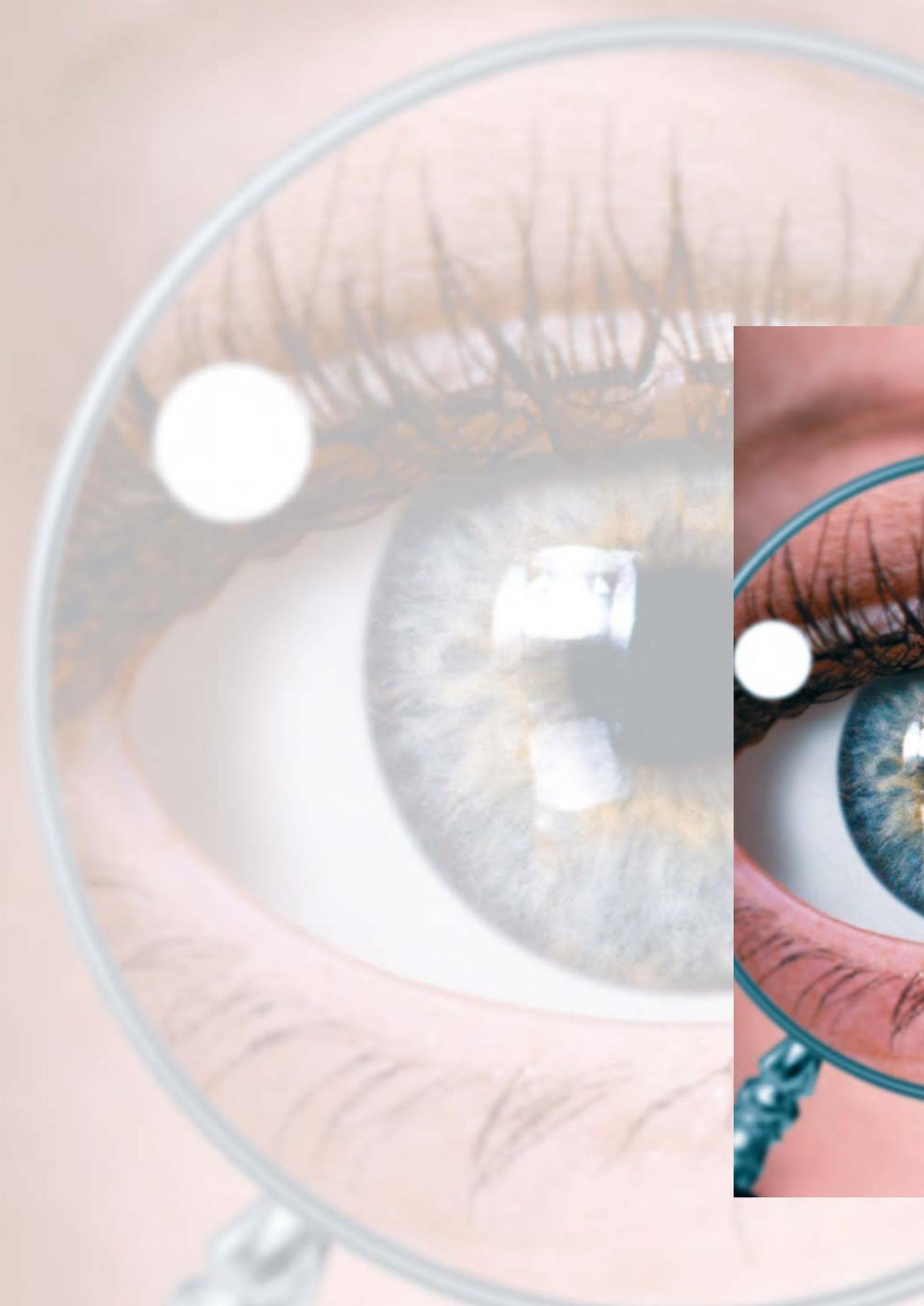
Für die Power-to-Fuel Route ist Kohlendioxid notwendig. Als Quelle wird in aktuellen Diskussionen neben der Biomasse und Industrieabgasen die direkte Abtrennung von CO₂ aus der Luft als Option angeführt. In Beitrag für die TRENDS 2017 wird die techno-ökonomische Analyse für ein mögliches Verfahren vorgestellt. Der Energieaufwand für ein solches System wird mit 3,65 GJ / t CO₂ berechnet. Dieser hohe Energiebedarf resultiert hauptsächlich aus dem Einbau von zwei Kompressoren, die Luft und CO₂ komprimieren. Der Wirkungsgrad liegt je nach Ausmaß der wärmetechnischen Integration zwischen 7,52 % bis 11,83 %. Die Kosten für die Vermeidung von CO₂-Emissionen variieren je nach verwendeter Energiequelle zwischen 824-1.333 \$ / t CO₂. Im Vergleich zu anderen in der Literatur angegebenen Werten zeigen die hier vorgestellten Analyseergebnisse höhere Werte für Energiebedarf und -kosten auf. Gründe für diese Abweichung sind oft fehlerhafte Bilanzgrenzen, stark vereinfachte Verfahrensschemata und grundsätzlich zu positive Annahmen. Weitere Fallstudien zeigen, dass ein enormer Landbedarf und sehr hohe Investitionen erforderlich sind, um die voraussichtlichen CO₂-Mengen in der Atmosphäre bis 2050 auf das Niveau von 1990 zu reduzieren. Ein Vergleich zwischen der Entfernung von CO₂ aus der Atmosphäre und der Technologie zur Abscheidung und Speicherung von Kohlendioxid aus Kohlekraftwerken zeigen, dass die Luftabscheidung aus techno-ökonomischer Sicht mittelfristig nicht konkurrenzfähig ist. Langfristig kann die Abtrennung von CO₂ aus der Umgebungsluft nach wie vor eine entscheidende Rolle bei der Abscheidung von CO₂ spielen.

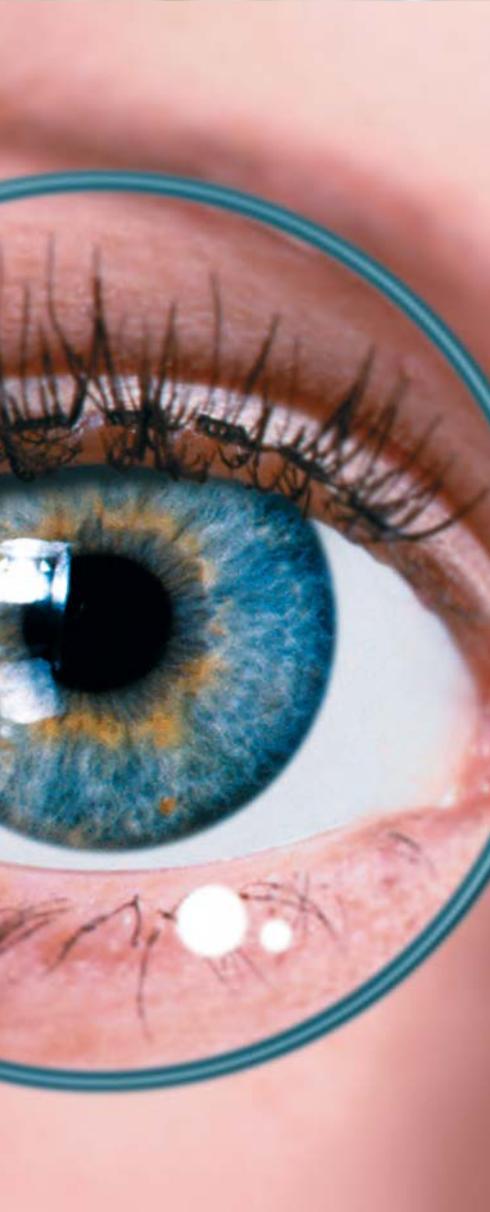
Seitens der Automobilindustrie werden von verschiedenen Herstellern die hauseigenen Konzepte zur Weiterentwicklung der Batterie- und Brennstoffzellenfahrzeuge vorgestellt. Die Aussagen werden durch zahlreiche Projektaktivitäten unterstützt.

Der Einsatz von Wasserstoff im öffentlichen Nahverkehr hat einen guten Entwicklungsstand erreicht. Ein interessantes Beispiel stellt die Stadt Hamburg dar. Wie alle Metropolregionen ist die Stadt Hamburg durch die wachsende Bevölkerung, dem damit verbundenen Verkehrsaufkommen und den hierdurch verursachten Emissionen stark gefordert. Aus diesem Grund verfolgt Hamburg ein ehrgeiziges Programm zur Steigerung der Elektromobilität mit Batterie und wasserstoffbetriebenen Brennstoffzellen. Der Hamburger Senat hat beschlossen, dass ab 2020 nur noch emissionsfreie Busse gekauft werden. Zurzeit existieren verschiedene Projekte, um die Anzahl der Elektrofahrzeuge zu erhöhen und gleichzeitig die Auflade-Infrastruktur auch hin zu Schnellladesäulen zu verbessern. In Bezug auf Busse wurde eine so genannte Innovationslinie eingeführt: es werden nur Busse mit innovativen elektrischen Antrieben eingesetzt, um unterschiedliche innovative Antriebsstränge unter den gleichen Bedingungen zu vergleichen. Derzeit stellen serielle elektrische Hybridbusse, parallele dieselelektrische Hybridbusse, Batteriebusse mit Brennstoffzellen als Range Extender und PlugIn Bussen einen Teil der Flotte. Die Ergebnisse werden gesammelt und verglichen und zeigen, welche Systeme zukünftig verwendet werden.

Seitens des IEK-3 wurde eine systemanalytische Studie zur Wasserstoffinfrastruktur für Brennstoffzellenfahrzeuge in Vergleich zur Lade-Infrastruktur für Batteriefahrzeuge durchgeführt. Mit einem großen Anteil an erneuerbarer Energie aus Wind und Sonne trägt selbst das perfekte Netz nicht dazu bei, Überschüsse zu vermeiden. Wasserstoff wird zur Speicherung von Energie benötigt, um die volatile Stromproduktion und -nachfrage auszugleichen. Bei 80% erneuerbarer Energie ermöglicht ein Drittel des Überschussstroms die Versorgung von 50% der deutschen Flotte mit Wasserstoff. Die Tankinfrastruktur für Brennstoffzellenfahrzeuge ist sehr (zeit-) effizient, vor allem in Bezug auf die Batterieladung. Je mehr Fahrzeuge desto besser wirken Skaleneffekte zugunsten der Wasserstoffinfrastruktur. Bei 100.000 Fahrzeugen sind die Kosten für beide Infrastrukturen ungefähr gleich. Bei 1 Million elektrobetriebene Fahrzeuge sind die Investitionen für Wasserstoff-Tankstellen niedriger als für die Ladestationen. Investitionen in umweltfreundliche H₂-Produktion und -Speicherung führen dazu, dass die Kosten für die H₂-Infrastruktur vorübergehend über den Investitionen für batteriebetriebene Fahrzeugen liegen. Bei höheren Fahrzeugzahlen ist der Anstieg zusätzlicher Infrastrukturinvestitionen bei der Batterie steiler als bei der Brennstoffzelle. Die Investitionen in eine Infrastruktur zur Herstellung und Lagerung von 100% umweltfreundlichem Wasserstoff für die Betankung von 20 Millionen Brennstoffzellenfahrzeuge sind rund 11 Milliarden € niedriger als die Investitionen, die für das Laden von 20 Millionen Batteriefahrzeugen erforderlich sind.

Das Exzellenzcluster „Maßgeschneiderte Kraftstoffe aus Biomasse“ (TMFB) an der RWTH Aachen hat zum Ziel die ganzheitliche Co-Optimierung von Biokraftstoffproduktion und Verbrennung durch die molekulare Struktur des Kraftstoffs (oder seine Zusammensetzung im Falle eines Gemisches) als der wichtigste Design-Freiheitsgrad durchzuführen, um den geeignetsten Kraftstoff zu finden. Konzeptionell besteht die Herausforderung darin, sauerstoffhaltige Kraftstoffkomponenten zu identifizieren, die eine hocheffiziente und emissionsarme Verbrennung ermöglichen. Die entsprechenden Produktionswege sollen effizient und nachhaltig sein. Der Schwerpunkt liegt auf der Umwandlung von Lignocellulosematerialien in flüssigen Biokraftstoff durch selektive katalytische Umfunktionalisierung von Biomasse-Monomeren. In der Expertenrunde wurde ein Überblick auf modellbasierte Strategien und Tools für ein solches integriertes Produkt- und Pfaddesign gegeben.





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. Dettlef 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 unterstützt durch Herrn Dr. Uwe Reimer für den Übungsbetrieb für die naturwissenschaftliche Fakultät wahrnimmt. Ein weiterer Lehrauftrag wird von Privatdozent Dr. Korte an der RWTH Aachen wahrgenommen. Dr.-Ing. Martin Robinius hat seit 2016 eine Lehrtätigkeit an der RWTH Aachen aufgenommen. Im Rahmen der Vorlesung von Prof. Aaron Praktiknjo liest Dr. Robinius zwei Blockveranstaltungen. Darüber hinaus erfüllt Dr. Robinius einen Lehrauftrag der TU Berlin am Außencampus El Gouna, Ägypten mit jährlich zwei Blockvorlesungen.



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



<http://www.tu-berlin.de/>



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

Abb. 2 Hochschulen mit Lehrbeiträgen von IEK-3-Wissenschaftlern

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. Ein geteilter Lehrauftrag an der FH Aachen in Jülich wird von Dr.-Ing. Jochen Linßen und Dr.-Ing. Peter Stenzel

wahrgenommen. Abb. 2 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 vier Blockvorlesungen. Darüber hinaus wird im Rahmen der Lehrveranstaltung von Professor Stolten ein halbtägiges Praktikum durchgeführt. Die Anzahl der pro Veranstaltung und Semester teilnehmenden Studenten beläuft sich je nach Veranstaltung auf 10 bis 80 Studierende. Zusätzlich leisten die Wissenschaftler des IEK-3 einen nennenswerten Beitrag zur Betreuung von Studien-, Bachelor-, Master- und Doktorarbeiten. Bezogen auf den Berichtszeitraum 2017 und 2018 wurden 2 bzw. 3 Bachelor-, 24 bzw. 31 Master- und 4 bzw. 11 Doktorarbeiten erfolgreich abgeschlossen.

2.1.1 Lehrveranstaltungen von Hochschullehrern mit Berufung

Der folgenden Tab. 1 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. 1 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 Energieverfah-

renstechnik 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. 2 können die wichtigsten Koordinaten der von Lehrbeauftragten des IEK-3 ausgerichteten Lehrveranstaltungen entnommen werden.

Name	Thema	Art/Umfang Semester		Hochschule
PD Dr. C. Korte	Physikalische Chemie I für Chemie (Lehramt) (V), Quantenmechanik	V/2 (Ü/1)	WS	RWTH Aachen
Dr. M. Robinius	Projektmodul Energiesystemische Forschung	V/2 Block	SS	RWTH Aachen
	Technikbasierte Energiesystemanalyse	S CP/5	WS	RWTH Aachen
	Sector Coupling and Market Simulation	V/2 Block	WS	TU Berlin Außencampus El Gouna, EG
Dr. M. Müller	Grundlagen und Technik der Brennstoffzellen (Beitrag zur Lehrveranstaltung von Prof. Stolten)	Ü/2	WS	RWTH Aachen
Dr. J. Linßen Dr. P. Stenzel	Energiespeichertechnologien	V/2 Ü/1 P/2 Block	SS	FH Aachen Standort Jülich
Dr. T. Grube	Basics and Applications of Chemical Reaction Theory – Simulation of Dynamic Processes in Energy Systems with Matlab/Simulink (Beitrag zur Lehrveranstaltung von Prof. Peters)	Ü/2	WS	FH Aachen Standort Jülich

CP: Credit Points

Tab. 2 Lehrveranstaltungen von Lehrbeauftragten an Hochschulen

2.1.2.1 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 Lehramtstudiengang 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. Für die Vorlesung und das Seminar im Wintersemester sind zwischen 28 Studenten (2017) und 24 Studenten (2018) angemeldet.

2.1.2.2 Energiesystemische Forschung und Technikbasierte 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 Technikbasierten 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.

2.1.2.3 Sector Coupling and Market Simulation

Herr Dr. Martin Robinius hält an der TU Berlin am Außencampus El Gouna, Ägypten eine englischsprachige Blockvorlesung zu dem Thema „Sector Coupling and Market Simulation“. Innerhalb der Vorlesung werden den Studenten zuerst die Grundlagen der Python-Programmierung sowie energiewirtschaftliche Themen, wie die Sektorkopplung und Energiemärkte im Allgemeinen, erläutert. Die Studenten lernen, erste techno-ökonomische Modelle in der am IEK-3 entwickelten Umgebung „FINE“² zu entwerfen sowie detailliertere Modelle bspw. zur Einspeisemodellierung der erneuerbaren Energien³ anzuwenden. Im Rahmen einer Studie entwickeln die Studenten in Gruppen eigene Forschungsfragen und entwerfen darauf aufbauend Energiesystemmodelle, deren Ergebnisse sie im Rahmen einer schriftlichen Ausarbeitung analysieren.

2.1.2.4 Energiespeichertechnologien

Die Studierenden werden mit Energiespeichertechniken, deren Anwendung und Auslegung vertraut gemacht. Es werden die zur effizienten Planung von Energiespeichern notwendigen Kenntnisse vermittelt, um diese Kenntnisse auf praxisnahe Fragen anzuwenden. Inhalte von Vorlesung, Übung und Praktikum sind die Anforderung an Energiespeicher, deren Einsatzgebiete, Grundlagen der Elektroenergie- und Wärmespeicherung, technische Ausführung von Speichern, neue und unkonventionelle Speicheroptionen, technische und wirtschaftliche Auslegung sowie die Rolle der Energiespeicherung in der Energieversorgung.

² <https://github.com/FZJ-IEK3-VSA/FINE>

³ <https://github.com/FZJ-IEK3-VSA/glaes>

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.
- Das IEK-3 bietet alljährlich Berufsorientierungs- und Schülerpraktika für Schülerinnen und Schüler (2017: 3 Schülerpraktikanten und 2018: 4 Schülerpraktikanten) aus Schulen der Region zum Thema „Fachberufe für die Brennstoffzellen- und Wasserstofftechnik“ an. Die labororientierten Betreuungsangebote decken ein breites, interdisziplinäres Themenspektrum ab und werden von den Schülerpraktikanten je nach Bedarf für eine oder zwei Wochen wahrgenommen.
- Mit dem Experimentiertag rund um die Brennstoffzelle bot das JuLab in Zusammenarbeit mit Betreuern des IEK-3 2017 an drei Terminen zwischen 26 und 31 Schülerinnen und Schülern die Möglichkeit, sich mit der Funktion elektrochemischer Wandler vertraut zu machen. 2018 nahmen dieses Angebot an wiederum drei Terminen zwischen 8 und 18 Schülerinnen und Schüler wahr.
- Eintägige, angeleitete Projektarbeit zu einem Brennstoffzellen-bezogenen FuE-Thema im Rahmen des JuLab Berufsfindungspraktikums 2017 und 2018 unter dem Motto „Jülich bewegt“, das jeweils für 10 Schüler im Juli stattfand.
- Als eine Teilaktivität des Wissenschaftspraktikums Energie des JuLab erhielten im Berichtszeitraum 8 bzw. 10 Schülerinnen und Schüler eine umfassende Einführung in die Welt der Brennstoffzellen.

- Im Rahmen von der Lehrkräftefortbildung des JuLab wurden 2018 im Rahmen einer Führung 2 Kooperationslehrer und im Rahmen eines Vortrages 30 Referendare mit Grundlagen, Aufbau, Funktion und Anwendung von Brennstoffzellen vertraut gemacht.
- In Zusammenarbeit mit ProMINat und dem JuLab wurde 2018 ein Studierender in den Laboren des IEK-3 im Rahmen eines zweitägigen Praktikums an die Funktionsweise einer Brennstoffzelle herangeführt.

2.2.2 Mitwirkung an externen Veranstaltungen

Mit Übersichtsvorträgen und ausgesuchten Fachbeiträgen zu den Themengebieten „Erneuerbare Energien“, „Wasserstoff“ und „Brennstoffzellen“ beteiligten sich zahlreiche Wissenschaftler des IEK-3 an einer Vielzahl externer Fortbildungs-, Workshop- und Schulungsveranstaltungen als eingeladene Fachreferenten, Experten und Koordinatoren.

- Masterseminar “Systeminnovationen und Nachhaltigkeit am Beispiel der Energiewende”
Für Studierende im Masterstudiengang des Lehrstuhls für Wirtschaftsgeologie präsentierte Dr. Bernd Emonts einen Seminarvortrag mit dem Titel „Projekthaus für Technikbasierte Energiesystemanalyse“. Im Rahmen der 90-minütigen Veranstaltung wurden die Akteure, Arbeitsthemen und Ergebnisse des wissenschaftlichen Vorhabens sowie aufeinander abgestimmte Ansätze für ein nachhaltiges deutsches Energieszenario vorgestellt und diskutiert.
- Master Class Course Conference "Renewable Energies"
Die Master Class Course Conference ist eine 5-tägige Konferenzreihe zum Thema erneuerbare Energie. Die Konferenz steht jedes Jahr unter einem anderen aktuellen Motto. Die Fachvorträge werden von Persönlichkeiten aus Politik, Wirtschaft und Forschung gehalten. Des Weiteren werden Forschungsprojekte von verschiedenen Hochschulen vorgestellt. Neben Fachvorträgen werden Foren, Exkursionen und Diskussionen geboten. Als IEK-3-Experten waren 2017 Dr. Peter Markewitz, auch in der Funktion als Mitkoordinator, und Dr. Peter Stenzel vertreten. 2018 nahmen Dr. Peter Markewitz und Peter Lopion als Fachreferenten teil.
- Dialogreihe „Forschung:Gesellschaft:Zukunft“
Organisiert vom Zukunftscampus des Forschungszentrums Jülich, vom Region Aachen Zweckverband und von der EnergieAgentur.NRW soll die 2017 zum ersten Mal unter dem Motto „Energieversorgung defossil - Wunsch oder Wirklichkeit in unserer Region“ durchgeführte und 2018 unter das Motto „Wasserstoff - ein wichtiger Baustein der Sektorkopplung“ gestellte Dialogreihe dazu beitragen, Forschung, Wirtschaft und Politik gemeinsam in eine Diskussion über Zukunftsthemen zu bringen. Mit dieser Zielvorgabe haben sich zahlreiche Wissenschaftler des IEK-3 an den beiden Veranstaltungen der Dialogreihe mit Fachvorträgen sowie der Vorstellung von Forschungs- und Anwendungsbeispielen beteiligt.
- Tag der Wissenschaft
Der 2017 zum ersten Mal im Forschungszentrum Jülich durchgeführte Tag der Wissenschaft bietet allen Kolleginnen und Kollegen vertiefte Einblicke in die Forschung der Institute auf dem Campus. Jeweils mehrere hundert Forscherinnen und Forscher haben sich im März 2017 und im Juni 2018 am „Tag der Wissenschaft“ im Foyer der Jülicher

Zentralbibliothek über ihre Arbeiten ausgetauscht. Dabei konnten sie vertiefte Einblicke in die Forschung anderer Institute auf dem Campus gewinnen und neue Kontakte knüpfen. Wie in Abb. 3 zu sehen, hat sich auch das IEK-3 mit beispielhaften wissenschaftlichen Beiträgen am Tag der Wissenschaft beteiligt.

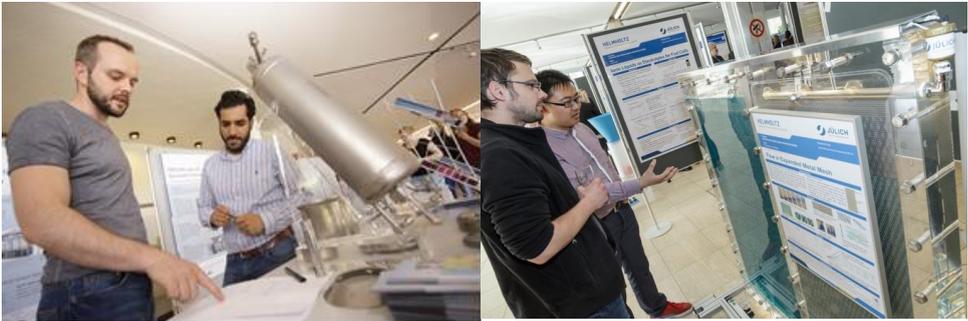


Abb. 3: Beiträge des IEK-3: autotherme Reformer (2017, links) und Strömungsvisualisierung bei einer PEM-Elektrolysezelle (2018, rechts)

- Forschungsbörse „Aus der Wissenschaft ins Klassenzimmer“
Am 22. Juni 2018 präsentierte Dr. Bernd Emonts vor 20 Schülerinnen und Schülern des Sankt Adelheid Gymnasiums in Bonn ein fachübergreifendes Referat zum Themenwunsch „Brennstoffzellen“. Unter dem Titel „Forschung für die Energiewende – Wasserstoff und Brennstoffzellen für die nachhaltige Mobilität“ wurden den Schülerinnen und Schülern die wesentlichen Technologien eines nachhaltigen Energieszenarios für Deutschland vorgestellt und mit ihnen diskutiert.
- Expertentalk am Gymnasium Haus Overbach
Schülerinnen und Schülern im Grund- und Leistungskurs Chemie bietet das Gymnasium Haus Overbach Expertengespräche im Unterrichtsformat. Dabei berichteten am 4. Juli 2018 Wissenschaftler des IEK-3 über den aktuellen Forschungsstand im Bereich Elektrochemie, Wasserstofftechnologien, Brennstoffzellen und Elektromobilität.
- Tagung der Bischöflichen Akademie des Bistums Aachen
Unter dem Titel „Energiespeicher – Schlüssel für die Energiewende“ veranstaltete die Bischöfliche Akademie des Bistums Aachen am 10./11. November 2018 für Mitglieder und Freunde des Solarenergie Fördervereins Deutschland e.V. eine zweitägige Tagung über die Frage, wie zukünftig eine Stromversorgung aus Sonne und Wind über die Bereitstellung geeigneter Speichersysteme sicher gestellt werden kann. Zu den Vortragenden Experten zählte auch Dr. Peter Stenzel vom IEK-3.

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 fachspezi-

fischen 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 2017 und 2018 nach der Ehrung gemeinsam mit Vertretern der organisierenden Einrichtungen zu sehen.



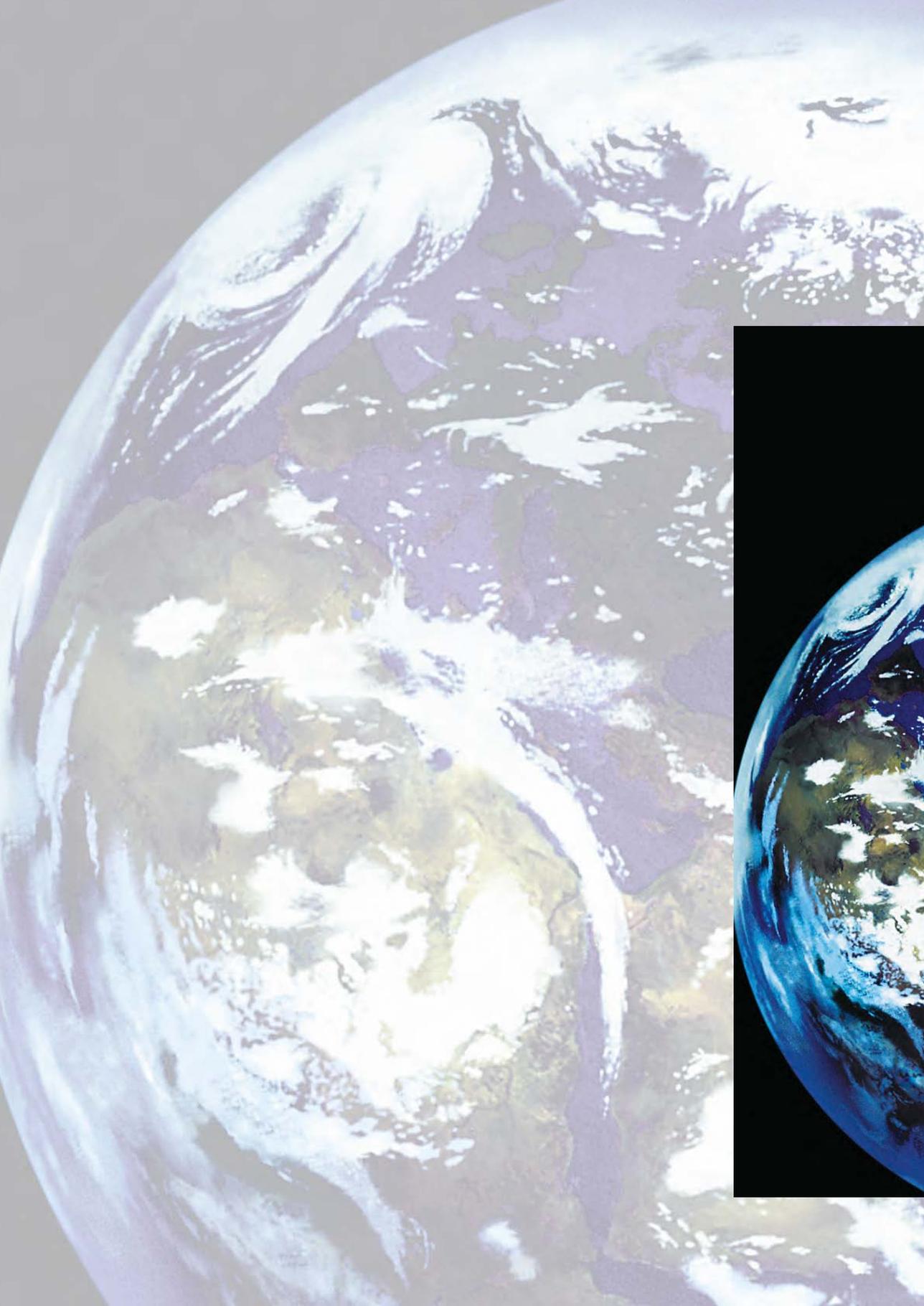
Abb. 4: Gruppenbilder der siegreichen Schülerteams der Wettbewerbe 2017 (links) und 2018 (rechts)

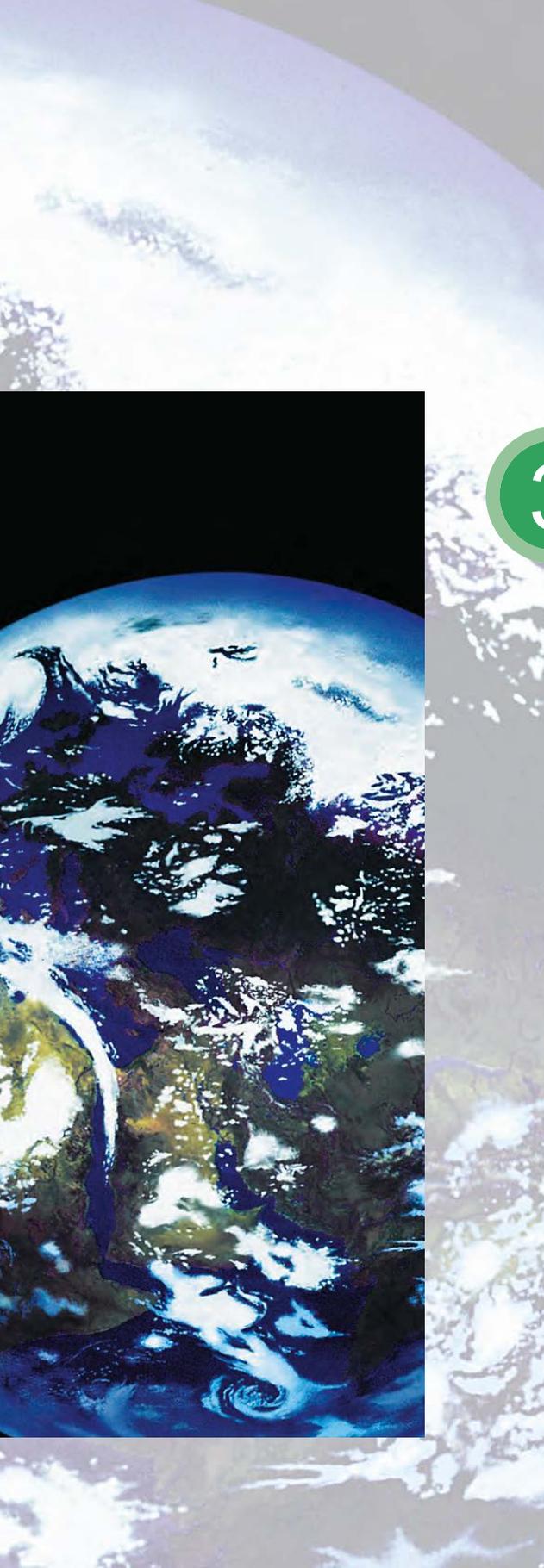
- Unterstützung des jährlich im Forschungszentrum Jülich durchgeführten Regionalwettbewerbs „Jugend forscht; Schüler experimentieren“ durch Begutachtung und Bewertung der theoretischen und praktischen Arbeitsergebnisse in den Disziplinen Technik, Arbeitswelt sowie Geo- und Raumwissenschaften.



Abb. 5: Erstplatzierte des „Jugend forscht“ Regionalwettbewerbs 2017

2017 belegte Susanne Rütten aus Linnich, Schülerin des Gymnasiums Haus Overbach, (siehe Abb. 5) den ersten Platz bei Jugend forscht im Fachgebiet Arbeitswelt. Sie überzeugte die Jury mit ihrer Arbeit zur effektiven Nutzung von Lagerkapazität durch einen Mikrocontroller-gesteuerten Roboter. Durch Speichern der Informationen über freie und belegte Plätze sowie das eigenständige Ein- und Ausräumen der Ware kann ein Chaoslager mittels Roboter bestückt und mittels Mikrocontroller verwaltet werden.





Berichte

Wissenschaftlich- technische Berichte

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

3.1 Festoxid-Wandler

3.1.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Zellen, Komponenten, Stacks und Systeme werden innerhalb des Programmtitels Hochtemperatur-Brennstoffzellen mit Festelektrolyten (SOFC) sowie für die Hochtemperatur-Elektrolyse mit Festelektrolyten (SOE) entwickelt. Strategisch zielt dieses Thema darauf ab, elektrische Energie für mobile und stationäre Anwendungen, sowohl dezentral als auch zentral, in einer Größenordnung von wenigen Kilowatt bis zu mehreren hundert Kilowatt hocheffizient bereitzustellen. Die Arbeit konzentriert sich auf Erhöhung der Leistungsdichte, Verbesserung der Lebensdauer, Identifizierung von Degradationsmechanismen im Stack und deren Verhinderung, fortschrittliches Design und hochintegriertes System-Engineering. Die Ergebnisse dieser Entwicklungsarbeit umfassen Materialien für Zellen, thermomechanisch verbesserte Stacks und hochintegrierte Systemkomponenten sowie Demonstrationsanlagen. Wichtige unterstützende Aktivitäten umfassen die Modellierung mechanischer und thermischer Bauteillasten sowie die Entwicklung und Charakterisierung von Komponenten für Brennstoffzellensysteme und deren Bewertung anhand verfahrenstechnischer Analysen.

3.1.2 Wichtige Ergebnisse

3.1.2.1 Entwicklung von Leichtbau-Kassetten-Stacks

Parallel zu den auf dem F-Designs basierenden Stackentwicklungsaktivitäten für stationäre Anwendungen wird ein leichtes Kassettenstack-Design entwickelt, speziell mit dem Ziel niedrigerer Herstellungskosten und einer verbesserten Dynamik. Basierend auf den Erfahrungen mit dem F-Design wurde die thermomechanische Robustheit verbessert, was

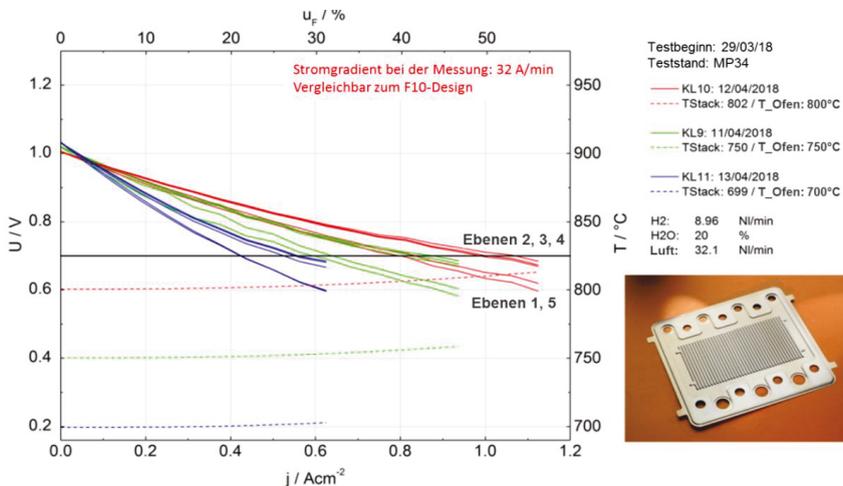


Abb. 6: Leistung des 5-Ebenen-Kassettenstacks CS^V05-05 mit befeuchtem Wasserstoff in Gleichstromanordnung bei unterschiedlichen Ofentemperaturen

besonders wichtig ist, da zum Beispiel für APU-Anwendungen in Fahrzeugen Aufheizzeiten von 30 min und weniger erforderlich sind. Ein bekannter Schwachpunkt des Kassetten-Design ist die unzureichende Haltbarkeit des bislang zur Zelllötung verwendeten Silberlot. Durch

Anpassung des Designs konnten die Zellen mit Glaskeramik, die eine deutlich bessere Langzeitstabilität als das Silberlot aufweist, in den Rahmen eingefügt werden. Ein erster drei-Ebenen Short Stack wurde insgesamt 53 Thermozyklen mit unterschiedlichen Heizraten unterzogen, wobei keine Verschlechterung der Gasdichtigkeit beobachtet wurde⁴. Inzwischen wurde ein weiterer 5-Ebenen-Stack (unter Verwendung einer WPS-Schutzschicht zur Verhinderung der Chromverdampfung) aufgebaut. Dessen Zellspannungseigenschaften sind in Abb. 6 dargestellt. Ein Stabilitätstest wurde für ca. 1000 Stunden durchgeführt (siehe Abb. 7)

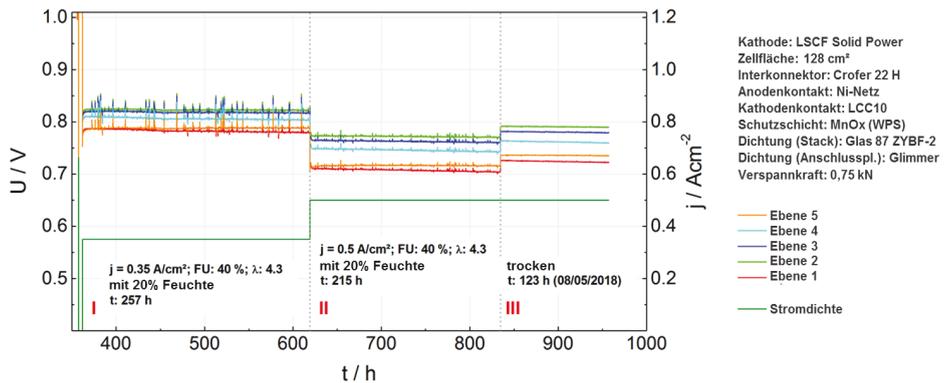


Abb. 7: Spannungsverlauf des 5-Ebenen-Kassettenstacks CSV05-05 mit trockenem Wasserstoff in Gleichstromanordnung bei 700 °C Ofentemperatur, 0,375 und 0,5 A/cm² und 40% Brenngasnutzung

Anschließend wurden thermische Zyklen gefahren, mit einer Aufheizung von 200 °C auf 650 °C innerhalb von 100 Minuten (und auf 700 °C innerhalb von 160 Minuten). Nach den ersten fünf Zyklen wurde der Stack auf RT abgekühlt, aus dem Teststand ausgebaut und einer Dichtheitsprüfung unterzogen: der Stack war sowohl intern als auch extern dicht. Anschließend wurde er weiter thermozykliert. Bis Ende 2018 wurden insgesamt 178 Zyklen realisiert. Hierbei hat sich die Leerlaufspannung (ein Maß für die interne Dichtigkeit) nicht verändert (siehe Abb. 8, links). Nach jedem Aufheizen wird auch eine Kennlinie gemessen. Die Zellspannungswerte bei 0,35 A/cm² sind in Abb. 8, rechts aufgetragen. Nach einem anfänglich etwas stärkeren Abfall wurde die Auswirkung der Zyklisierung auf die Zellspannung zunehmend geringer. Insgesamt beträgt der Spannungsabfall weniger als 0,02 %/Zyklus. Dass die Ebene 1 (rote Punkte) deutlich niedriger liegt, ist im Wesentlichen auf die niedrigere Temperatur durch den Wärmeverlust über den Ofenboden zurückzuführen. Die Zyklisierung wird weitergeführt

⁴ Ludger Blum et al., SOC Development at Forschungszentrum Jülich, ECS Transactions, 78 (1) (2017) 1791-1804

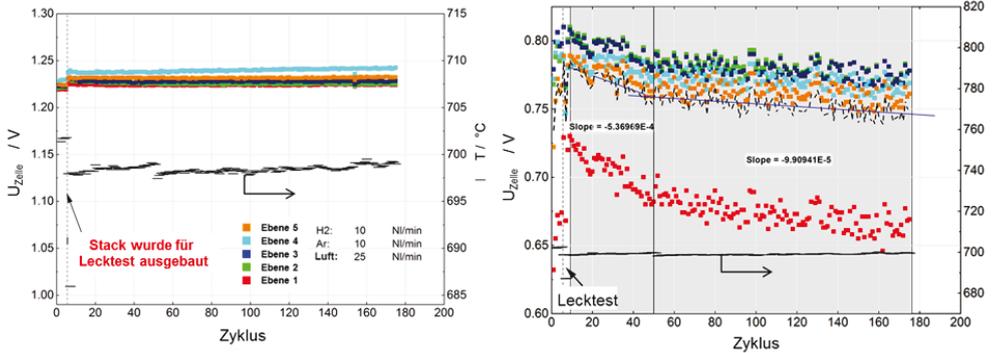


Abb. 8: Thermisches Zyklieren des 5-Ebenen Kassettenstacks CS^V05-05: Links – OCV über 178 Thermozyklen; rechts – Zellspannungen bei 0,35 A/cm² (u_F 40%) über 178 Thermozyklen, Messungen jeweils bei 700 °C und trockenem Wasserstoff

3.1.2.2 Short Stack Test bei 500 °C

Die Zellentwicklung konzentrierte sich in der Vergangenheit darauf, die Grundfunktionalität von Materialien und die Interaktion der Materialien während der Zellherstellung und des Zellbetriebs zu demonstrieren. Darauf aufbauend konzentrierte sich die Arbeit auf Themen wie Degradation und Skalierung der Komponentenherstellung.

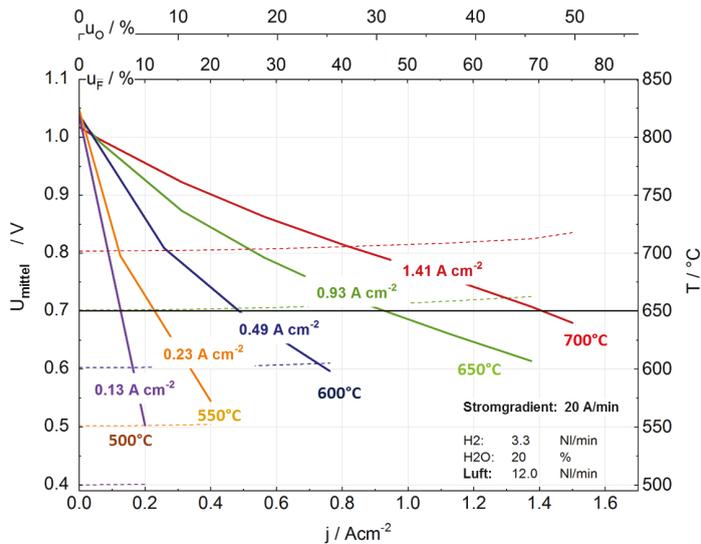


Abb. 9: Kennlinien eines 3-Ebenen-Shortstacks (F1003-02) zwischen 500 und 700 °C

Unterhalb der herkömmlichen Anwendungstemperaturen für ASCs (650-800 °C) geht es bei der Zellentwicklung für eine Niedertemperatur-SOFC (~ 400-500 °C) um die Herstellung dünner Elektrolytschichten und um den Nachweis, dass diese zuverlässig und reproduzierbar abgeschieden werden können und dass dies auf die Zellengröße für Stacks skaliert werden kann. Hierbei soll ihre elektrochemische Leistung höher als die von Standardzellen sein. Diese Arbeit führte zu 8YSZ-Schichten mit einer Dicke von 1 µm (Entwicklungsarbeiten

am IEK-1). Die Funktionalität wurde anhand eines Short Stacks bis 500 °C mit 10 x 10 cm² großen Zellen demonstriert (siehe Abb. 9). Der Stack weist die beste Performance auf, die jemals in Jülich gemessen wurde. Es stellte sich jedoch heraus, dass es eine große Lücke zwischen der Zellenleistung und der Leistung des Stacks gibt. Ein wesentliches Problem ist die drastische Erhöhung des Kontaktwiderstandes bei niedrigeren Temperaturen. Die Bewertung der zugrunde liegenden Mechanismen ist ein wesentlicher Schwerpunkt für die zukünftige Arbeit.

3.1.2.3 Fenster-Design Stacks der kW Klasse

JÜLICH hat das Design der kW-Klasse in Richtung des sogenannten Fenster-Designs, das vier Zellen von 10 x 10 cm² in einer Ebene enthält, geändert. Dies ermöglicht die Integration von Zellen in Standardgröße verschiedener Anbieter. Bei Verwendung des gleichen Zellentyps ist die Leistung eines solchen Fenster-Design Stacks vergleichbar mit einem Short Stack mit nur einer Zelle pro Ebene (siehe Abb. 10).

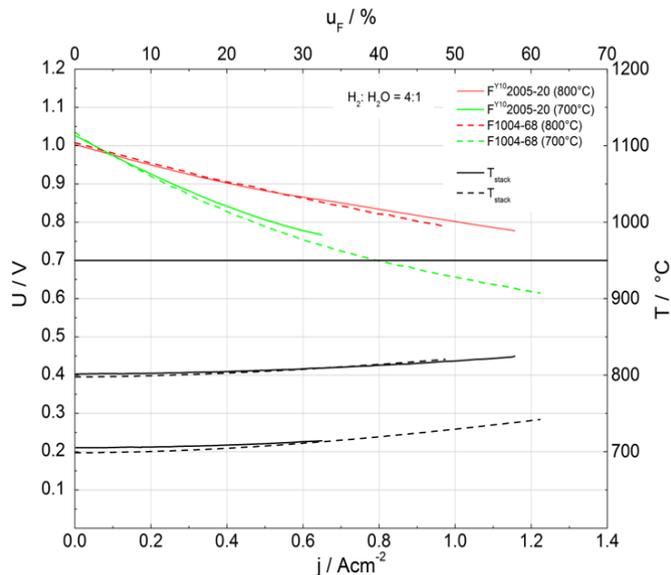


Abb. 10: Vergleich der Kennlinien (mittlere Stackspannung) eines Short Stacks F1004-68 (gestrichelte Linien) mit einer Zelle pro Ebene mit einem Stack mit vier 10 × 10 cm²-Zellen in einer Ebene (F^{Y10}2005-20)

Um das nächste Entwicklungsziel, die Realisierung von Stacks mit einer Leistung von mindestens 15 kW_{DC}, zu erreichen, wurde das Design der Gasverteiler so angepasst, dass 120 Schichten übereinander gestapelt werden können. Das Design wurde weiter geändert, um den Fertigungsaufwand zu reduzieren und die Montage zu erleichtern. Der 5-Ebenen Stack mit der Nummer F^{Y10}2005-21 zeigte eine gute Leistung mit Ausnahme der Ebene 1, die insbesondere bei niedrigeren Temperaturen ein Kontaktproblem zeigte (siehe Abb. 11).

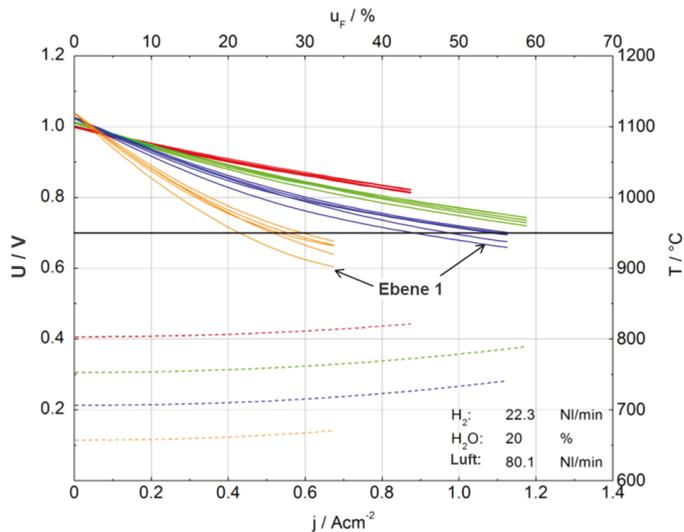


Abb. 11: Leistungskurven des 5-Ebenen Stacks F^{Y10}2005-21, gemessen zwischen 650 und 800 °C Ofentemperatur mit befeuchtetem Wasserstoff

3.1.2.3.1 Thermomechanische Eigenschaften: Thermozyklieren

In früheren Untersuchungen zeigte ein 5-Ebenen Stack im Fensterdesign bereits ein sehr gutes Temperaturwechselverhalten⁵. Eine leicht modifizierte Konstruktion, die sich zum Stapeln von 120 Schichten eignet und einfacher herzustellen ist, wurde ebenfalls einem Temperaturwechseltest unterzogen. Der getestete Aufbau besteht aus zwei fünflagigen Sub-Stacks, die übereinander gestapelt werden und mit einer Glimmer-Flachdichtung gegeneinander abgedichtet werden. Dieses Aufbaukonzept entspricht auch dem Designkonzept für größere Stackeinheiten. Der Stack F^{2S}2010-18 wird mit einer Rate von 3 K/min zwischen 200 und 700 °C zyklert. Abb. 12 zeigt die OCV mit trockenem Wasserstoff als Funktion der Anzahl der Zyklen. Die Versuche beginnen mit sehr hohen OCV-Werten zwischen 1,23 und 1,30 V. Zwischen dem 20. und 60. Zyklus zeigen die Ebenen 2, 6, 7 und 8 eine abnehmende OCV. Nach 80 Zyklen liegen die Spannungen jedoch immer noch über 1,15 V, was für einen zuverlässigen Betrieb ausreichend ist (als Zielwert wird eine Spannung von mindestens 1,10 V angestrebt). In Abb. 13 ist der Spannungsverlauf bei 0,5 A/cm² (entspricht einer Gesamtleistung von 1,25 kW) dargestellt, gemessen bei 700 °C nach jedem thermischen Zyklus. Hier ist kein Effekt der abnehmenden OCVs zu erkennen. Bei allen Ebenen zeigt sich ein ähnlicher Verlauf mit einer Spannungsabnahme von ca. 0,02% pro Zyklus.

⁵ Ludger Blum et al., SOC Development at Forschungszentrum Jülich, ECS Transactions, 78 (1) (2017) 1791-1804

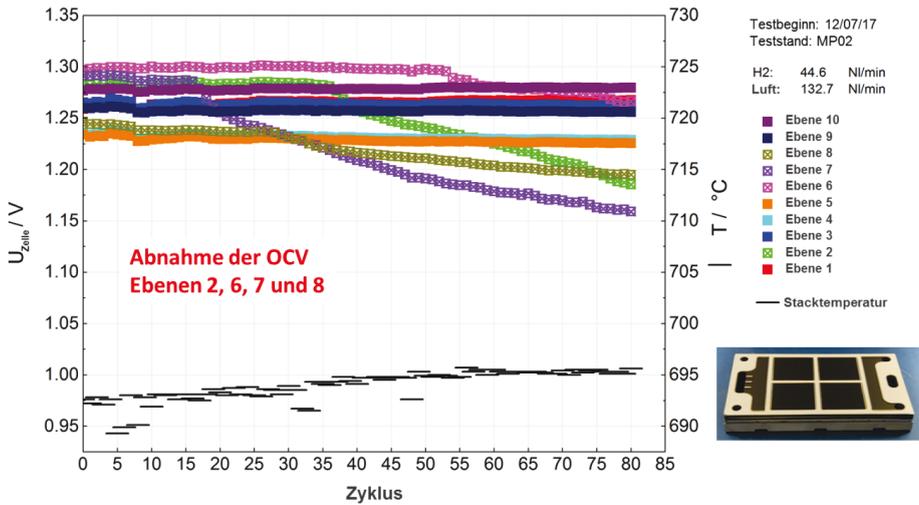


Abb. 12: Stack F^{2S}2010-18, bestehend aus zwei 5-Ebenen-Substacks: Temperaturwechsel zwischen 200 und 700 °C, Aufheizrate 3 K/min - OCV mit trockenem Wasserstoff als Funktion der Zyklenzahl

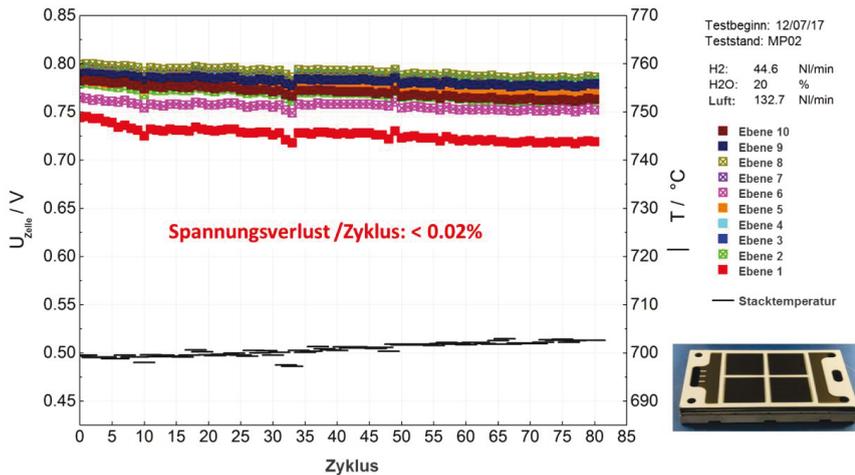


Abb. 13: Stack F^{2S}2010-18, bestehend aus zwei 5-Ebenen-Substacks: Temperaturwechsel zwischen 200 und 700 °C, Aufheizrate 3 K/min - Zellenspannung mit befeuchtem Wasserstoff bei 0,5 A/cm² als Funktion der Zyklenzahl

3.1.2.3.2 5 kW Stack

Um das nächste Entwicklungsziel, die Realisierung eines reversiblen 5-kW-SOC-Systems (rSOC), zu erreichen, wurden vier 10-Ebenen-Substacks als Teile des 5-kW-Stacks hergestellt und vorab getestet. Wie in Abb. 14 dargestellt, zeigen alle Substacks ein sehr ähnliches Verhalten. Abb. 15 zeigt Spannung und Leistung des 40-Ebenen 5 kW Stacks (F^{4S}2040-01) während des Betriebs mit Wasserstoff und mit Methan (Dampf-Kohlenstoff-

Verhältnis von 2 bei 10% Vorreformierung), beide in einer Gleichstrom-Konfiguration. Der Stack wurde mit einer Wärmeisolierung aus 10 cm dickem mikroporösem Material betrieben und mit vorgewärmter Luft und Brennstoff auf eine mittlere Stacktemperatur von 700 °C erhitzt. Der Stack wurde bei 0,5 A/cm² bei einer Brenngasnutzung von 70% betrieben und erreichte 5,1 kW mit Wasserstoff und 4,9 kW mit Methan und interner Reformierung. Die Temperaturdifferenz im Feststoff zwischen Einlass und Auslass betrug 180 K bei einem Luftüberschuss von 4,3.

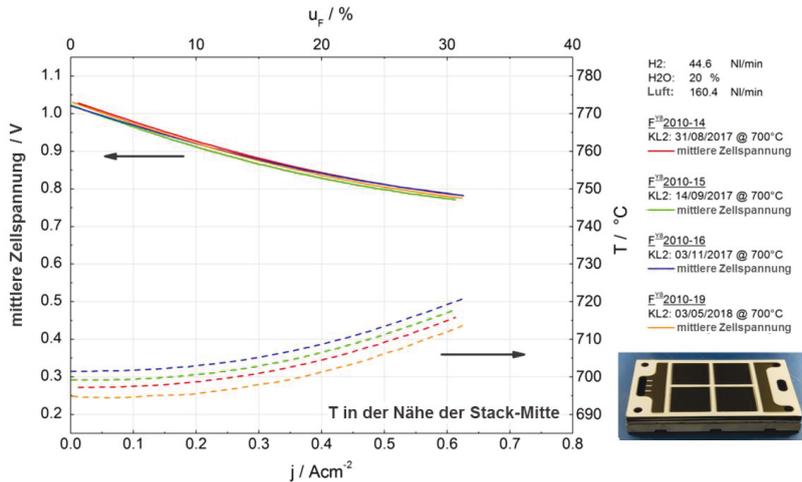


Abb. 14: Leistung von vier 10-Ebenen Substacks F^{Y8}2010-14/15/16/19 mit befeuchtetem Wasserstoff in Gleichstromanordnung bei 700 °C Ofentemperatur

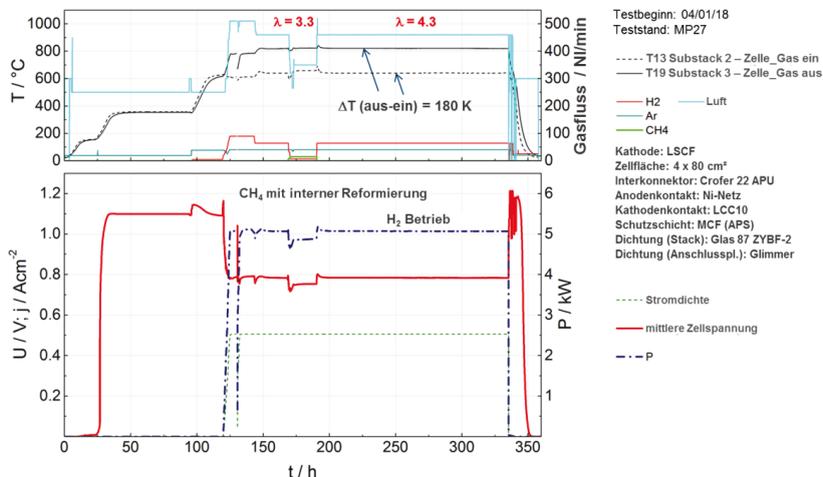


Abb. 15: Mittlere Zellspannung und Leistung von F4S2040-01, bestehend aus vier 10-Ebenen Substacks (Typ FY82010) mit trockenem Wasserstoff bzw. Methan in Gleichstromanordnung in thermischer Isolierung bei 700 °C mittlerer Stapeltemperatur und 0,5 A/cm² und 70% Kraftstoffnutzung

3.1.2.3.3 SOE – Hochtemperatur Elektrolyse

Ein Solid Oxide Cell (SOC) Short Stack bestehend aus zwei ASCs (Anode im Brennstoffzellenmodus) wurde bei 700 °C, 750 °C und 800 °C mit einer Stromdichte von $-0,5 \text{ A/cm}^2$ und einer Dampfnutzungsrate von 50% mit 50% befeuchtetem H_2 im Elektrolysemodus betrieben. Ein kurzer Brennstoffzellenbetrieb bei 800 °C für etwa 1500 h wurde ohne merkliche Verschlechterung dazwischen geschoben. Der gesamte Betrieb ist in Abb. 16 dargestellt.

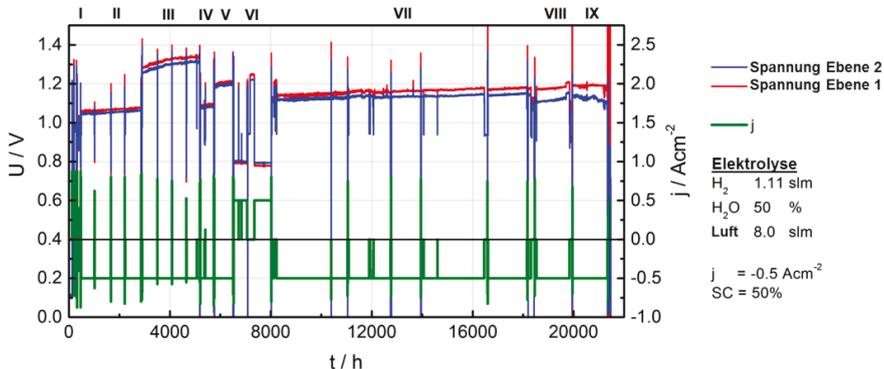


Abb. 16: Langzeitbetrieb des Stacks F1002-165 bei verschiedenen Betriebstemperaturen in Elektrolyse- (Phasen I, II, III, IV, V, VII-IX) und Brennstoffzellenmodus (Phase VI) ($\text{H}_2\text{O}:\text{H}_2 = 1:1$), Elektrolysemodus: $-0,5 \text{ A/cm}^2$, 50% Dampfnutzung; Brennstoffzellenmodus: $+0,5 \text{ A/cm}^2$, 50% Brennstoffnutzung)

Während der ersten 8.000 Betriebsstunden gab es fast keine Verschlechterung der Gasdichtigkeit des Stacks bzw. der Zellen. Die durchschnittlichen ASR-Alterungsraten lagen bei drei Temperaturen einheitlich bei ca. 10%/kh. Ab 8000 h betrug die Spannungs- und ASR-Alterungsrate für die nächsten 10.000 h Elektrolyse bei 800 °C ca. 0,4%/kh bzw. 2,7%/kh. Nach 10.000 Stunden Dauerbetrieb sanken die OCVs der Zellen mit trockenem H_2 von über 1,2 V auf 1,1 V, was sich später als Folge eines Lecks im Prüfstand herausstellte (Leckmenge $\leq 3\%$). Die durchschnittlichen Alterungsraten des Stacks für die Betriebsdauer von 18.460 Stunden vor Beginn des starken Lecks in Ebene 2 betrug einschließlich der Verluste während aller Lastzyklen und des Zwischenbetriebs im Brennstoffzellen-Modus für 1500 Stunden 0,6%/kh für die Spannung und 8,2%/kh für den ASR bei 800 °C. Impedanzmessung und DRT-Analyse zeigten, dass der Hauptmechanismus der Degradierung der kontinuierlich erhöhte ohmsche Widerstand war, hauptsächlich aufgrund einer Abnahme der effektiven Leitfähigkeit der Brennstoffelektrode als Folge einer Ni-Abreicherung in der Elektrodenfunktionsschicht (siehe Abb. 17). Dies wurde durch eine Post-Mortem-Analyse bestätigt (Abb. 18). Verglichen mit dem Anstieg des ohmschen Widerstands war die Verschlechterung der Elektrodenpolarisation praktisch vernachlässigbar. Während des stationären Betriebs konnte jedoch ein kontinuierlicher leichter Polarisationsanstieg in der Lufolektrode beobachtet werden. Eine Delaminierung der Lufolektrode wurde auch nach dem Betrieb in beiden Ebenen beobachtet. Ob die geringfügig erhöhte Lufolektrodenpolarisation tatsächlich mit der Delaminierung zusammenhängt, ist schwer zu bestätigen, da die Delaminierung der Lufolektrode auch durch Harzinfiltation bei der Post-Test Präparation verursacht werden kann. Eine vorläufige Post-Mortem-Analyse ergab keinen Prozess, der die Stack-Leistung signifikant beeinflusste, mit Ausnahme der Ni-Abreicherung in der Funktionsschicht der Brennstoffelektrode. Detaillierte Analysen der Zellen werden zurzeit

durchgeführt. Während der letzten 2600 Betriebsstunden war die Leckrate in Schicht 2 dramatisch erhöht, höchstwahrscheinlich als Folge des Brands an der Kraftstoffeinlassseite in den Stack. Die genauen Zusammenhänge sind noch nicht bestätigt.

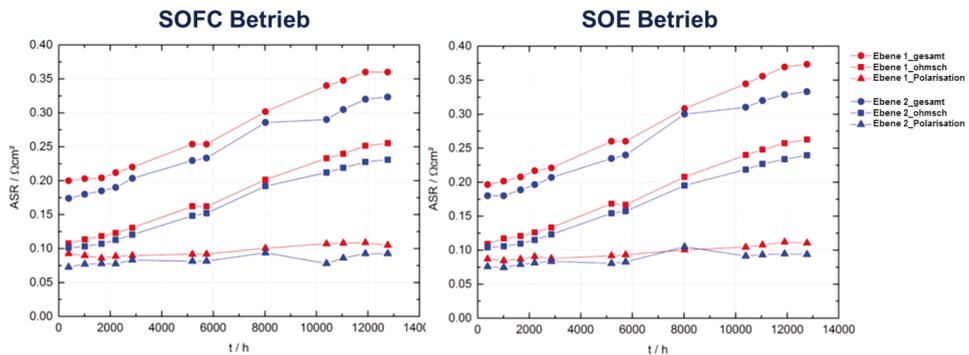


Abb. 17: F1002-165: ASRs basierend auf Nyquist-Plots - Der ohmsche Widerstand steigt kontinuierlich an (9 ~ 10% / 1000h), während die Polarisation nahezu konstant bleibt!

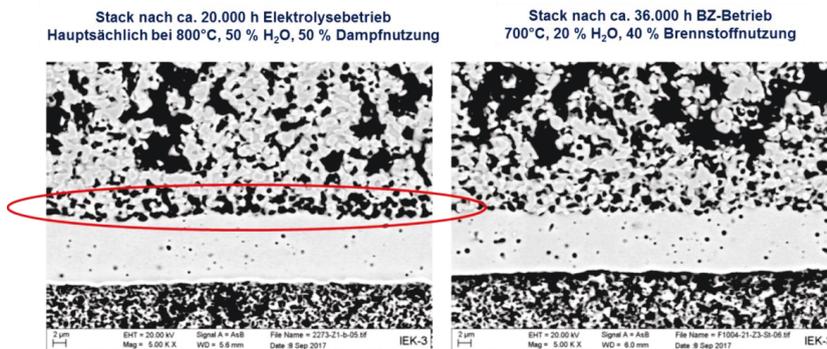


Abb. 18: Die Ni-Abreicherung an der Elektrolyt / Brennstoff-Elektroden-Grenzfläche während des SOEC-Betriebs war der Hauptgrund für die Verschlechterung des ohmschen Widerstands

3.1.2.4 System Engineering

5 kW rSOC Systementwicklung

In den letzten zwei Jahren wurde eine reversible 5-kW-Festoxidzellen-Anlage (rSOC) entwickelt. Einer der Hauptvorteile einer rSOC-Anlage besteht darin, dass derselbe SOC-Stack als Elektrolyseur (SOEC) und als Brennstoffzelle (SOFC) verwendet werden kann. Dies ist ideal, um die zeitliche Diskrepanz zwischen Energiebedarf und -angebot in Stromerzeugungsanlagen für erneuerbare Energien wie Photovoltaik und Windkraft zu managen. Bei Stromüberschuss kann die Anlage als Elektrolyseur betrieben werden, wodurch Dampf in speicherbaren Wasserstoff elektrolysiert wird. Zu einem späteren Zeitpunkt kann die Anlage bei Strombedarf im Brennstoffzellenmodus (SOFC) betrieben werden, wobei aus dem gespeicherten Wasserstoff Strom erzeugt wird. Es wurde ein Simulationsmodell der entwickelten rSOC-Anlage erstellt, das auf experimentellen Daten früherer SOFC-Stack-Tests und anderer früherer Komponententests basiert. Es wurde eine

Anlage gemäß Abb. 19 entwickelt, die den Stack je nach Betriebsart mit Wasserstoff, Dampf und Luft versorgen kann. Wichtig ist, dass der für den Elektrolyse-Modus benötigte Dampf in der Anlage erzeugt wird und somit kein externer Dampf erforderlich ist. Um die Effizienz beider Betriebsarten zu steigern, wurden unterschiedliche rSOC-Konzepte erarbeitet und verglichen. Im Bereich des Wärmemanagements wurde eine detaillierte Analyse der Abwärmenutzung für die gesamte Anlage durchgeführt. In beiden Modi wurde auch eine Abgasrückführung bei niedrigen Temperaturen (unter 100 °C) untersucht. Die Analyse ergab, dass die Kondensation in der Rezirkulationsschleife viele Vorteile hat. Im SOFC-Modus ermöglicht die Anodenabgasrückführung, dass das System im Vergleich zu einer Anlage ohne Rückführung eine höhere Kraftstoffnutzung des Systems erreicht. Bei sehr hohem Rezirkulationsgrad von über 90% ist eine geringe Brennstoffnutzung im Stack möglich. Dies hat zwei positive Auswirkungen: Der für die Kühlung erforderliche Luftstrom wird aufgrund der nennenswerten Kühlung durch den Anodenstrom verringert, und das Nernst-Potential steigt aufgrund des erhöhten Wasserstoffgehalts an. Dies ermöglicht elektrische Nettowirkungsgrade von über 60%. Im SOEC-Modus verhindert die Wasserstoffumwälzung die Degradation der Ni-Elektrode und begrenzt die Verwendung des gespeicherten Wasserstoffs auf die Startphase. Wenn keine zusätzliche Wärme oder Dampf aus externen Prozessen anfällt, liegt der auf den Heizwert bezogene Nettowirkungsgrad im Elektrolysemodus im Bereich von 75%.

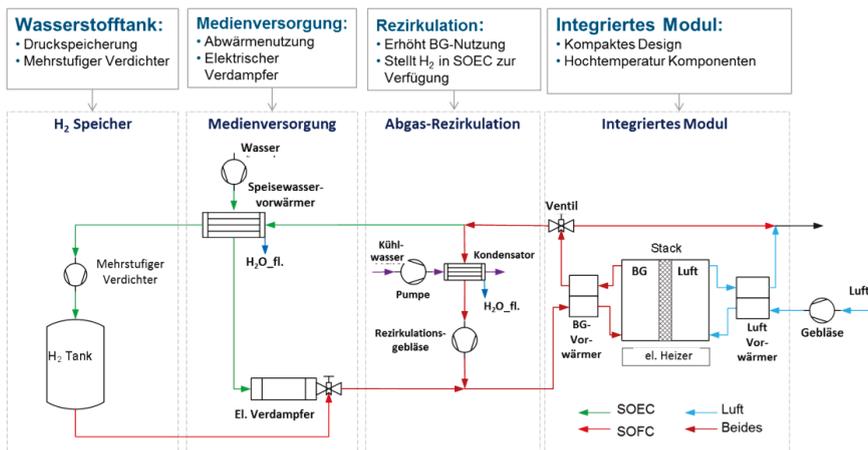


Abb. 19: Fließbild rSOC-Anlage

Die Anlage entsprechend Abb. 20 (ohne Spisewasservorwärmer und Wasserstofftank) wurde im November 2018 in Betrieb genommen. Im Brennstoffzellenbetrieb mit Wasserstoff konnte ein DC-Nettowirkungsgrad von 62% erreicht werden (unter Berücksichtigung eines Inverters mit 95% Wirkungsgrad entspricht dies einem elektrischen AC-Nettowirkungsgrad der Anlage von 59%). Erreicht wurde dies durch eine hohe Anodenabgasrezirkulationsrate, die zu einer Systembrennstoffnutzung von über 97% führte. Im Elektrolysemodus wurden bei einem elektrischen Input in das System von 14,9 kW 4,75 Nm³ Wasserstoff pro Stunde produziert, was einem Systemwirkungsgrad von 70 % entspricht. Die Anlage wird im Wechselmodus weiterbetrieben, um das Betriebsverhalten und die Anlagensteuerung zu optimieren und Möglichkeiten zur weiteren Wirkungsgradsteigerung zu analysieren.

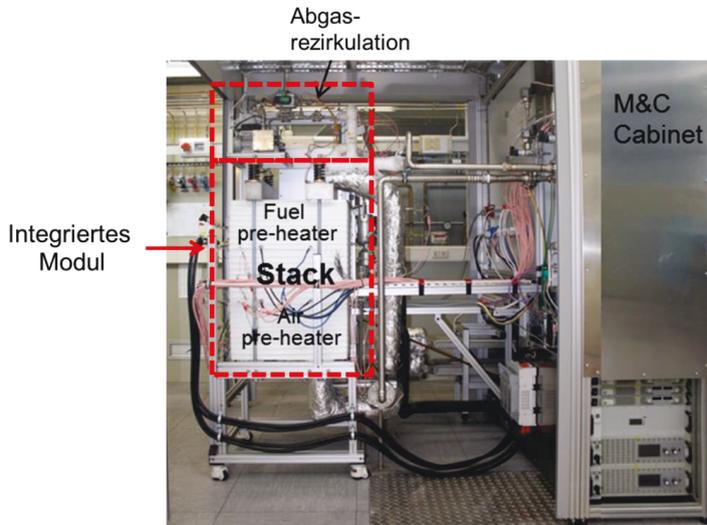


Abb. 20: Bild der rSOC-Anlage

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 FOB
R. Deja	5291 r.deja@fz-juelich.de	Systemsimulation, Entwicklung und Test von SOC-Systemkomponenten
Dr. Q. Fang	1573 q.fang@fz-juelich.de	Leiter SOC Elektrochemische Messtechnik, Testen von SOC-Stacks und Testauswertung und Analyse
K. Fitzek	1573 k.fitzek@fz-juelich.de	SOC, Elektrochemische Messtechnik, Testen von SOC-Stacks und Testauswertung
M. Frank	4394 ma.frank@fz-juelich.de	Systemsimulation, Entwicklung und Erprobung von rSOC-Systemkonzepten
I. Hoven	4053 i.hoven@fz-juelich.de	Elektrotechnik, Messdatenerfassung und Systemsteuerung
Dr. V.N. Nguyen	8393 v.n.nguyen@fz-juelich.de	Chemische Verfahrenstechnik, Entwicklung und Test von Systemkomponenten
Fr. U. de Haart	5170 u.de.haart@fz-juelich.de	Testen von SOC-Stacks und Testauswertung und Analytik

Ro. Peters	4664 ro.peters@fz-juelich.de	Leiter SOC Systems Engineering, Komponentenentwicklung, Systemdesign, System Engineering und Systemtest; CFD, Komponentenmodellierung
Y. Yan	5487 y.yan@fz-juelich.de	SOC, Elektrochemische Messtechnik, Testen von SOC-Stacks und Testauswertung

3.1.4 Wichtige Veröffentlichungen

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

Study of the catalytic combustion of lean hydrogen-air mixtures in a monolith reactor
International Journal of Hydrogen Energy 43 (36), (2018) 17520-17530

Frank M., Deja R., Peters Ro., Blum L., Stolten D.

Bypassing renewable variability with a reversible solid oxide cell plant
Applied Energy 217 (2018) 101–112

Preuster, P., Fang, Q., Peters, R., Deja, R., Nguyen, V.N., Blum, L., Stolten, D., Wasserscheid, P.

Solid oxide fuel cell operating on liquid organic hydrogen carrier-based hydrogen – making full use of heat integration potentials
International Journal of Hydrogen Energy 43(3) (2018) 1758-1768

Kennouche, D., Fang, Q., Blum, L., Stolten, D.

Analysis of the cathode electrical contact in SOFC stacks
Journal of the Electrochemical Society 165(9) (2018) 677-683

Fang, Q., Frey, C.E., Menzler, N.H., Blum, L.

Electrochemical performance and preliminary post-mortem analysis of a solid oxide cell stack with 20,000 h of operation
Journal of the Electrochemical Society 165(2) (2018) 38-45

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

Solid Oxide Electrolyzer Stack with 20,000 h of Operation
ECS Transactions 78 (1) (2017) 2885-2893

Peters Ro., Engelbracht M., Tiedemann W., Hoven I., Deja R., Nguyen V. N., Blum L., Stolten D.

Development and Test of a Solid Oxide Fuel Cell Subsystem with a Low Temperature Anode Off-gas Recirculation
ECS Transactions, 78 (1) (2017) 2489-2495

Yan Y., Fang Q., Blum L., Lehnert W.

Performance and degradation of an SOEC stack with different cell components
Electrochimica Acta 258 (2017) 1254-1261

Blum, L.

An Analysis of Contact Problems in Solid Oxide Fuel Cell Stacks Arising from Differences in Thermal Expansion Coefficients
Electrochimica Acta 223 (2017) 100-108

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

An On-Demand Safety Gas Generator for Solid Oxide Fuel Cell and Electrolyzer Systems
Fuel Cells, 17 (6) (2017) 882-889

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. 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 waren 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. Zukünftig steht die PEFC als Brennstoffzelle im Mittek der Systeme zur Stromversorgung.

3.2.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.2.2.1 Entwicklung der nächsten Reaktorgeneration für die autotherme Reformierung

Im IEK-3-Report für das Jahr 2017 wurde der ATR 12 mit seiner Funktionsweise und seinen technologischen Neuerungen eingehend vorgestellt. Noch einmal kurz zusammengefasst wurde die technische Ausführung des Überhitzers im ATR 12 so modifiziert, dass die bisher verwendete Rohrwendel zur Übertragung der Abwärme des Reformats auf den Massenstrom an Sattdampf durch konzentrische Schalen ersetzt wurde. Diese Veränderung bewirkt eine Verringerung des Druckverlustes in diesem Teil des Reformers und eine Homogenisierung der Medienströme. Die konzentrischen Schalen bieten außerdem genügend Raum, um einen elektrischen Heizdraht zu integrieren. Der Einbau eines solchen Heizelements bietet die Möglichkeit, den Reformer schnell und autonom anzufahren. An dieser Stelle soll diese Kurzdarstellung um einige interessante experimentelle Ergebnisse erweitert werden. Abb. 21 zeigt dazu die Volumenströme an Luft, den Massenstrom an Wasser und die Temperaturen in der Verdampfungskammer und der Mischkammer während des Startvorgangs des ATR 12 als Funktion der Zeit. Zu Beginn wurde der Stellwert des Heizdrahtes für den Volumenstrom an Luft bei Eintritt in die Verdampfungskammer ($3 \text{ m}^3/\text{h}$) auf $550 \text{ }^\circ\text{C}$ festgelegt. Vorangegangene Messreihen hatten gezeigt, dass niedrigere Stellwerte nicht zu ausreichend hohen Temperaturen an allen relevanten Stellen innerhalb des ATR 12 geführt hatten. Dieser Aufheizvorgang von Raumtemperatur auf $550 \text{ }^\circ\text{C}$ dauerte 27 Minuten und führte zu Temperaturen von $421 \text{ }^\circ\text{C}$ in der Verdampfungskammer und $442 \text{ }^\circ\text{C}$ in der Mischkammer des ATR 12.

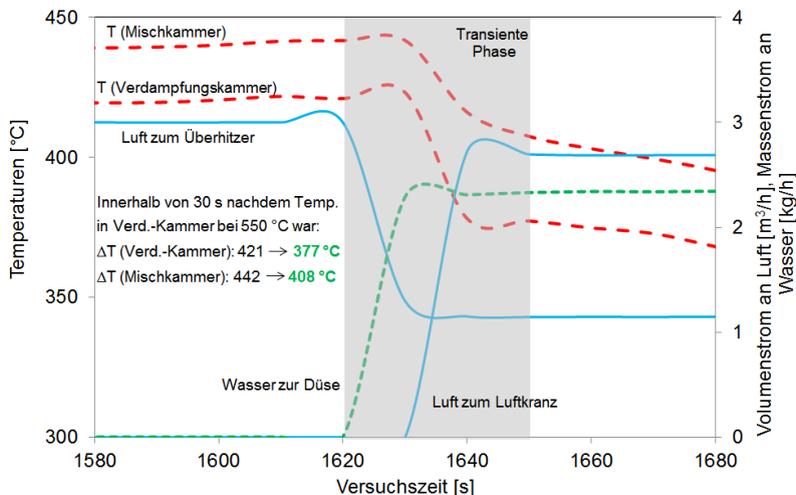


Abb. 21: Volumenströme an Luft, Massenstrom an Wasser und Temperaturen in der Verdampfungskammer und der Mischkammer während des Startvorgangs des ATR 12 als Funktion der Zeit

Unmittelbar nachdem dieser Stellwert erreicht worden war, wurde ein Massenstrom an Wasser von $2,34 \text{ kg/h}$ zugegeben. Wenige Sekunden später wurde der Luftstrom auf den Luftkranz (70%) und den Überhitzer (30%) aufgeteilt. Diese transiente Phase, in der sich konstante Volumen- und Massenströme einstellten und sich die Temperaturen stabilisierten, dauerte ca. 30 s. Im Verlauf dieser Phase fielen die Temperaturen in der Verdampfungskammer

kammer und der Mischkammer auf 377 °C bzw. 408 °C. Sie waren jedoch immer noch hoch genug, um bei direkt nachfolgender Zugabe an Dieseldieselkraftstoff dessen vollständige Verdampfung – eine zwingende Voraussetzung für einen stabilen Reformierbetrieb ohne Katalysatoralterung – sicherzustellen. Die beschriebene experimentelle Prozedur ist somit geeignet für einen zügigen Startvorgang des ATR 12.

3.2.2.2 Entwicklung der nächsten Reaktorgeneration für die Wasser-Gas-Shift Reaktion

Der Wasser-Gas-Shift-Reaktor (WGS) in der Brenngaserzeugungseinheit eines Brennstoffzellensystems hat die wichtige Funktion, die Konzentration an CO im Produktgas der autothermen Reformierung auf Werte zwischen 1,0 und 1,5 Vol.-%, zu verringern, um den Katalysator in der Anode der Brennstoffzelle vor irreversibler Vergiftung zu schützen. In diesem Kapitel wird die jüngste Entwicklung des IEK-3 auf diesem Gebiet vorgestellt, der WGS 6 in der 5 kW_e-Klasse. Der WGS 6 zeichnet sich durch ein grundlegend neues Konzept für die Anordnung der Hochtemperatur- (HTS) und Niedertemperatur-Shiftstufen (LTS) aus. Beide Stufen sind jetzt koaxial integriert in einem gemeinsamen Gehäuse, um höhere Werte für die Leistungsdichte und die spezifische Leistung zu erhalten, während in früheren Reaktorgenerationen diese Stufen parallel angeordnet waren. Abb. 22 zeigt schematisch das neue Konzept für die Anordnung der beiden Shiftstufen.

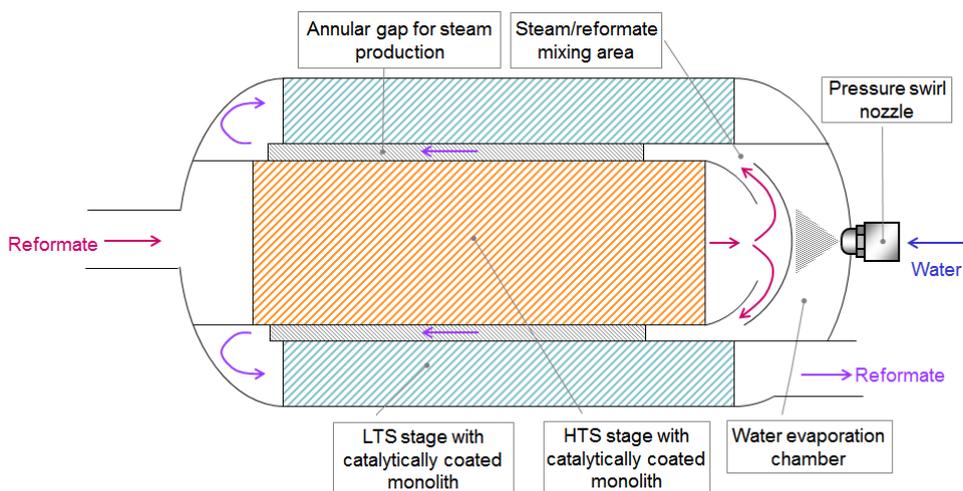


Abb. 22: Schematisches Konzept für die Anordnung von Hochtemperatur- und Niedertemperatur-Shiftstufen im WGS 6

Das Reformat aus dem autothermen Reformer (ca. 400 °C) strömt in den HTS-Monolithen, dessen katalytisch aktive Beschichtung mit einem Washcoat und Edelmetallpartikeln die Verringerung der Konzentration an CO fördert. Die heißen Moleküle im Reformat (450 °C) treffen dann auf die Unterseite einer halbkugelförmigen Prallfläche, auf deren Oberseite mittels einer Düse ein feiner Nebel aus Wassertröpfchen (20 °C) gespritzt wird. Mittels der Prallfläche wird der Enthalpiestrom des heißen Reformats nun auf die kalten Wassertröpfchen übertragen. Dadurch verdampft ein geringer Teil der Tröpfchen direkt, während der größte Teil einen Film auf der Oberseite der Prallfläche bildet. Dieser Film bewegt sich dann in den Ringspalt zwischen den HTS- und LTS-Stufen. Dort verdampft der Wasserfilm

vollständig und vermischt sich homogen mit dem Reformat. Am Ende des Ringspaltes wird der Reformatfluss (300 °C) wieder um 180 ° umgelenkt und strömt in die LTS-Stufe. Dort wird die Konzentration an CO im Reformat weiter auf Werte zwischen 0,8 Vol.-% und 1,5 Vol.-% herabgesetzt wie Abb. 23 zeigt. Es wird in dieser Abbildung deutlich, dass die Konzentration an CO im Produktgas des WGS 6 während der gesamten Versuchsdauer von 5.000 Stunden immer zwischen diesen Werten lag. Um diese lange Versuchsdauer realisieren zu können, wurden die Katalysatoren regelmäßig in einem heißen Luftstrom regeneriert. Die Abbildung weist nur einige wenige dieser Regenerationszeitpunkte aus. Das beschriebene neuartige Design des WGS 6 resultiert in einer Leistungsdichte von 12,2 kW/l und einer spezifischen Leistung von 11,2 kW/kg. Diese Werte sind doppelt so hoch wie die, die für frühere Reaktorgenerationen ermittelt werden konnten. Basierend auf den experimentellen Ergebnissen und den spezifischen Reaktordaten kann geschlossen werden, dass der WGS 6 für den Dauerbetrieb in einem kommerziellen Brennstoffzellensystem geeignet ist, welches dem Zweck der effizienten und nachhaltigen Energieumwandlung dient

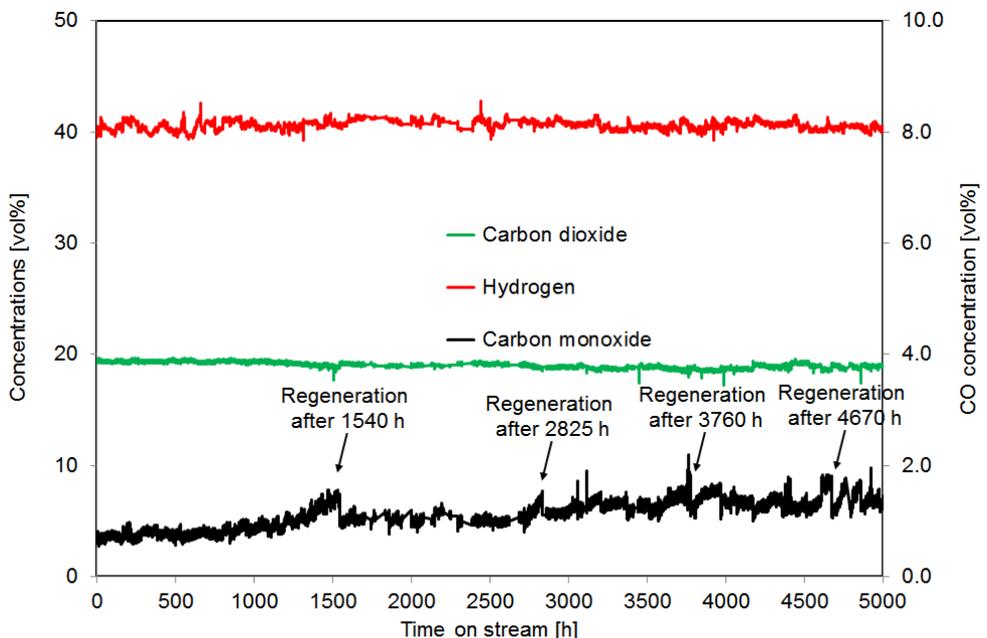


Abb. 23: Konzentrationen an H₂, CO₂ und CO mit dem WGS 6 während eines Langzeitversuches zur Wasser-Gas-Shift Reaktion über 5000 Stunden

3.2.2.3 Experimente an Pd/γ-Al₂O₃-Katalysatoren für die CH₄-Oxidation mittels Temporal Analysis of Products (TAP)

Erdgasbetriebene PKW und LKW gewinnen zunehmend an Bedeutung, da sie verglichen mit Benzin- oder Dieselfahrzeugen relativ geringe Mengen an kritischen Abgasen in die Umgebung abgeben. Der sogenannte „Methan-Slip“, der durch eine unvollständige motorische Verbrennung von Methan entsteht, macht jedoch eine katalytische Nachbehandlung des Abgases eines erdgasbetriebenen Fahrzeuges erforderlich. Methan hat ein sehr hohes Potential (Greenhouse Warming Potential: 28 gegenüber CO₂), als klimaschädliches

Treibhausgas zu wirken und darf deswegen nicht in die Umgebung abgegeben werden. Aus der Literatur ist Palladium als der aktivste Katalysator für die Oxidation von Methan im Temperaturbereich zwischen 200 °C und 500 °C bekannt. Bisherige Untersuchungen zeigen, dass die katalytische Aktivität davon abhängt, in welchem Verhältnis elementares Palladium und oxidische Palladiumspezies auf der Katalysatoroberfläche vorliegen. Bei den hier beschriebenen Versuchsreihen werden die Katalysatoren ohne spezielle Vorbehandlung („as received“) sowie nach oxidativer und reduktiver Konditionierung untersucht. Der Ansatz der Experimente, die gemeinsam mit dem Zentralinstitut für Engineering, Elektronik und Analytik (ZEA-3) des Forschungszentrums Jülich durchgeführt werden, ist es, die Röntgen-Photoelektronenspektroskopie bei Umgebungsdruck (AP-XPS) mit transienten kinetischen Experimenten mittels der Methodik der Temporal Analysis of Products (TAP) zu kombinieren. So sollen Zusammenhänge zwischen dem chemischen und elektronischen Zustand des Katalysators und seiner katalytischen Aktivität für die Methan-Oxidation gefunden werden. Die TAP-Experimente mit dem nicht vorbehandelten Pd/ γ -Al₂O₃-Katalysator zeigten einen ansteigenden Umsatz an Methan mit steigender Temperatur. Bei 200 °C war er mit ca. 14% noch sehr gering. Bei 250 °C betrug er schon 43% und stieg auf bereits 87% bei 300 °C an. Bei Temperaturen von 350 °C und 400 °C war der Methan-Umsatz dann fast vollständig. Die Aktivierungsenergie für die Methanoxidation wurde zu ca. 92,5 kJ/mol berechnet. Hierbei ist zu beachten, dass diese Experimente ohne Zugabe von O₂ durchgeführt wurden, so dass die Oxidationsreaktionen nur durch auf der Katalysatoroberfläche chemisorbierte O₂-Spezies ermöglicht wurden. Abb. 24 zeigt beispielhaft die Ausgangsintensitäten der CH₄-Pulse bei 350 °C, als der Umsatz an CH₄ annähernd vollständig war.

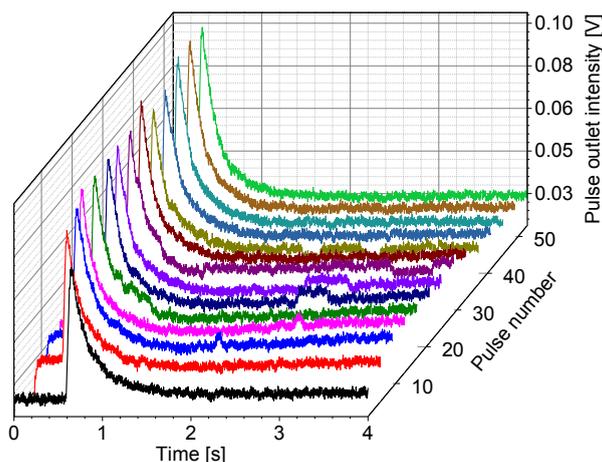


Abb. 24: Ausgangsintensitäten der CH₄-Pulse während der CH₄-Oxidation auf dem Pd/ γ -Al₂O₃-Katalysator bei 350 °C als Funktion der Zeit und der Pulszahl

Alle Signale sind untereinander sehr ähnlich und damit gut reproduzierbar und wurden gemittelt für die Umsatzberechnung herangezogen. Die Ausgangsintensitäten der Pulse für die Reaktionsprodukte CO und CO₂ aus der gleichen Versuchsreihe legen den Schluss nahe, dass CO selektiver bei niedrigeren Temperaturen zwischen 200 °C und 300 °C gebildet wurde, während CO₂ stärker bei Temperaturen von 350 °C und 400 °C entstand. Außerdem liefern die gemessenen Ausgangsintensitäten für CH₄, CO und CO₂ Hinweise darauf, dass CH₄ sich auf dem Katalysator zersetzte und möglicherweise kohlenstoffhaltige Ablagerungen auf der Katalysatoroberfläche gebildet wurden. Zusätzliche Experimente zur

Adsorption/Desorption von CO und CO₂ auf dem verwendeten Pd/γ-Al₂O₃-Katalysator, ohne dass gleichzeitig Methan gepulst wurde, konnten nachweisen, dass CO und CO₂ im Temperaturbereich zwischen 200 °C und 400 °C nur in geringen Mengen von der Katalysatoroberfläche desorbieren. Beide Moleküle sind sehr stark an die aktiven Zentren gebunden. Die noch ausstehenden AP-XPS-Experimente werden Aufschluss darüber geben, welche Pd-Spezies (metallisch oder oxidisch) unter diesen Reaktionsbedingungen auf der Katalysatoroberfläche existieren, was ihr zahlenmäßiges Verhältnis ist, und ob und wie sich diese Ergebnisse mit der katalytischen Aktivität korrelieren lassen.

3.2.2.4 Dieselreformierungssysteme für die Bordstromversorgung

Das Jülicher Brenngaserzeugungssystem in der fünften Generation (Package 5) besteht aus den Kernkomponenten ATR AH3 für die autotherme Reformierung, WGS 4 für die Wasser-Gas-Shiftreaktion und CAB 3 für die katalytische Verbrennung. Diese werden durch einen Mikrostruktur-Wärmeüberträger des KIT/ IMVT sowie einen kommerziellen Dieselmotor der Fa. Physitron GmbH ergänzt. Zudem wurde am IEK-3 ein maßgeschneiderter Rohrbündelwärmetauscher entwickelt, um die heißen Abgase des Dieselmotors beim Systemstart wärmetechnisch zurückzukoppeln. Das Gesamtsystem inklusive Isolierung weist ein Volumen von 74.1 l auf. Abb. 25 zeigt das Brenngaserzeugungssystem der 5. Generation.



Abb. 25: Das Brenngaserzeugungssystem der 5. Generation des IEK-3

Im Folgenden werden experimentelle Ergebnisse mit diesem System erläutert. Im ersten Teil wird die Startstrategie präsentiert. Im zweiten Teil folgt der stationäre Betrieb.

Startstrategie des Brenngaserzeugungssystems

Ziel der Startstrategie ist es, das Brenngaserzeugungssystem in kürzester Zeit und mit geringstem Energieaufwand aufzuheizen, den Reformer in Betrieb zu nehmen, externe Energiezufuhr auszuschalten und die gewünschte Produktgasqualität für die Brennstoffzelle zu liefern. Das Brenngaserzeugungssystem verfügt über ein thermisches Start-up System welches auf den Einsatz eines Dieselmotors beruht. Die Wärme der heißen Abgase des Motors werden im nachgeschalteten RWÜ zunächst auf Luft übertragen. Die dadurch erwärmte Luft heizt den Reformer sowie die nachgeschalteten Systemkomponenten WGS, μ-Wärmetauscher und CAB auf. Nach dem Überschreiten des Taupunktes in allen Katalysatoren im System wird der Rohrbündelwärmetauscher als Verdampfer benutzt. Für

diesen Zweck beinhaltet der entwickelte Rohrbündelwärmetauscher ein integriertes System zum Einspritzen von flüssigem Wasser. In dieser zweiten Phase der Startstrategie strömt weiterhin Luft zusammen mit Wasser durch den Rohrbündelwärmetauscher.

Im Rahmen der ersten Aufheizversuche mit dem System wurden kritische Parameter identifiziert. Bei einer vordefinierten Betriebszeit des Dieselmotors von 35 min und 8 kW Brennerleistung, war es möglich, 30 min nach dem Start auf die vorgegebenen Startparameter umzuschalten, um die Reformierung im nächsten Schritt starten zu können. Der Energieverbrauch wurde mit 3,3 kWh kalkuliert. In diesem Versuch wurde festgestellt, dass der katalytische Brenner die Komponente ist, die ein schnelleres Startverfahren verhindert. Zu den kritischen Stellen im System gehören die Schnittstelle sowie das Kühlkonzept zwischen den Shiftstufen, der μ -Wärmetauscher sowie seine Schnittstelle zu dem Shiftreaktor und die Rohrleitung zwischen dem μ -Wärmetauscher und dem katalytischen Brenner. Zusammen mit der obigen Information, dass der katalytische Brenner ein schnelleres Startverfahren verhindert, wurde entschieden, auf den letzten Punkt zu reagieren, um die Startzeit zu reduzieren. Die ersten zwei Punkte wurden durch das Design der jeweiligen Komponente verursacht und können nicht durch systemtechnische Ansätze verbessert werden.

Durch den Einsatz einer kommerziell erhältlichen Glühkerze, integriert in die Rohrleitung vor dem katalytischen Brenner, konnte zum einen die oben genannte Wärmesenke eliminiert werden, zum anderen der Monolith des katalytischen Brenners beim Aufheizvorgang aktiv mit aufgewärmt werden. Ein zweiter Aufheizversuch mit Hilfe der Glühkerze zeigte, dass die Startbedingungen bereits nach 20 min erreicht wurden. In der ersten Versuchsreihe ohne Glühkerze betrug die Startzeit noch 30 min. Durch diese Maßnahme war der katalytische Brenner nicht mehr die limitierende Komponente im System, sondern der Reformer. Mit Hilfe des beschleunigten Aufheizvorgangs betrug der Energieverbrauch des Dieselmotors nur noch 2,5 kWh. Der Stromverbrauch der Glühkerze wurde mit 106 Wh bestimmt.

In einem dritten Versuch zur Validierung der Gesamtstrategie wurde der Dieselmotor mit einer Leistung von 8 kW für eine vorprogrammierte Zeit von 25 min betrieben. Zeitgleich mit der Inbetriebnahme des Dieselmotors wurden 12 m³_N/h Luft durch den Rohrbündelwärmetauscher hinter dem Brenner ins System eingeführt. Nach einer Zeitspanne von 12 min nach dem Start, wurde die Glühkerze mit 12,1 V und 59,3 A in Betrieb genommen. Parallel strömte eine zusätzliche Luftmenge von 10 m³_N/h durch die Glühkerze. Bereits 18 min nach dem Start betrug die Temperatur des Monolithen im katalytischen Brenner 105 °C und lag damit weit oberhalb des Taupunkts. Zu diesem Zeitpunkt begann die Wasserzugabe zum Rohrbündelwärmetauscher. Nach einer Minute wurde die Glühkerze ausgeschaltet und es erfolgte eine Umstellung auf die vorgegebenen Startwerte. Diese wurden mit 999 g/h Diesel, und Wasser- und Luftmengen basierend auf molaren H₂O/C- und O₂/C Verhältnissen von 1,9 und beziehungsweise 0,47 festgelegt. Ein Anteil von 30% der gesamten Luftmenge wurde dem Reformer durch den Dampfweg (über den Rohrbündelwärmetauscher) zugeführt.

Abb. 26 zeigt einen rapiden Temperaturanstieg im ATR-Monolith (5 mm nach Eintritt) zu diesem Zeitpunkt. Dieser wird durch die stark exotherme Oxidationsreaktion im Reformer verursacht. Dies ist ein Zeichen für den Beginn der Reformierung im System. Nach weiteren 3 Minuten wurde die Menge an Diesel auf 1.350 g/h erhöht. Hiermit wurde die maximale Leistung des Systems, bestimmt durch die Shiftstufen, erreicht. Beim Zeitpunkt von 25 min nach dem Start wurde der Dieselzufuhr zum Dieselmotor gestoppt. Nach weiteren 2

Minuten wurde die Bereitstellung von überhitztem Dampf für die Reformierung komplett von Reformer und katalytischem Brenner übernommen. Ein autarker Systembetrieb wurde hierdurch nach 27 min erreicht. Nach weiteren 4 Minuten konnte die Konzentration im feuchten Produktgas auf einen Wert kleiner als 1,2 Vol.-% reduziert werden. Bei dieser Konzentration kann das bereitgestellte Reformat einer Hochtemperatur PEFC zugeführt werden, in der aus wasserstoffreichem Reformat Strom und Wärme produziert werden.

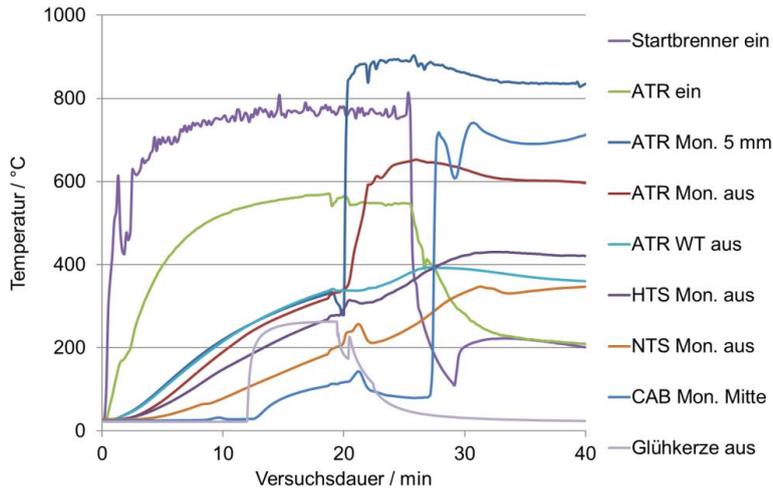


Abb. 26: Verlauf der Temperaturen im Brenngaserzeugungssystem Package 5

Zusammenfassend konnte durch die Hybridstartstrategie mit Hilfe eines Dieselmotors und einer Glühkerze innerhalb von 22 min nach dem Start die volle Leistung des Systems erreicht werden. Des Weiteren wurde ein autarker Systembetrieb nach 27 min erreicht. Das Startverfahren konnte nach 31 min abgeschlossen werden, indem eine ausreichende Produktgasqualität für eine HT-PEFC bereitgestellt wurde. Diese Startzeit ist in Übereinstimmung mit dem 30 min - Ziel der US DOE⁶ für das Jahr 2020 für Dieselbetriebene Brennstoffzellen-APUs für LKW in der 1-10 kW_{el}-Leistungsklasse. In diesem Startversuch betrug der Energiebedarf des Dieselmotors berechnet aus dem Dieselmoterverbrauch 2,5 kWh und der elektrische Energieverbrauch der Glühkerze 90 Wh.

Stationärer Betrieb des Systems

Neben der Optimierung und Validierung der Startstrategie des Systems wurde der stationäre Betrieb ebenfalls untersucht und optimiert. Die Strategien zum Anfahren, Betrieb, Abfahren sowie die Regeneration des Systems basieren auf den Erkenntnissen, die in⁷ veröffentlicht wurden und hier nicht näher erläutert werden.

Im Rahmen der Versuche mit dem Kraftstoff NExBTL-Diesel wurde gezeigt, dass das System idealerweise bei Eintrittstemperaturen zwischen 356 – 400 °C für die Hochtemperatur-Shiftstufe (HTS) und 320 – 330 °C für die Niedertemperatur-Shiftstufe (NTS) betrieben

⁶ US DOE: Department of Energy, Ministerium für Energie der U.S.A.

⁷ Samsun et al., J Power Sources 355 (2017), 44-52

werden kann, um die CO-Konzentration hinter der NTS-Stufe unter 1,25 Vol.-% im trockenen Produktgas zu halten. Die gemessenen durchschnittlichen CO-Konzentrationen lagen zwischen 0,92 Vol.-% und 1,2 Vol.-%. Die Betriebsdauer wurde zwischen 3 h und 24 h variiert. Das System wurde immer bei seiner maximalen Leistung betrieben. Hiermit wurde ein extremer Fall für die Anwendung als Bordstromversorgung simuliert. Die molaren Verhältnisse O_2/C und H_2O/C im Reformier sind konstant bei 0,47 beziehungsweise 1,9. Ein Anteil von 70% der gesamten Luftmenge wurde dem Reformier ohne Vorwärmung durch die Reformiermischkammer zugeführt. Die restliche Menge wurde dem Reformier durch den Dampfweg vorgewärmt zugeführt; zusammen mit dem überhitzten Dampf aus dem katalytischen Brenner. Ein Anteil von 65-75% des Wassers für die Reformierung wurde im integrierten Wärmetauscher des katalytischen Brenners verdampft und leicht überhitzt. Eine Übersicht der Ergebnisse für die erzielten CO-Konzentrationen hinter der jeweiligen Shiftstufe sowie die Versuchsdauer sind in Abb. 27 dargestellt.

Die Versuche mit entschwefeltem Flugturbinenkraftstoff Jet A-1 (HC Kerosin) haben gezeigt, dass ein erhöhtes Temperaturniveau im System durch höhere Anteile der Wasserdampfbereitstellung im katalytischen Brenner, höhere O_2/C -Verhältnisse im Reformier, sowie eine Vorwärmung der Gesamtmenge an Reformierungsluft erforderlich ist, um die Bildung der unerwünschten Nebenprodukte im Reformier zu reduzieren oder sogar zu eliminieren. Gleichzeitig wurde aber festgestellt, dass dieses erhöhte Temperaturniveau im System auch die Temperaturen in den Shiftstufen erhöht hat, was zu höheren CO-Konzentrationen geführt hat. Weil die Ziel-Konzentration von 1,25 Vol.-% in allen Versuchen mit HC-Kerosin erreicht wurde (1,03 - 1,16 Vol.-%), ist es trotzdem empfehlenswert, das System mit angepassten Parametern (z.B. molares O_2/C -Verhältnis von 0,49 statt 0,47) zu betreiben. Eine detaillierte Auflistung der Versuchsparameter für alle Versuche sind in⁸ zu finden.

Für die Versuche mit Premiumdiesel Aral Ultimate war es nicht nur empfehlenswert, sondern auch notwendig den Reformier mit angepassten Parametern zu betreiben, um den Zielwert für CO-Konzentrationen mit diesem Kraftstoff zu erreichen. Die höchsten Werte (1,50 Vol.-%) und die niedrigsten (0,83 (Vol.-%)) der CO-Konzentrationen hinter den Shiftstufen wurden während des Systembetriebs mit diesem Kraftstoff beobachtet. Im optimiertem Fall (Versuche 16 und 17) wurde der Reformier mit einem molaren O_2/C -Verhältnis von 0,49, einem H_2O/C -Verhältnis von 2,2, mit kompletter Vorwärmung der Luft und einem Anteil von 75% der Wasserverdampfung im katalytischen Brenner, betrieben.

Abb. 27 fasst die wichtigsten Ergebnisse aller Versuche zusammen. Es war möglich, mit allen eingesetzten Kraftstoffen das Ziel 1,25 Vol.-% CO im trockenen Produktgas des Shiftreaktors zu erreichen und dabei gleichzeitig einen autarken Systembetrieb ohne externe Wärmezufuhr zu demonstrieren.

⁸ Samsun et al., Applied Energy 226 (2018), 145-159

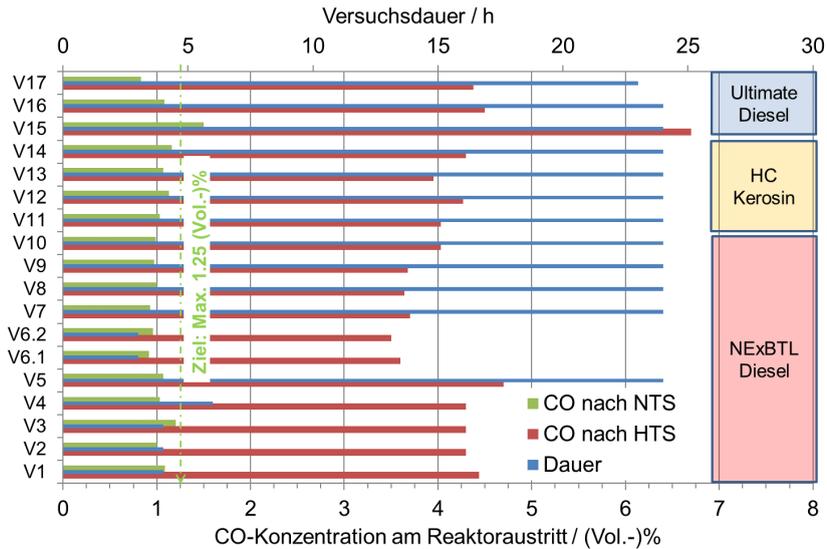


Abb. 27: Zusammenfassung der wichtigen Versuchsergebnissen aus dem stationären Betrieb des Brenngaserzeugungssystems Package 5.

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
J. L. Breuer	96984 ja.breuer@fz-juelich.de	Zukünftige Kraftstoffe, Verkehrs- und Emissionsmodellierung,
F. Schorn	4394 f.schorn@fz-juelich.de	Zukünftige Kraftstoffe, Prozessanalyse methanolbasierter Elektrokraftstoffe

J. Häusler	5393 j.hausler@fz-juelich.de	Zukünftige Kraftstoffe, Alkoholsynthesen
H. Huang	85193 h.huang@fz-juelich.de	Zukünftige Kraftstoffe, Prozessanalyse Membranverfahren

3.2.4 Wichtige Veröffentlichungen und Dissertationen

Veröffentlichungen

Pasel, J.; Samsun, R.C.; Tschauder, A.; Peters, R. Stolten, D.

Water-gas shift reactor for fuel cell systems: Stable operation for 5000 hours

International Journal of Hydrogen Energy 43 (2018) 19222-19230

Schemme, S.; Breuer, J.L.; Samsun, R.C.; Peters, R.; Detlef Stolten, D.

Promising catalytic synthesis pathways towards higher alcohols as suitable transport fuels based on H₂ and CO₂

Journal of CO₂ Utilization 27 (2018) 223–237

Samsun, R.C.; Prawitz, M.; Tschauder, A.; Pasel, J.; Pfeifer, P.; Peters, R.; Stolten, D.

An integrated diesel fuel processing system with thermal start-up for fuel cells

Applied Energy 226 (2018) 145–159

Peters, R.; Pasel, J.; Samsun, R.C.; Scharf, F.; Tschauder, A.; Stolten D.

Heat exchanger design for autothermal reforming of diesel,

International Journal of Hydrogen Energy 43 (2018) 11830-11846

Krekel, D.; Samsun, R.C.; Peters, R.; Stolten, D.

The separation of CO₂ from ambient air – A techno-economic assessment

Applied Energy 218 (2018) 361-381

Meißner, J.; Weiske, S.; Faidel, D.; Tschauder, A.; Samsun, R. C.; Pasel, J.; Peters, R.; Stolten, D.

Highly integrated catalytic burner with laser-additive manufactured manifolds

Reaction Chemistry Engineering, 2017, 2, 437

Pasel, J.; Samsun, R.C.; Tschauder, A.; Peters, Stolten, D.

Advances in autothermal reformer design,

Applied Energy 198 (2017) 88-98

Samsun, R.C.; Krekel, D.; Pasel, J.; Prawitz, M.; Peters, R.; Stolten, D.

A diesel fuel processor for fuel-cell-based auxiliary power unit applications

Journal of Power Sources 355 (2017) 44-52

Peters, R.; Pasel, J.; Samsun, R.C.; Scharf, F.; Tschauder, A.; Müller, M.; Müller, A.; Beer, M.; Stolten, D.

Spray formation of middle distillates for autothermal reforming

International Journal of Hydrogen Energy 42 (2017) 16946-16960

Peters, R.

Identification and thermodynamic analysis of reaction pathways of methylal and OME-n formation

Energy 138 (2017) 1221-1246

Schemme, S.; Samsun, R.C.; Peters, R.; Stolten, D.

Power-to-fuel as a key to sustainable transport systems – An analysis of diesel fuels produced from CO₂ and renewable electricity

Fuel 205 (2017) 198–221

Dissertationen

Krekel, D.

Betriebsstrategien für Brenngaserzeugungssysteme zur Anwendung in HT-PEFC-Hilfsstromaggregaten

Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, Band 356, 2017.

ISBN 978-3-95806-203-0

3.3 Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen

3.3.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Im Rahmen einer Umentorichtung rückte das Thema Niedertemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle (PEFC) verstärkt in den Vordergrund. Gleichzeitig wurde die Forschung an der Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle (HT-PEFC) zurückgefahren. Das Know-how, welches in über 10 Jahren HT-PEFC Forschung erworben wurde, konnte auf die PEFC-Forschung übertragen werden. Dies gilt sowohl für die experimentell als auch für die theoretisch motivierten Arbeiten. Aufgrund der unterschiedlichen Betriebstemperaturen und Materialien der PEFC im Vergleich zur HT-PEFC kamen naturgemäß neue Aufgaben und Herausforderungen auf das Team zu. Als ein Beispiel sei das Thema Zweiphasenströmung genannt. In der HT-PEFC liegt, aufgrund der typischen Betriebstemperatur von 160 °C, kein flüssiges Wasser in den Kanälen und den porösen Transportschichten vor. Im Gegensatz hierzu ist bei typischen Betriebsbedingungen im Bereich der PEFC bei Umgebungsdruck flüssiges Wasser in allen Zellkomponenten vorhanden. Dieses, auf der einen Seite störende Wasser, ist auf der anderen Seite notwendig, um die Leitfähigkeit der Polymermembran sicherzustellen. Darüber hinaus hat das Wassermanagement in den Zellen lebensdauerrelevante Effekte. Der Wasserhaushalt in Zellkomponenten, Zellen und Stacks entwickelte sich somit als zentrales Thema der verfahrenstechnischen Arbeiten im Bereich der PEFC-Forschung. Ein Schwerpunkt innerhalb dieses Themas ist die Modellierung und Simulation von der Zellkomponente bis zum Stack. Neben verschiedenen Simulationsmethoden, angepasst an die Aufgabenstellung, ist die Methoden- und Skalenkopplung eine wesentliche Herausforderung, welcher sich die Abteilung gestellt hat. Die sich hervorragend ergänzenden Kompetenzen der beteiligten Physiker, Chemiker, Maschinenbauingenieure und Informatiker erlauben eine Betrachtung der Phänomene aus unterschiedlichen Perspektiven und führen zu innovativen Modellierungsansätzen. Die Komplexität der Aufgabenstellung verbunden mit der hohen geforderten räumlichen Auflösung der Simulationen erfordert eine anspruchsvolle Rechnerinfrastruktur. Im Rahmen der Jülich Aachen Research Alliance (JARA) werden High Performance Computer (HPC) sowohl der RWTH als auch des Forschungszentrum verwendet, um numerische Lösungen zu generieren. Ein weiter wichtiger Aspekt dieser theoretischen Arbeiten ist, dass sowohl die Simulationen als auch die zugrundeliegenden Modelle im Sinne einer wissenschaftlichen Transparenz nachvollziehbar sind. Dies ist ein wesentlicher, wenn nicht sogar der ausschlaggebende Grund, dass kommerzielle Software für unsere Arbeiten an Bedeutung verloren hat. Der Fokus liegt deshalb seit einigen Jahren im Bereich von Open Source Software. Insbesondere im Bereich der Computational Fluid Dynamics (CFD) wird konsequent OpenFOAM als Basis für die Simulationsarbeiten eingesetzt. Der wünschenswerte Austausch mit anderen Forschergruppen konnte hiermit deutlich verstärkt werden und mündete in einer leitenden Funktion innerhalb des „Technology Collaboration Programme on Advanced Fuel Cells“ der International Energy Agency (IEA).

Eine Grundvoraussetzung um verlässliche Aussagen aus den Simulationen ableiten zu können, ist die experimentelle Validierung. Erst dies verschafft den Modellen die notwendige Aussagekraft, um diese sinnvoll einsetzen zu können. Eine Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit Strom-Spannungskurven ist eine notwendige aber nicht hinreichende Bedingung für die Überprüfung der Modellgültigkeit. Eine weiter integrale Aussage kann durch Messungen des Druckverlustes zwischen Zelleingang und Zellausgang

als Funktion von Stromdichte, Stöchiometrie und Temperatur gewonnen werden. Aufgrund der in PEFCs vorliegenden Zweiphasenströmungsphänomene sind Flutungseffekte detektierbar. Für eine Modellvalidierung müssen jedoch auch lokale Effekte herangezogen werden. Typischerweise sind dies lokale Stromdichte- und Temperaturverteilungen, aber auch die Visualisierung der lokalen Wassertropfendynamik in einer Zelle. Hierzu arbeitet das Team mit Kollegen von Paul Scherrer Institut (PSI) in der Schweiz aber auch mit Kollegen des Hemholtz-Zentrums Berlin (HZB) zusammen. Darüber hinaus ist ein im IEK-3 verfügbares Nano-CT ein wesentliches Instrument für ex-situ und operando Messungen.

3.3.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.3.2.1 Untersuchungen zum Einfluss der GDL-Mechanik auf den PEFC-Betrieb

Bei der Assemblierung von Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen werden die einzelnen funktionalen Schichten mithilfe mechanischer Spannvorrichtungen miteinander kontaktiert. Zwei gegenläufige Effekte erschweren die Einstellung eines optimalen Anpressdruckes auf der aktiven Fläche. Um einen möglichst geringen Kontaktwiderstand zu erlangen, wird ein hoher Druck auf der aktiven Fläche benötigt. Ein hoher Anpressdruck führt jedoch zu einem erhöhten Diffusionswiderstand der Gase in der Gaskonzentrationslage (GDL), welcher wiederum zu einer Verringerung der Zellspannung führt, da die Gaskonzentration auf der aktiven Zellfläche geringer wird.

Um dieses Optimum experimentell zu bestimmen, wird eine Testzelle der Firma Baltic FuelCells GmbH verwendet. Diese Zelle ermöglicht es, den durchschnittlichen Anpressdruck auf der aktiven Fläche im Brennstoffzellenbetrieb im Bereich von $0,1 \text{ N/mm}^2$ bis $2,7 \text{ N/mm}^2$ zu variieren. Die Testzelle wird mit einer Membran-Elektroden-Einheit (MEA) der Firma W. L. Gore & Associates GmbH für Niedertemperatur-PEFCs und verschiedenen, häufig verwendeten GDL-Materialien kombiniert. Als Strömungsverteiler dienen Graphit-Komposit-Flowfieldplatten mit Mäanderstruktur.

Zur Ermittlung des optimalen Anpressdruckes werden Polarisationskurven bei unterschiedlichen Anpressdrücken gemessen. Um die Auswirkungen der mechanischen Schädigungen der Zellkomponenten und vor allem der GDL auf die Zellperformance zu erfassen, wird der Anpressdruck vom niedrigsten zum höchsten Wert gesteigert und anschließend wieder verringert. Die Zelleleistungen für den Hin- und Rückweg werden bei den jeweiligen Druckstufen miteinander verglichen. Auszüge dieser Messungen sind in Abb. 28 dargestellt. Hier ist die maximale Leistungsdichte der Zelle in Abhängigkeit des Anpressdruckes für die GDL-Materialien 29BC der Firma SGL, TGP-H 060 der Firma Toray und H2315 C2 der Firma Freudenberg aufgetragen. In Abb. 28 ist zu sehen, dass sich die GDL-Materialien sehr unterschiedlich verhalten. So bildet das SGL-Material ein scharfes Optimum bei etwa $0,6 \text{ N/mm}^2$ aus, das Toray-Material ein breiteres optimales Arbeitsfenster von $0,6$ bis $1,6 \text{ N/mm}^2$ und das Freudenberg-Material zeigt sich am robustesten und hat bis zum Erreichen des maximal möglichen Anpressdruckes von $2,6 \text{ N/mm}^2$ ein nahezu konstantes Leistungsmaximum. Ausgehend vom maximalen Anpressdruck wurde der Druck wieder verringert. Bei den SGL- und Toray-Materialien fällt auf, dass die maximale Leistungsdichte bei Verringerung des Anpressdruckes nicht wieder ansteigt. Das deutet auf eine bleibende, mechanische Schädigung der GDL hin. Zur genaueren Analyse der eingetretenen Schäden werden REM und Nano-CT Aufnahmen der GDL-Materialien erstellt.

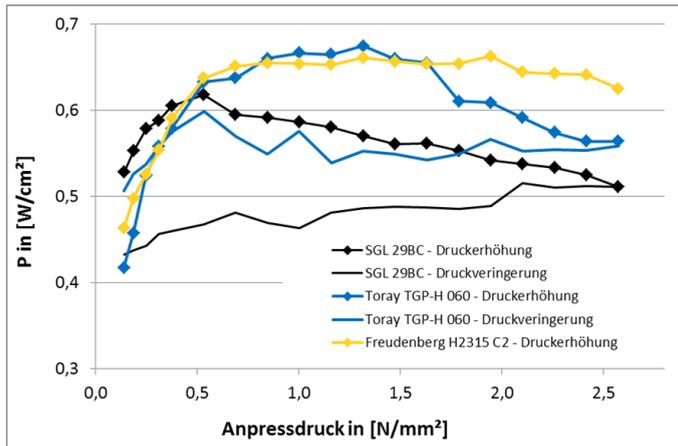


Abb. 28: Maximale Leistungsdichte einer Einzelzelle in Abhängigkeit des durchschnittlichen Anpressdrucks für unterschiedliche GDL-Typen

In Abb. 29 ist zu sehen, dass die mechanischen Schädigungen stark vom verwendeten GDL-Typ abhängen. Dazu wurden die Proben mit 6 N/mm² beaufschlagt, da dies in etwa der Druck ist, der sich unter dem Steg des Flowfields im Brennstoffzellenbetrieb aufgrund des Kanal/Steg-Verhältnisses von 1:1 einstellt. So zeigen sich die SGL- und Freudenberg-Materialien augenscheinlich unbeeinträchtigt von Anpressdrücken bis 6 N/mm², während das Toray-Material deutliche Schäden der Faserstruktur erleidet.

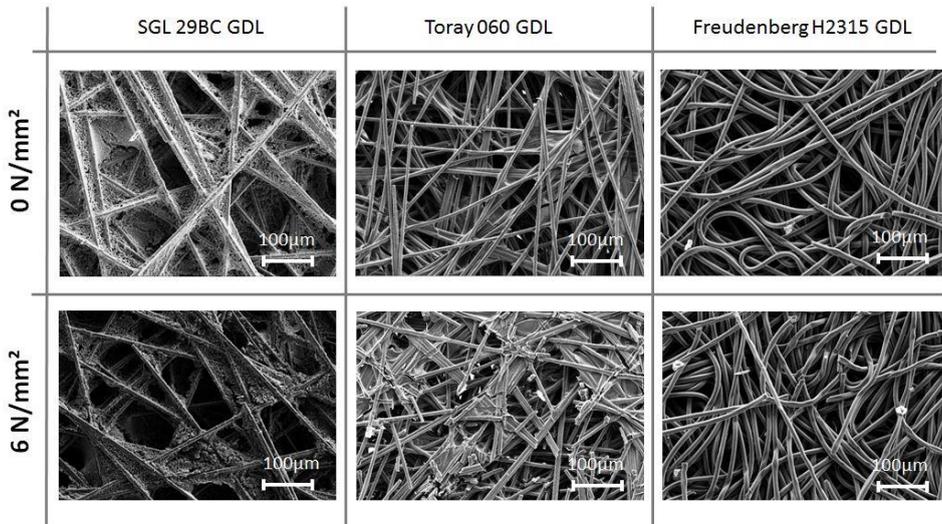


Abb. 29: Mechanische Schädigung der Fasern durch Anpressdruck

Die REM-Bildaufnahmen geben jedoch nur Aufschluss über die oberflächlichen Schäden der Faserstruktur. Die erstellten Nano-CT-Aufnahmen im unbelasteten Zustand nach mechanischer Beanspruchung (Abb. 30) zeigen, dass das SGL-Material trotz fehlender Faserbrüche eine stark veränderte 3D-Struktur aufweist. Hier brechen keine Fasern, dafür

findet eine Umverteilung und Stauchung des GDL-Binders statt, was zu einer Dickenänderung und damit zu einer Beeinträchtigung der Porosität und der Zelleistung führt. Einzig das Freudenberg-Material zeigt sich von Drücken bis 6 N/mm^2 unbeeindruckt und erleidet keine größeren bleibenden Schäden der Struktur, was sich auch schon in den Verläufen der Leistungskurve gezeigt hat.

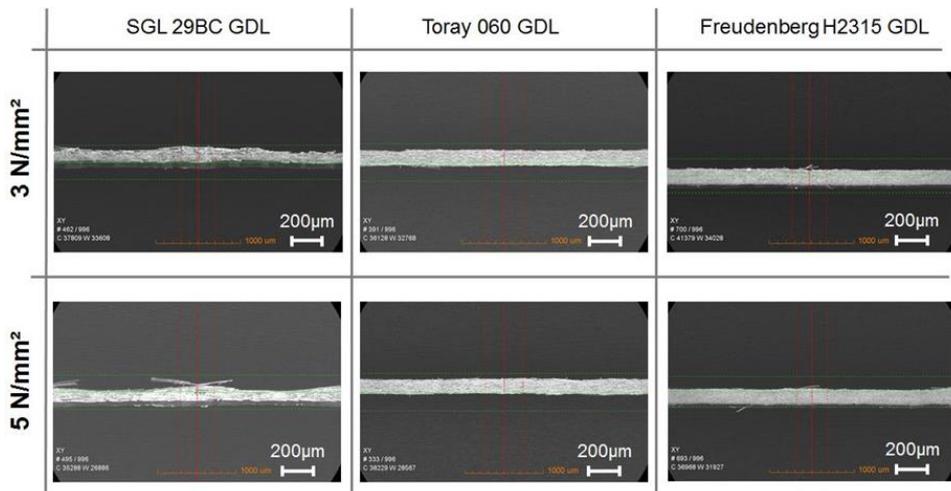


Abb. 30: Mechanische Schädigung der Fasern durch Anpressdruck

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Mechanik der Brennstoffzellen einen großen Einfluss auf die Faserstruktur der GDL, und damit verbunden auf die Porosität sowie die Massentransportwiderstände und schlussendlich auf die Leistung der Brennstoffzelle besitzt. Auch sind diese Einflüsse stark von dem verwendeten Material abhängig. Abhängig von Material und Ausgangslage kann durch einen optimal gewählten Anpressdruck bis zu 15% elektrische Leistung gewonnen werden. Das Material H2315 C2 der Firma Freudenberg zeigte sich hier am robustesten ohne Einschränkungen in der Leistungsfähigkeit. Es erlitt weniger Faserbrüche und nur sehr geringe plastische Verformungen, wodurch die Leistungsfähigkeit auch bei hohen Anpressdrücken gewährleistet bleibt.

3.3.2.2 Wasserdynamik in Niedertemperatur - PEFC

Bei der Verwendung von PEFC-Systemen in Fahrzeugen muss die Brennstoffzelle schnell reagieren, um den gewünschten Leistungsbedarf zu erreichen und bei Start, Stopp, Beschleunigung und Bremsvorgang optimale Betriebsbedingungen zu erreichen. Diese Faktoren erfordern eine kontinuierliche Änderung der Betriebsbedingungen und daher ein tiefes Verständnis der verschiedenen zeitabhängigen Reaktionen während des PEFC-Betriebs. Das Wasser wird an der Kathodenkatalysatorschicht erzeugt und über die Gasdiffusionsschicht während des Brennstoffzellenbetriebs in die Strömungskanäle transportiert. Jede Änderung des Zellbetriebs kann zu einer Kondensation von flüssigem Wasser in den Strömungskanälen und damit zu einer Änderung des Zwei-Phasen-Druckabfalls führen. In dem vorliegenden Fall werden der Zelle sechs verschiedene Lastwechselrampen aufgeprägt. Es werden Spannungs- und Druckverlustreaktionen sowie der ohmsche Widerstand beobachtet.

Die Testzelle, wie in Abb. 31 gezeigt, besteht aus einer MEA mit einer aktiven Fläche von 17,64 cm². Die GDL ist ein Kohlenstoffvlies der Fa. Freudenberg (H2315Cx165), welches mit einer mikroporösen Schicht (MPL) beschichtet ist. Das Flowfield besteht aus 3 parallelen mäanderförmigen Kanalstrukturen. Die Kanäle haben eine Breite von 1 mm und eine Tiefe von 1 mm, die Stegbreite liegt ebenfalls bei 1 mm. Die Betriebstemperatur der Zelle wurde auf 60 °C, die relative Feuchtigkeit der Reaktionsgase (Anoden- und Kathodenseite) auf 90% und die Stöchiometrie beider Gasflüsse auf 2 festgelegt.



Abb. 31: Testzelle für Experimente

Sechs Tests mit unterschiedlichen Lastwechselrampen wurden in dieser Untersuchung durchgeführt. Die Lastwechselrampen in Test Nr. 1 werden mit 5-5-5-5 bezeichnet. Das bedeutet, dass die Last zunächst in 5 min linear von 0,2 A/cm² auf 0,6 A/cm² erhöht wird. Wird der Zielwert erreicht, hält man ihn für 5 min konstant und verringert ihn dann linear innerhalb der nächsten 5 min von 0,6 A/cm² auf 0,2 A/cm². Ist der Zielwert erreicht, wird er wiederum 5 min lang konstant gehalten. Die Bezeichnungen der weiteren Lastwechselrampen sind 2,5-5-2,5-5 (Test Nr. 2), 1-5-1-5 (Test Nr. 3), 0-5-0-5 (Test Nr. 4), 5-0-5-0 (Test Nr. 5) und 1-0-1-0 (Test Nr. 6).

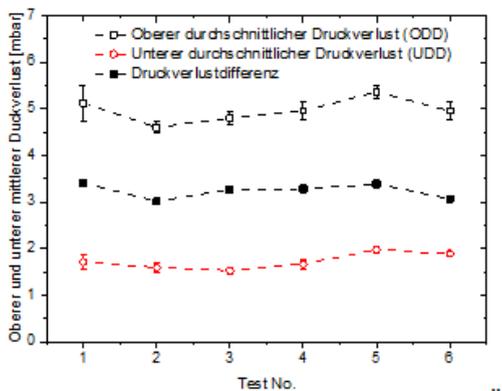


Abb. 32: Durchschnittlicher Druckverlust

Um das dynamische Verhalten des 2-Phasen-Druckverlusts der Zelle bei verschiedenen Lastwechselrampen zu charakterisieren, wurde in jedem Test der obere durchschnittliche Druckabfallwert (ODD) bei 0,6 A/cm² und der untere durchschnittliche Druckabfallwert (UDD) bei 0,2 A/cm² untersucht. Wie Abb. 32 zeigt, erhöht sich der ODD in den Tests Nr.2 bis Nr. 4 mit steilerer Lastrampe ($|\frac{\Delta i}{\Delta t}|$) leicht. Die entsprechenden Änderungen im UDD waren

jedoch nicht offensichtlich, ebenso wenig wie die Differenzänderungen zwischen ODD und UDD.

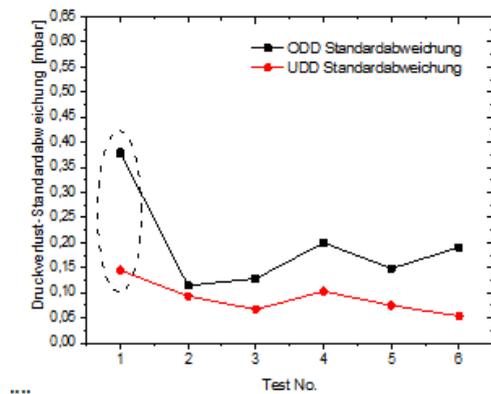


Abb. 33: Standardabweichung vom oberen und unteren durchschnittlichen Druckverlust

Abb. 33 zeigt die Standardabweichung von ODD und UDD mit unterschiedlichen Last-rampen. In den Tests Nr. 2 bis Nr. 4 und bei den Tests Nr. 5 bis Nr. 6 wurde bei steileren Lastrampen die Standardabweichung von ODD erhöht. Der Grund könnte sein, dass sich bei niedrigeren Gradienten der 2-Phasen-Druckabfall mit langsameren Raten ändert, so dass der Druckabfall in der Konstant-Stromphase sein Gleichgewicht erreicht. Bei den steileren Lastrampen ist aber auch die Veränderung des erzeugten Wasserflusses höher und so ist das Gleichgewicht der 2-Phasen-Strömung schwieriger zu erreichen. Dies wird zu einer höheren Druckabfallschwankung führen. Die Ergebnisse des Tests Nr. 1 (markiert in Abb. 33) waren so nicht zu erwarten. Dies muss weiter untersucht werden.

Abb. 34 zeigt die Standardabweichung des Druckverlustes der einzelnen Zyklusphasen für die Tests Nr. 1 bis Nr. 4. Im Test Nr. 1 kann festgestellt werden, dass im ersten Zyklus die Differenz der Standardabweichungen des oberen Druckverlustes zum unteren am größten ist. Bei den nachfolgenden Zyklen wird der Unterschied kleiner. Ähnliche Ergebnisse finden sich auch in den Tests Nr. 2 bis 4. Im Verlauf des zyklischen Betriebes scheint die 2-Phasen-Strömung ein quasistationäres Gleichgewicht in der Zelle zu erreichen.

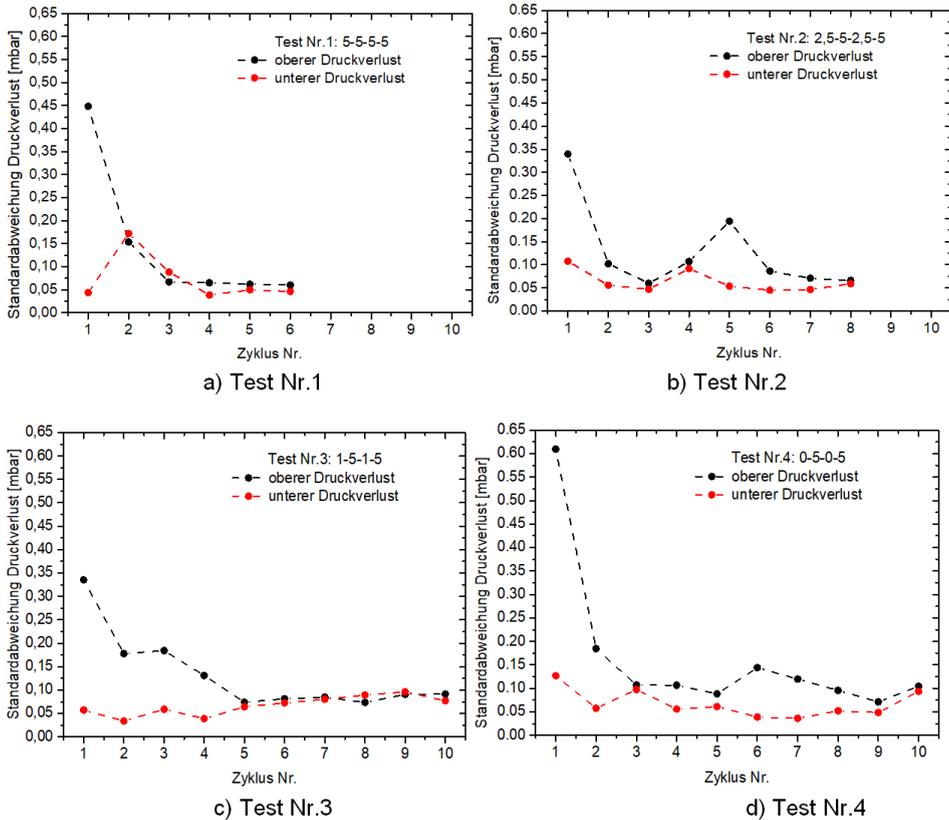


Abb. 34: Standardabweichung oberer und unterer Druckverlust in Tests Nr.1 bis Nr.4

Abb. 35 zeigt den mittels Impedanzspektroskopie gemessenen ohmschen Widerstand in jedem Zyklus (durch die weißen und grauen Streifen begrenzt) und für die Tests Nr. 1 bis Nr. 4. Der ohmsche Widerstand wurde in jedem Zyklus zunächst bei $0,6 \text{ A/cm}^2$ und dann bei $0,2 \text{ A/cm}^2$ gemessen. Vor Beginn des ersten jeweiligen Zyklus wurde der ohmsche Widerstand in der Anfangsphase bei $0,2 \text{ A/cm}^2$ gemessen. Es ist deutlich zu erkennen, dass der ohmsche Widerstand bei der geringeren Stromdichte deutlich höher ist. Dies wurde erwartet, weil bei höherer Stromdichte mehr Wasser produziert wird und die Membran einen höheren Wassergehalt hat. Dadurch ergibt sich eine höhere protonische Leitfähigkeit. Es wurde auch beobachtet, dass der ohmsche Widerstandsunterschied zwischen jedem Test nicht signifikant ist. Der Grund könnte sein, dass genügend Wasser in der Zelle und die Membran ausreichend befeuchtet ist.

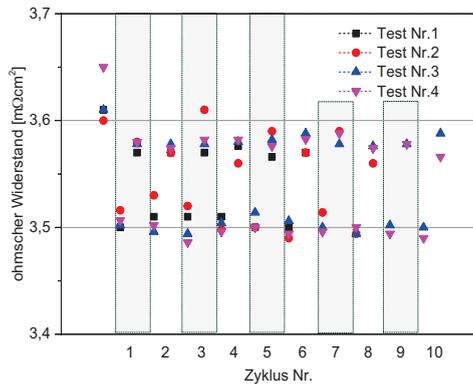


Abb. 35: Ohmscher Widerstand bei den unterschiedlichen Tests und Zyklen (hoher Wert bei 0,2 A/cm², niedriger Wert bei 0,6 A/cm²)

3.3.2.3 Charakterisierung der offenen Zellspannung von Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen

Für kommerzielle Anwendungen von Brennstoffzellen wird häufig eine Lebensdauer der Zellen von 5 000 Stunden für mobile Anwendungen und bis 40 000 Stunden für stationäre Anwendungen erwartet. Die Lebensdauer wird dabei entscheidend von den Betriebszyklen beeinflusst. Zwar lassen sich ungünstige Betriebsbedingungen, wie z. B. zu hohe lokale Stromdichten, sowohl konstruktiv als auch operativ durch die Verwendung einer geeigneten Laststeuerung vermeiden. Ein grundlegendes Problem jedoch stellt der regelmäßige Ein- und Ausschalt-Prozess dar, bei dem die Brennstoffzellen eine kurze Zeit bei relativ hohem Potential von ca. 1 V betrieben werden müssen. In diesem Potentialbereich kommt es zur partiellen Oxidation der Platinoberfläche, welche mit langsamer Auflösung und damit dem Verlust des Katalysators verbunden ist. Die Katalysatoroxidation ist ein komplexer Prozess, welcher über mehrere Stufen von der reinen Metalloberfläche über adsorbierte Sauerstoffmoleküle hin zu ausgeprägten Oxidschichten führt. Abb. 36 zeigt eine schematische Darstellung dieses reversiblen Prozesses. Vereinfacht dargestellt, kommt es im ersten Schritt zur Ausbildung einer Adsorptions- bzw. Oxidschicht, welche als Monolage nur die obersten Platinatome bedeckt. Im weiteren Verlauf erfolgt der Übergang zu PtO₂, welcher mit einer Umorientierung der äußeren Grenzschicht des Katalysators verbunden ist.

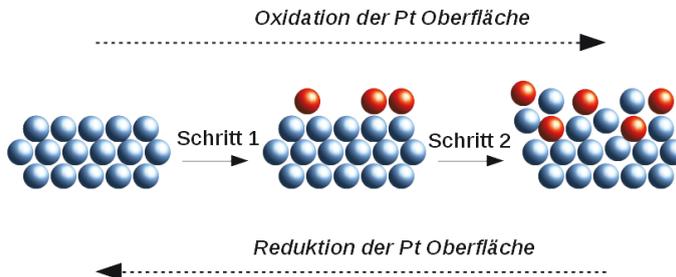


Abb. 36: Vereinfachtes Schema der stufenweisen Oxidation der Katalysatoroberfläche

Die Charakterisierung dieses Oxidationsprozesses wird im IEK-3 mit Hilfe einer speziellen Messzelle mit klassischer 3-Elektroden-Anordnung durchgeführt, welche im Temperaturbereich von 30 °C bis 80 °C eingesetzt werden kann. Als Modellelektrode dient eine polykristalline Pt Scheibe mit einem Durchmesser von 2,54 cm und als Elektrolyt eine 1 M Lösung von H₂SO₄. Zu Beginn der Messungen wird die Zelle für 60 min temperiert und mit Sauerstoff gespült, um das Erreichen der jeweiligen Sättigungskonzentration von Sauerstoff im Elektrolyten zu gewährleisten. Danach wird ein Zyklovoltammogramm (mit 8 Wiederholungen) aufgenommen, welches in Abb. 37 dargestellt ist.

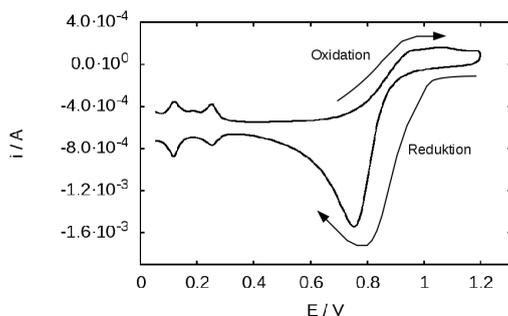


Abb. 37: Zyklovoltammogramm von Pt in 1 M H₂SO₄ bei 30 °C gesättigt mit O₂ (Zuordnung der Peaks siehe Abb. 9)

Aus dem Zyklovoltammogramm in Abb. 38 kann man die Abhängigkeit der Oberflächenoxidation vom elektrischen Potential entnehmen. Im Fall der Brennstoffzelle führt das Abschalten der Last zu einer entsprechenden Oxidation der Katalysatorfläche, wobei sich aber das Potential frei einstellen kann. Als Resultat erhält man eine offene Zellspannung, welche sich als Funktion der Zeit ändert. Die Zeitabhängigkeit ist in Abb. 38 dargestellt. Sie kann als Funktion der Kinetik der an der Elektrodenoberfläche ablaufenden elektrochemischen Prozesse beschrieben werden. Dabei sind 2 Prozesse gleichzeitig potentialbestimmend: die Oberflächenoxidation und die Sauerstoffreduktionsreaktion. Die Aufklärung dieser Zusammenhänge als Funktion von Temperatur und Elektrolytkonzentration ist Gegenstand einer laufenden Doktorarbeit am IEK-3.

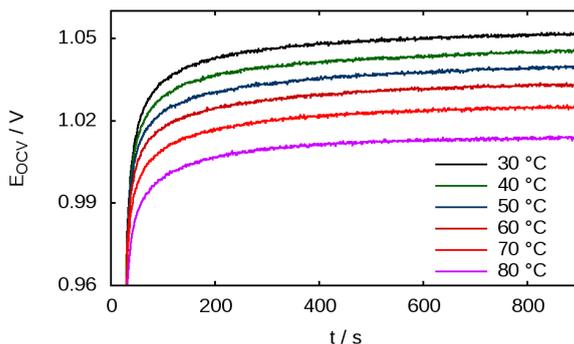


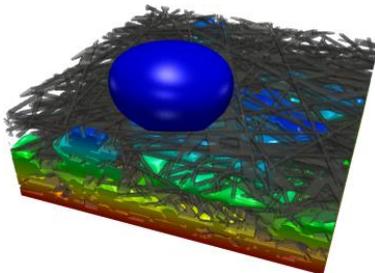
Abb. 38: Freies Elektrodenpotential (OCV) als Funktion der Zeit; Pt Elektrode in 1 M H₂SO₄ bei 30 °C gesättigt mit O₂

3.3.2.4 Wassertransport in Gasdiffusionsschichten

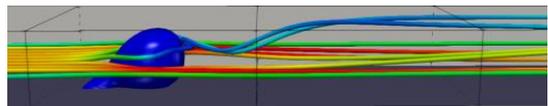
Die Effizienz von PEFC hängt von vielerlei Faktoren ab. Ein wichtiger Aspekt ist dabei der Transport von flüssigem Wasser in der porösen Struktur der Gasdiffusionsschicht auf der Kathodenseite der Brennstoffzelle. Das in der Katalysatorschicht entstehende Produktwasser muss durch die poröse Faserstruktur zu den Luftkanälen transportiert werden, wo sie von dem vergleichsweise schnellen Luftstrom abtransportiert werden.

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. Transportsimulationen umfassen typischerweise nur einen kleinen Ausschnitt (etwa 1 mm²) einer realen GDL, die in einer Brennstoffzelle eine Größe von 20-300 cm² hat. Um dennoch belastbare Ergebnisse zu erhalten, werden Transportsimulationen auf statistisch variierten Modellgeometrien durchgeführt, die stochastisch äquivalent zur realen Mikrostruktur sind.

Der Transport flüssigen Wassers durch die GDL ist ein bedeutender Einflussfaktor auf die Effizienz einer Brennstoffzelle. Die Analyse des Wassertransportes zeigt bei austretenden Wassertropfen eine irreguläre Formgebung an der Oberfläche der GDL. Abb. 39 zeigt einen Wassertropfen, der nach dem Transport durch die GDL an der Oberfläche eine nicht symmetrische Form ausweist. Außerdem wird die Verformung eines solchen Wassertropfens durch die Strömung im Luftkanal dargestellt.



a) Aus der GDL austretender Wassertropfen



b) Strömung im Luftkanal um einen aus der GDL austretenden Wassertropfen

Abb. 39: Wassertransport in GDL und Luftkanal einer PEFC

Die in Abb. 39 gezeigten Ergebnisse stammen aus Simulationen auf unterschiedlichen Skalen. Die GDL besteht aus Mikrostrukturen, deren Grundelemente Fasern mit einem typischen Durchmesser von 5-7 μm sind. Dem entsprechend haben die Simulationsgebiete typische Ausmaße im mm²-Bereich einer GDL. Die Ausmaße von Simulationen in Kanälen orientieren sich dagegen an Interkonnektorplatten von Brennstoffzellen im cm-Bereich. GDLs werden dabei oft als homogenisiertes poröses Material berücksichtigt, dessen Materialdaten als Modellparameter in die Transportmodelle einfließen. Ein solcher Parameter ist der Winkel, den ein Wassertropfen mit der Fläche eines Materials bildet. Aus diesem Kontaktwinkel können mit Hilfe der Young-Laplace-Gleichung die Oberflächenspannung und Grenzflächenenergien bestimmt werden. Diesem Ansatz liegt allerdings die Annahme eines symmetrischen Tropfens zu Grunde, die durch die Resultate der Transportsimulationen widerlegt wird.

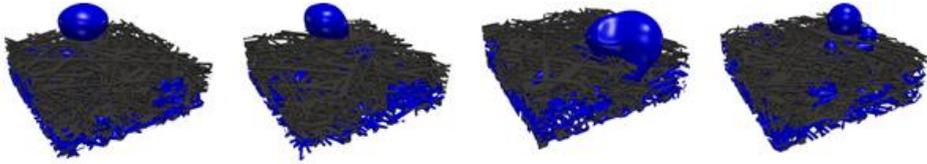


Abb. 40: Austretende Wassertropfen in stochastisch äquivalenten Geometrien

Die Ergebnisse in Abb. 40 zeigen exemplarisch eine starke Variation der Kontaktwinkel bei vier Geometrien, die die unsymmetrische Form der aus der GDL austretenden Wassertropfen repräsentieren. Weiterhin ist die Variation der Kontaktwinkel über die verschiedenen stochastisch äquivalenten Modellgeometrien in derselben Größenordnung, was einer statistischen Streuung über die Fläche der GDL gleich zu setzen ist. Es wurden Wassertropfen an der Oberfläche von sieben Modellgeometrien analysiert, die alle stochastisch äquivalent mit der realen Mikrostruktur sind. Die Kontaktwinkel wurden in jeweils vier Schnittebenen untersucht – 0° , 30° , 60° und 90° . Für die angegebenen Schnittebenen wurde Variation der Kontaktwinkel statistisch analysiert.

Die Transportsimulationen wurden auf Hardware des Jülich Supercomputing Centre (JSC) durchgeführt (JURECA-Projekt CJIEK30).

3.3.2.5 Simulation von Tropfentransport in PEFC-Kanälen

Ein typisches PEFC-Flowfield enthält Mikro- beziehungsweise Minikanäle. Der kontinuierliche Abtransport von flüssigem Wasser aus den Kanälen auf der Kathodenseite ist eine Herausforderung, da Wassertröpfchen, die sich in den Kanälen bilden, zu einem Blockieren derselben führen können. Der Sauerstofftransport zu den aktiven Stellen an der Dreiphasengrenze kann somit blockiert werden. Dies führt nicht nur zu einem erheblichen Leistungsverlust, sondern auch zu einer ungleichmäßigen Stromdichteverteilung, erhöhten Degradationsraten und instabilem Betrieb. Basierend auf der Open-Source-Bibliothek OpenFOAM wurden Volume of Fluid (VOF) Modelle entwickelt und Simulationen durchgeführt, die den Transport von Wassertropfen an der Grenzfläche von GDL und Kanal beschreiben. Ziel war es, ein besseres Verständnis der Zweiphasenströmung in PEFC-Gaskanälen und ihrer Wechselwirkung mit der GDL-Oberfläche zu erhalten.

Eine Gaskanalgeometrie mit einem Flüssigkeitseinlass, einem Gaseinlass und einem Zweiphasen-Auslass wurde für die Simulationen verwendet. Die Simulationsergebnisse wurden mit Synchrotron-Messungen von ex-situ-Wasserinjektionsexperimenten, durchgeführt von Kollegen des Paul Scherrer Institutes (PSI) in der Schweiz, verglichen.

Eine gute Übereinstimmung (Abb. 41) zwischen den Simulationen und den Messungen in Bezug auf die Tropfendynamik konnte gezeigt werden. Insbesondere der Abstand zwischen Flüssigkeitseintritt und erstem Kontakt mit der Wand korreliert gut. Das Tropfenverhalten hängt stark von der Größe des Flüssigkeitseinlasses, der Geschwindigkeit des Gaststroms, der Kanalgeometrie (Höhe und Breite) und dem Kontaktwinkel ab.

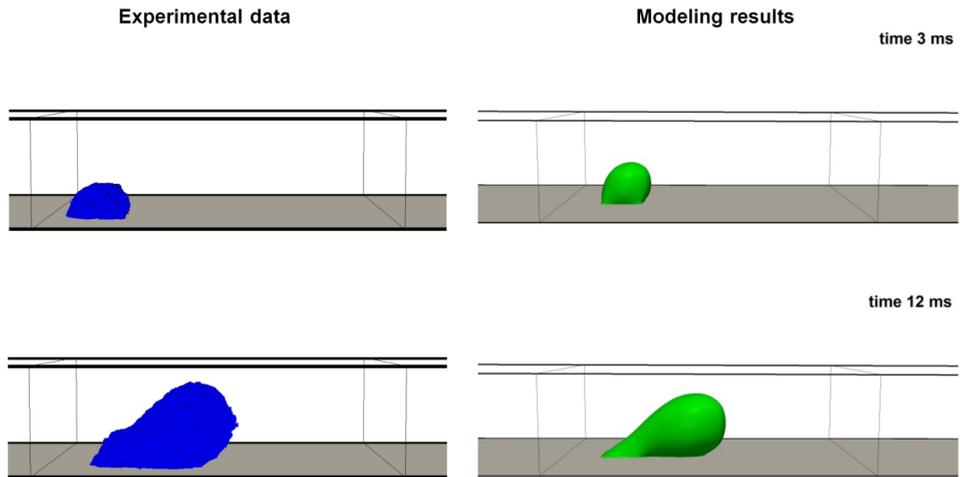


Abb. 41: Vergleich von experimentellen Daten und VOF-Simulationen mit statischen Randbedingungen bei 15 m / s. Parameter bei einer Temperatur von 20 ° C

Sowohl Experimente als auch Modelle zeigen eine ablösungsfreie Strömung im Kanal für Standardbedingungen. Der Tropfen kann jedoch auch in Kontakt mit der GDL-Oberfläche und gleichzeitig mit der Kanalwand stehen, wenn Gasgeschwindigkeit und Kanalhöhe abnehmen oder die Größe des Flüssigkeitseinlasses erhöht wird. Darüber hinaus kann an der GDL gegenüberliegenden Kanalwand ein Wassertransport in den Kanalkanten auftreten, wenn die Gasgeschwindigkeit beziehungsweise der Wandkontaktwinkel abnimmt oder die Größe des Flüssigkeitseinlasses zunimmt.

Ein kleinerer Flüssigkeitseinlass (Konstanthaltung der Flüssigkeitsmassenströme für konstante Stöchiometrie) führt zu deutlich kleineren Tröpfchen. Ebenso führt eine erhöhte Gasgeschwindigkeit zu kleineren Tröpfchen und dementsprechend erhöht sich die Anzahl der Tröpfchen pro Zeiteinheit.

Das Modell, welches statische Kontaktwinkel annahm, wurde erweitert, um die Auswirkungen von dynamischen Kontaktwinkeln auf das Transportverhalten des Wassers zu untersuchen (Abb. 42).

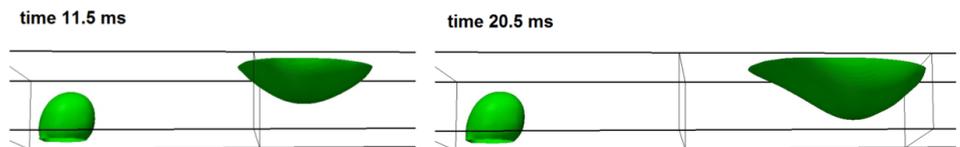


Abb. 42: Der erste Tropfen bewegt sich sehr langsam und wartet auf einen zweiten Tropfen (links). Zwei vereinigte Tröpfchen bewegten sich entlang der Hauptströmungsrichtung mit erhöhter Geschwindigkeit (rechts). Wandkontaktwinkel 10° / 75°. Kontaktwinkel der Gasdiffusionsschicht 138° / 162°. Gasgeschwindigkeit 10 m/s. Parameter bei einer Temperatur von 60 ° C

Als Beispiel sei der Einfluss dynamischer Kontaktwinkel auf das Verhalten in einem flachen Kanal beschrieben. Der erste Tropfen haftet an der Wand, die der GDL gegenüber liegt und bewegt sich langsam in Richtung Kanalausgang. Nach der Vereinigung mit einem zweiten Tropfen erhöht sich die Geschwindigkeit und der nun große Tropfen verlässt den Kanal mit hoher Geschwindigkeit. Der Tropfen bleibt während dieses Transportes an der Wand haften. Ähnliche Phänomene werden bei Verwendung eines statischen Kontaktwinkels nicht beobachtet. Simulationen wurden mit Rechenressourcen durchgeführt, die von JARA-HPC von der RWTH Aachen im Rahmen des Projekts jara0070 gewährt wurden.

3.3.2.6 Modellierung und Simulation auf Zell- und Stackebene

Es ist aufwändig und teuer, lokale Phänomene in einer PEFC zu messen. Numerische Methoden bieten einen alternativen beziehungsweise ergänzenden Weg, um diese Phänomene zu beobachten und zu quantifizieren. Die Verfügbarkeit von Hochleistungsrechnern (HPC) bietet die Möglichkeit, umfangreiche und detaillierte Simulationen in relativ kurzer Zeit durchzuführen. Zusammen mit den experimentellen Mess- und Analysemethoden spielen numerische Modelle eine wichtige Rolle beim Design und der Optimierung von Brennstoffzellen. In den letzten zehn Jahren wurden verschiedene PEFC-Modelle entwickelt. Diese Modelle fanden jedoch nicht viel Beachtung in der PEFC-Community, vor allem, weil die Implementierungen auf proprietärer Software basieren, die durch kommerzielle Lizenzvereinbarungen eingeschränkt ist und für große HPC-Systeme nicht ohne weiteres freigegeben oder parallelisiert werden kann. Um diese Nachteile zu beheben, wurden sowohl ein LT-PEFC-Zellenmodell als auch ein LT-PEFC-Stackmodell unter Verwendung der Open-Source-Bibliothek OpenFOAM® entwickelt und implementiert.

Alle wichtigen Transportphänomene, einschließlich Zweiphasenfluidströmung, Massen- und Wärmeübertragung sowie Ionen- und Elektronentransfer in der Membran-, Elektrolyt- und Bipolarplatte, werden im Modell auf Zellebene berücksichtigt. Für die Strömung in den Gaskanälen wird ein Euler-Euler-Modell angewendet. Für den Transport von flüssigem Wasser in den porösen Schichten wird eine Leverett-J-Funktion verwendet, bei der die Verdampfung / Kondensation von Wasser berücksichtigt wird. Die elektrochemische Reaktion sowohl auf der Anodenseite als auch auf der Kathodenseite wird entweder durch eine Butler-Volmer- oder eine Tafel-Beziehung beschrieben. Für den Elektronen- und Ionentransport wird ein Zwei-Potential-Modell implementiert.

Im Stackmodell werden alle Transportphänomene des Zellmodells berücksichtigt, mit Ausnahme des detaillierten Elektronen / Ionentransportmodells. Zusätzlich wird eine Widerstandsanalogie (lokale Volumenmittelungstechnik) eingesetzt, um die Konvergenzzeit zu reduzieren. Das Rechenetz ist daher gröber als das, welches bei Simulationen auf Zellebene verwendet wird.

Das Zellmodell wurde anhand experimenteller Polarisationskurven validiert. Die aktive Fläche der simulierten Zelle betrug 1 cm x 1 cm, die Betriebstemperatur $T = 353$ K. Die stöchiometrischen Faktoren auf der Anodenseite und der Kathodenseite waren $\lambda = 1,2$ und $\lambda = 2,0$. Die Anode wurde mit vollständig befeuchtetem Wasserstoff und die Kathode mit vollständig befeuchteter Luft beaufschlagt. Abb. 43 zeigt die gute Übereinstimmung von Simulationsergebnis und Experiment.

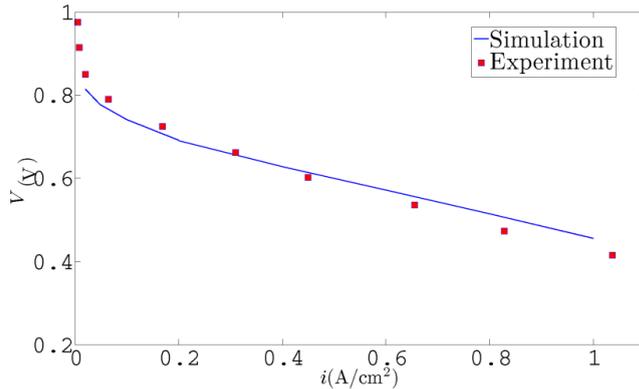


Abb. 43: Vergleich der aktuellen numerischen Ergebnisse und experimentellen Daten

Berechnungen wurden anschließend für ein IEK-3 spezifisches PEFC-Design durchgeführt. Die Geometrie entspricht derjenigen eines laufenden Ringversuches im Rahmen des Energy Technology Collaboration Programs on Advanced Fuel Cells der International Energy Agency (IEA). Die aktive Fläche der Zelle beträgt 17,64 cm² (4,2 cm x 4,2 cm).

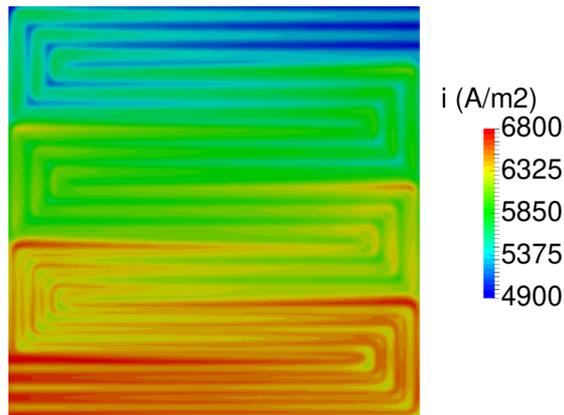


Abb. 44: Simulierte Stromdichteverteilung einer Zelle mit IEA LT-PEFC-Benchmark-geometrie.

In Abb. 44 ist die simulierte lokale Stromdichteverteilung für eine mittlere Stromdichte von 6000 A/m² dargestellt. Die Betriebstemperatur beträgt $T = 343$ K. Die relative Luftfeuchtigkeit für Anoden- und Kathodenseite beträgt jeweils 90%, die Stöchiometrien sind $\lambda = 2,0 / 2,0$. Die Gase strömen von links unten in die Strömungskanäle ein und treten oben rechts aus. Die Stromdichte nimmt von Einlass zu Auslass ab. Lokale Extrema sind in den Ecken der serpentinartigen Kanäle zu sehen.

Polymerelektrolytmembran-Elektrolysezellen und -Stacks teilen sich viele physikalische Prozesse mit PEFC-Zellen und -Stacks. Dazu gehören ein zweiphasiger Flüssigkeits- / Gasstrom, ähnliche elektrochemische Reaktionen sowie Wärme- und Stofftransport. Daher

können die vorliegenden Zell- und Stackmodelle leicht auf die Wasser-Elektrolyse angepasst werden.

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-Polymer- elektrolyt-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, OCV
D. Froning	6676 d.froning@fz-juelich.de	Lattice-Boltzmann Simulationen in porösen Komponenten
E. Hoppe	85192 e.hoppe@fz-juelich.de	HT-PEFC Charakterisierungs-Einheit
P. Irmischer	9803 p.irmischer@fz-juelich.de	Stackmechanik
Dr. H. Janßen	5082 h.janssen@fz-juelich.de	HT-PEFC Stackentwicklung
A. Kulikovskiy, PhD, DSci (Gast)	5396 a.kulikovskiy@fz-juelich.de	Analytische Brennstoffzellenmodelle
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
Dr. U. Reimer	3537 u.reimer@fz-juelich.de	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

M. Sietmann	3850 m.sietmann@fz-juelich.de	Qualitätskontrolle Bipolarplatte
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

Yasser Rahim, Holger Janßen, Werner Lehnert

Characterizing Membrane Electrode Assemblies for High Temperature Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells Using Design of Experiments

Int. J. Hydrogen Energy, 42 (2017) 1189-1202

H. Janßen, L. Lüke, J. Ehlert, W. Lehnert, D. Stolten

Setup and experimental validation of a 5 kW HT-PEFC stack

Int. J. Hydrogen Energy 42 (2017) 11596

Liangfei Xu, Junming Hu, Chuan Fang, Siliang Cheng, Jianqiu Li, Minggao Ouyang, Werner Lehnert

Robust control of internal states in a polymer electrolyte membrane fuel cell air-feed system by considering actuator properties

J. Hydrogen Energy 42 (2017) 13171-13191

A Kulikovskiy

Impedance of a PEM fuel cell cathode with nonuniform ionomer loading: Analytical and numerical study

Journal of Electroanalytical Chemistry 789 (2017) 174-180

M. Andersson, S. Beale, U. Reimer, W. Lehnert, D. Stolten

Interface resolving two-phase flow simulations inside gas channels relevant for polymer electrolyte fuel cells

Int. J. Hydrogen Energy, 43 (2018) 2961-2976

J. Yu, D. Froning, U. Reimer, W. Lehnert

Apparent contact angles of liquid water droplet breaking through a gas diffusion layer of polymer electrolyte membrane fuel cell

Int. J. Hydrogen Energy 43 (2018) 6318-6330

Junliang Yu, Dieter Froning, Uwe Reimer, Werner Lehnert

Liquid water breakthrough location distances on a gas diffusion layer of polymer electrolyte membrane fuel cells

J. Power Sources 389 (2018) 56-60

D. Froning, J. Yu, U. Reimer, W. Lehnert

Stochastic analysis of the gas flow at the GDL/electrode interface of a high-temperature polymer electrolyte fuel cell

Transp Porous Med 132 (2018) 403-420

S. Beale, U. Reimer, D. Froning, M. Andersson, J.G. Pharoah, W. Lehnert

Stability Issues for Fuel Cell Models in the Activation and Concentration Regimes

ASME Journal of Electrochemical Energy Conversion and Storage, 15 (2018), 041008-1 - 041008-7

Y. Lin, T. Arlt, N. Kardjilov, I. Manke, W. Lehnert

Operando Neutron Radiography Analysis of High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cell based on a Phosphoric Acid-Doped Polybenzimidazole Membrane Using the Hydrogen-Deuterium Contrast Method

Energies 2018, 11(9), 2214;

Shuai Liu, Marcin Rasiniski, Yu Lin, Klaus Wippermann, Andreas. Everwand, Werner Lehnert

Effects of constant load operations on platinum bands formation and cathode degradation in high-temperature polymer electrolyte fuel cells

Electrochimica Acta 289 (2018) 354-362

Ruiyu Li, Yun Cai, Klaus Wippermann, Werner Lehnert.

Corrosion and Electrical Properties of SS316L Materials in the Simulated HT-PEFC Environment

J. Electrochem. Soc. 165 (10) (2018) C681-C688

Diankai Qiu, Holger Janßen, Linfa Peng, Philipp Irmscher, Xinmin Lai, Werner Lehnert

Electrical resistance and microstructure of typical gas diffusion layers for the proton exchange membrane fuel cell under compression

Applied energy, 231 (2018) 127-137

Holger Janßen, Achim Edelmann, Thea Mildebrath, Patrick Müller, Werner Lehnert, Detlef Stolten

Design and experimental validation of an HT-PEFC stack with metallic BPP

Int. J. Hydrogen Energy 43 (2018) 18488-18497

M. Andersson, A. Mularczyk, J. Eller, S.B. Beale, A. Lamibrac, W. Lehnert, F. Büchi

Modeling and synchrotron imaging of droplet detachment in gas channels of polymer electrolyte fuel cells

J. Power Sources 404 (2018) 159-171

Dieter Froning, Junliang Yu, Uwe Reimer, Werner Lehnert

Stochastic Analysis of the Gas Flow at the Gas Diffusion Layer/ Channel Interface of a High-Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cell

Appl. Sci. 8 (2018), 2536

Dissertationen

Cao, Q.

Modelling of High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells

Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, Band 389, 2017, ISBN 978-3-95806-263-4

Yu, J.

Lattice Boltzmann Simulations in Components of Polymer Electrolyte Fuel Cell
Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, Band 438, 2018, 978-3-95806-360-0

Lin, Y.

Characterization of Polybenzimidazole Membranes
Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, Band 440, 2018, ISBN 978-3-95806-364-8

Rahim, Y.

Characterization of High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells
Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, Band 440, 2018, 978-3-95806-364-8

Wichtige Patente

Patenterteilungen:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
Dr. A.A. Kulikovsky	1.2601	Verfahren zur Charakterisierung der Katalysatorstruktur in einer Brennstoffzelle, sowie dazu geeignetes Brennstoffzellendesign
Dr. A. A. Kulikovky	1.2644	Direkt-Alkohol-Brennstoffzelle und Direkt-Alkohol-Brennstoffzellenstapel mit effektiver CO ₂ -Entfernung, sowie Verfahren zum Betreiben einer solchen Direkt-Alkohol-Brennstoffzelle

3.4 Direktmethanol-Brennstoffzellen

3.4.1 Ziele und Tätigkeiten

Der flüssige Energieträger Methanol bietet wegen seiner hohen Energiedichte und einfachen Handhabbarkeit Vorteile für Brennstoffzellensysteme, bei denen hohe Energiedichte und dauerhafter Betrieb ohne Nachfüllen wichtiger sind, als eine besonders hohe Leistungsdichte. Daher sind die Hauptanwendungsgebiete, auf die sich das IEK-3 für die Direktmethanol-Brennstoffzellentechnik konzentriert, kleine mobile Anwendungen, wie im Bereich „Material Handling“ und der unterbrechungsfreien Stromversorgungen (USV), insbesondere an abgelegenen Standorten, wo häufiges Nachtanken nicht praktikabel ist. Dass Methanol flüssig ist, ist auf die intermolekularen Wechselwirkungen aufgrund der etwas komplizierteren chemischen Struktur zurückzuführen. Diese führt jedoch auch dazu, dass Methanol elektrochemisch nicht so schnell umgesetzt werden kann, wie Wasserstoff. Daher ist für Direktmethanol-Brennstoffzellen eine größere Katalysatormenge erforderlich, was die Kosten erhöht. Um dem entgegen zu wirken, ist es wichtig, hochreaktive Katalysatoren zu entwickeln, die mit einer geringen Menge des Edelmetalls Platin auskommen. Der Systemaufbau eines DMFC Systems ist wegen des flüssigen Brennstoffs Methanol recht einfach, dennoch ist im Interesse einer hohen Lebensdauer eine ausgeklügelte Betriebsführungstrategie erforderlich, die den maximal möglichen elektrischen Wirkungsgrad erzielt und bei allmählicher Degradation der Zellen diesen beibehält. Zusätzlich wird die Betriebsführung so ausgelegt, dass Betriebszustände vorherrschen, bei denen die kleinstmögliche Alterungsrate der DMFC erzielt wird und es zur keiner irreversiblen Schädigung dieser kommt.

3.4.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.4.2.1 Neue Katalysatoren für DMFC und Elektrolyse

Im Rahmen eines vom BMWi geförderten Verbundprojektes⁹ mit der Universität Hamburg, dem Fraunhofer CAN und SFC Energy werden Kathodenkatalysatoren, die von der Universität Hamburg entwickelt und vom Fraunhofer CAN in einem kontinuierlichen Verfahren in einem Flussreaktor hergestellt werden, zu Kathoden für die DMFC verarbeitet und im DMFC-Betrieb getestet. Außerdem werden hierarchisch strukturierte Kompositnanopartikelsysteme hergestellt, bei denen Carbon Nanotubes, die auf einem Edelstahlgitter aufgewachsen werden als Katalysatorträger verwendet werden. Da diese Systeme zunächst nur in einer Größe von 25 x 25 mm² zur Verfügung standen, war die Entwicklung einer angepassten Strömungsverteilerstruktur erforderlich. Dabei ist es nicht zielführend, die vorhandene Strömungsverteilerstruktur (42 x 42 mm²) einfach zu verkleinern. Die Verringerung der Kanaltiefen und Breiten unter das vorhandene Maß von 1 mm ist nicht empfehlenswert, da Gasblasen auf der Anode und Wassertropfen auf der Kathode nicht mehr leicht ausgetragen werden können und so die Zelle unterversorgt sein könnte. In der Schachbrettstruktur (Abb. 45 links) führen solche Hindernisse vorübergehend zur

⁹ Hierarchische Kompositnanopartikelsysteme zur Anwendung in Brennstoffzellen – Entwicklung und kontinuierliche Herstellung (HiKAB), FKZ 03ET1435C

Deaktivierung eines Bereichs von wenigen mm². Dies wäre jedoch im kleineren Flow Field ein größerer Anteil der Gesamtfläche und sollte vermieden werden. Stattdessen wurde ein Mäander Flow-Field (Abb. 45 Mitte) gewählt. Aufgrund der geringen Zellfläche ist der Mäander so kurz, dass kein nennenswerter

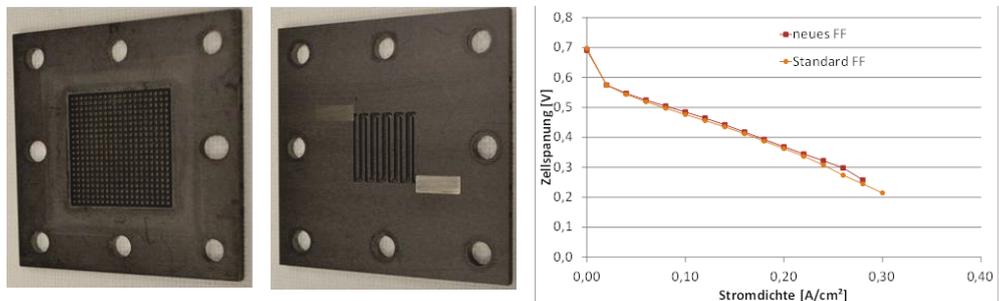


Abb. 45: Schachbrett Flow-Field 42 x 42 mm² (links) und Mäander Flow-Field 25 x 25 mm² (mitte), sowie Kennlinien von Standard-MEAs mit den unterschiedlichen Flow-Fields (rechts). T = 70°C, c(MeOH) = 0,75 mol/l, Luftvolumenstrom = 0,037 l/(cm²min)

Druckverlust erwartet wird. Dies war in dem größeren Strömungsverteiler wegen des deutlich längeren Kanals nicht möglich. Durch Messung des Druckverlusts wurde gezeigt, dass bei den maximal benötigten Volumenströmen ein Druckverlust von bis zu 10 mbar auftritt, während der Druckverlust im bisherigen Flow Field maximal 5 mbar betrug. Dieser Unterschied ist gegenüber den Druckschwankungen bei Wetteränderungen von einigen 10 mbar vernachlässigbar. Daher wurde wie erwartet beobachtet, dass die Kennlinien bei Verwendung beider Flow-Fields nahezu identisch waren (Abb. 45 rechts)

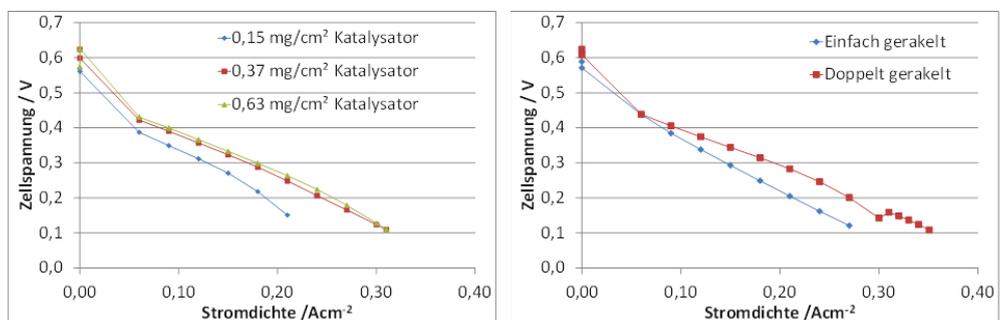


Abb. 46: Kennlinien bei unterschiedlicher Kathodenbelegung (links) und mit unterschiedlichen Rakelverfahren (rechts), T = 70 °C, c(MeOH) = 0,75 mol/l, Luftvolumenstrom = 0,037 l/(cm²min)

Vom Fraunhofer CAN wurden zunächst PtNi Legierungskatalysatoren mit 25-30 % Metallanteil auf Kohlenstoffträger XC72 erhalten. Diese wurden durch das im IEK-3 mit kommerziellen Katalysatoren etablierte Rakelverfahren auf ein Decalsubstrat aufgetragen und durch Verpressen auf die Nafion 115 Membran übertragen. Anschließend wurde eine Standardanode aufgepresst und so die MEA erhalten. Zunächst musste ermittelt werden, welche Katalysatorbelegung für die optimale Leistung erforderlich ist. Wie in Abb. 46 (links)

zu sehen ist, führt die Erhöhung der Kathodenbelegung von $0,15 \text{ mg/cm}^2$ auf $0,37 \text{ mg/cm}^2$ zu einer erheblichen Leistungsverbesserung, eine weitere Erhöhung der Belegung auf $0,63 \text{ mg/cm}^2$ hat jedoch keinen nennenswerten Effekt mehr. Es wurden daher bei weitem MEAs eine Belegung im Bereich von $0,4\text{-}0,6 \text{ mg/cm}^2$ angestrebt. Bei diesen Belegungen reißt die Katalysatorschicht während des Trocknens stark auf und oft fallen Teile der Katalysatorschicht vor dem Übertragen auf die Membran herab. Daher wurde ein doppeltes Dispersionsverfahren entwickelt, bei dem die Katalysatorpaste zunächst ausgerakelt und dann mit einem Gummispatel wieder vom Substrat abgekratzt und erneut dispergiert wurde. Die neue Paste aus den so gewonnenen größeren Partikeln trocknete mit weniger Rissen und in Abb. 46 (rechts) ist zu sehen, dass die so erhaltenen Elektroden auch leistungsfähiger sind.

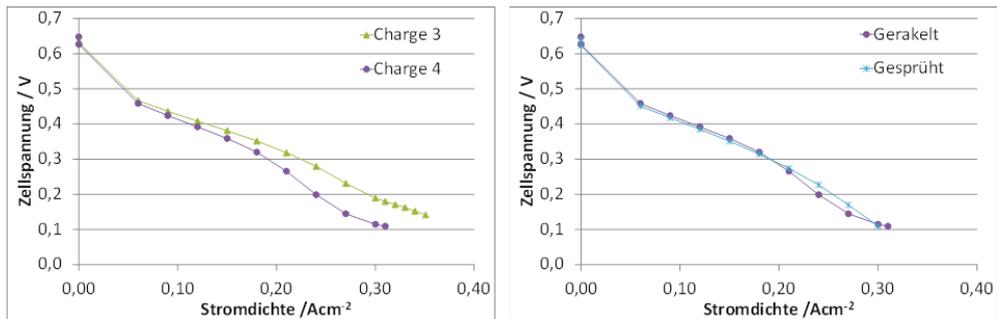


Abb. 47: Kennlinien bei Verwendung unterschiedlicher Katalysatorchargen (links) und unterschiedlichen Auftragverfahren (rechts). $T = 70 \text{ }^\circ\text{C}$, $c(\text{MeOH}) = 0,75 \text{ mol/l}$, Luftvolumenstrom = $0,037 \text{ l/(cm}^2\text{min)}$

In Abb. 47 (links) ist zu sehen, dass zwischen den beiden größeren vom CAN erhaltenen Chargen ein deutlicher Unterschied in der Leistungsfähigkeit besteht. Dabei ist die bessere Charge 3 in einem Ansatz im Flussreaktor hergestellt und danach auf XC72 geträgert worden, während die etwas schlechtere Charge 4 in mehreren Ansätzen hergestellt und gemeinsam geträgert wurde. Hier muss in Zukunft genauer auf eine gleichmäßige Qualität geachtet werden. Das zuvor beobachtete Aufreißen der Katalysatorschicht kann vollständig verhindert werden, indem die Katalysatorpaste durch Ultraschallsprühen auf ein geheiztes Substrat aufgebracht wird. Dabei werden mehrere dünne Schichten aufgetragen und sofort getrocknet, bis die gewünschte Belegung erreicht ist. In Abb. 47 (rechts) sieht man, dass mit Ultraschallsprühen die gleiche Leistung wie mit Rakeln erreicht werden kann.

Kathoden für DMFCs und Kathoden für die PEM Elektrolyse habe sehr viele Gemeinsamkeiten, so dass zu erwarten ist, dass die im Rahmen des Projektes neu entwickelten Katalysatoren mit geringen Anpassungen auch für die PEM Elektrolyse eingesetzt werden können. In einem ersten Versuch konnte gezeigt werden, dass die Leistungsfähigkeit einer MEA mit den Legierungskatalysatoren des CAN vergleichbar mit der Leistungsfähigkeit einer MEA mit kommerziellem Kathodenkatalysator ist (Abb. 48).

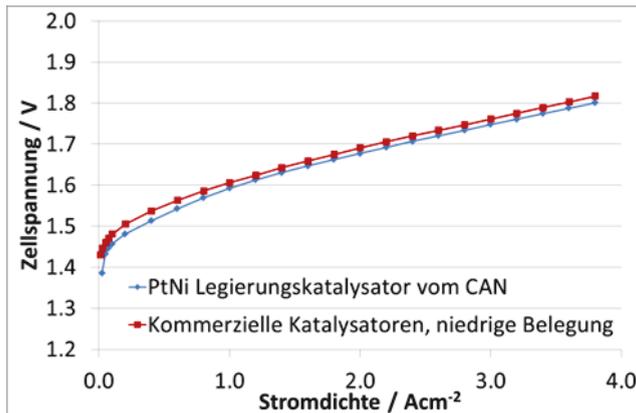


Abb. 48: Kennlinien von MEAs mit Legierungskatalysator vom CAN und Kommerziellem Katalysator auf der Kathode im PEM-Elektrolysebetrieb.)

Allerdings war die Belegung der Kathode mit Katalysator des CAN noch deutlich höher, als die Belegung der Kathode mit kommerziellem Katalysator, da eine für die DMFC hergestellte Kathode mit der dort erforderlichen Belegung verwendet wurde. Es ist aber in der Regel ohne weiteres möglich, die Belegung für die Verwendung in der Elektrolyse zu verringern. Daher ist zu erwarten, dass die im Rahmen dieses Projektes entwickelten Katalysatoren auch für die Elektrolyse eingesetzt werden können.

3.4.2.2 Steuerungsstrategien mit dem Ziel der effizienzoptimierte Betriebsführungsstrategien DMFC

Im Rahmen einer Doktorarbeit wurde ein effizienzoptimiertes Betriebsführungskonzept entwickelt, das die Aspekte Wirkungsgradmaximierung, Fehler- und Alterungstoleranz zur Langzeitstabilität aufgreift. Als Basis der Betriebsführung kam eine modellbasierte prädiktive Regelung (MPR) zum Einsatz für die ein Gesamtmodell der DMFC entworfen wurde. In Praxisversuchen konnte gezeigt werden, dass Grenzwerte von zu regelnden Prozessgrößen – Stacktemperatur und Zellspannung – innerhalb des DMFC-Systems eingehalten werden. Der daraus resultierende Vorteil ist gerade im Bereich der DMFC eminent, da so geringe Zellspannungen und hohe Temperaturen, die die Alterung der Zellen beschleunigen können, vermieden werden.

Zur Wirkungsgradmaximierung wurde die Eingangsleistung, gegeben durch die Zudosierung des Methanols, minimiert. In diesem Zusammenhang wurde ein Modell erstellt, das die Eingangsleistung durch die regelbaren Prozessgrößen Stacktemperatur, Zellspannung und Methanolkonzentration beschreibt. Mittels statisch-ökonomischer Optimierung wurde dann das Minimum der Eingangsleistung, bei gegebener Ausgangsleistung, detektiert.

In Abb. 49 ist die Eingangsleistung in Abhängigkeit der Stacktemperatur und Methanolkonzentration dargestellt. Durch die vorgegebene Ausgangsleistung von 53,97 mW/cm² ergab sich eine Leistungshyperbel, die das Minimum der Eingangsleistung begrenzte. Damit konnte gezeigt werden, dass sich das Minimum der Eingangsleistung genau auf dieser Leistungshyperbel befindet und gegen das Funktionsminimum strebt, wobei es den maximalen Stackwirkungsgrad unter optimalen Betriebsbedingungen markiert.

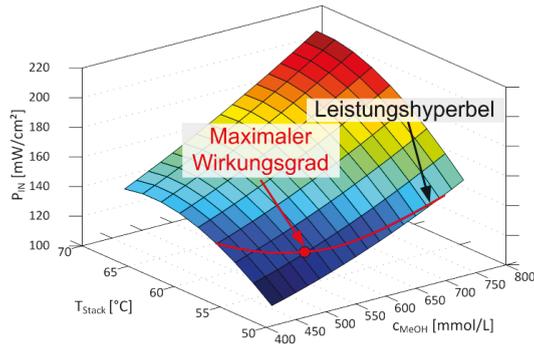


Abb. 49: Minimum der spezifischen Eingangsleistung bei $P_{out} = 53,97$ mW/cm²

Zusätzlich dazu wurde die Ausgangsleistung über ihren Betriebsbereich variiert, um fortwährend den maximale Wirkungsgrad bei optimaler Stacktemperatur und Methanolkonzentration zu erzielen. Abb. 50 a) zeigt den daraus resultierenden, maximalen Wirkungsgrad (rot). Im Gegensatz zu festeingestellten Betriebsparametern wurden alle geforderten Ausgangsleistungen über den gesamten Betriebsbereich bereitgestellt. Für einen unmittelbaren Vergleich sind in Abb. 50 a) überdies zufällig gewählte Variationen von Stacktemperatur und Methanolkonzentration dargestellt (schwarz).

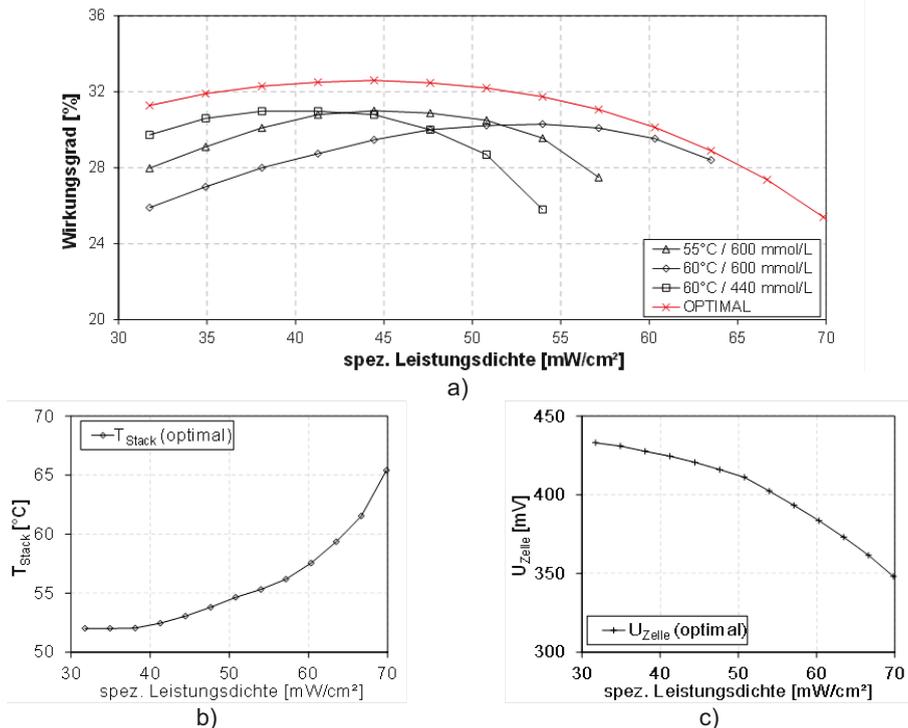


Abb. 50: Vergleich maximaler Wirkungsgrad mittels Betriebsparametervariation

Der maximal erreichbare Wirkungsgrad des DMFC-Stacks ergab sich bei einer Ausgangsleistungsdichte von $44,4 \text{ mW/cm}^2$ und betrug $32,6 \%$. Des Weiteren lässt sich erkennen, dass die Kurve des optimalen Wirkungsgrads im gesamten Lastbereich deutlich über den Wirkungsgradkurven mit festen Betriebsparametern liegt. Es zeigte sich eine maximale Wirkungsgradsteigerung von 7% -Punkten. Durch die statisch-ökonomische Optimierung wurde neben der Bereitstellung des maximalen Wirkungsgrads zusätzlich durch die gezielte Variation der einzelnen Betriebsparameter eine minimale Stacktemperatur und eine maximale Zellspannung über den gesamten Betriebsbereich erzielt, so dass neben der Vermeidung beschleunigter Alterung zusätzlich kritische Betriebszustände vermieden werden konnten. Die Änderung der Betriebsparameter Stacktemperatur und Methanolkonzentration sind den Abb. 50 b) und Abb. 50 c) zu entnehmen.

Hinsichtlich der Langzeitstabilität und damit einhergehender Alterungsphänomene wurden die Messdaten eines 25.000 Stunden-DMFC-Versuchs analysiert, mit dem Ziel ein alterungsabhängiges Zellmodell zu generieren. Das initiale Modell der Eingangsleistung der DMFC wurde in diesem Zusammenhang beibehalten und um den charakteristischen Aspekt des Alterungsgrads erweitert. Mittels dieses alterungsabhängigen Modells fand eine Bewertung der Alterung auf die zuvor definierten Betriebsführungsaspekte statt. Abb. 51 zeigt den maximalen Wirkungsgrad und die Zellspannung über die gesamte Betriebszeit. Zum einen bei fortlaufender Minimierung der Eingangsleistung mit Anpassung des Alterungsgrads (schwarz) und zum anderen ohne fortlaufende Minimierung der Eingangsleistung (rot).

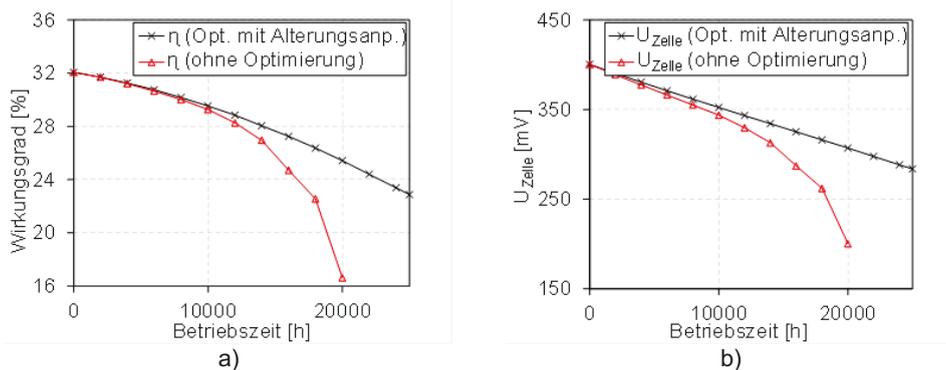


Abb. 51: η und U_{Zelle} bei 0...25.000 Betriebsstunden

Dabei zeigte sich, dass bei aktiver „Minimierung der Eingangsleistung“ unter Berücksichtigung des aktuellen Alterungsgrades der maximale Wirkungsgrad über 25.000 Betriebsstunden um lediglich 9% -Punkte absinkt und es hinsichtlich der Zellspannungsverteilung zu keinen kritischen Betriebspunkten kommt. Bei inaktiver Minimierung über 20.000 Betriebsstunden ergab sich eine zusätzliche Verschlechterung des Wirkungsgrads um 10% -Punkte. Zusätzlich dazu erreichte die Zellspannung bei 20.000 Betriebsstunden kritische Werte, woraus eine wesentliche Reduktion der Langzeitstabilität resultierte.

Basierend auf diesen Ergebnissen fand der Entwurf einer aktiven alterungstoleranten Betriebsführung statt. Dabei wurde zunächst eine Fehlerdiagnose entwickelt, die den vorhandenen Alterungsgrad eindeutig identifiziert. Nach dem dies gelungen war, konnte abhängig vom Alterungsgrad, eine Rekonfiguration der Betriebsführung durchgeführt werden, um weiterhin den maximalen Wirkungsgrad zu erreichen und die geforderten

Langzeitstabilitätskriterien zu erfüllen. In Abb. 52 sind der Wirkungsgrad und die Zellspannung bei praktischer Anwendung an einem 5-Zellen-DMFC-Stack dargestellt. Es wird deutlich, wie durch eine Rekonfiguration der Betriebsführung bei 1200 Sekunden auch bei fortgeschrittener Alterung der Wirkungsgrad gesteigert werden konnte, siehe Abb. 52.

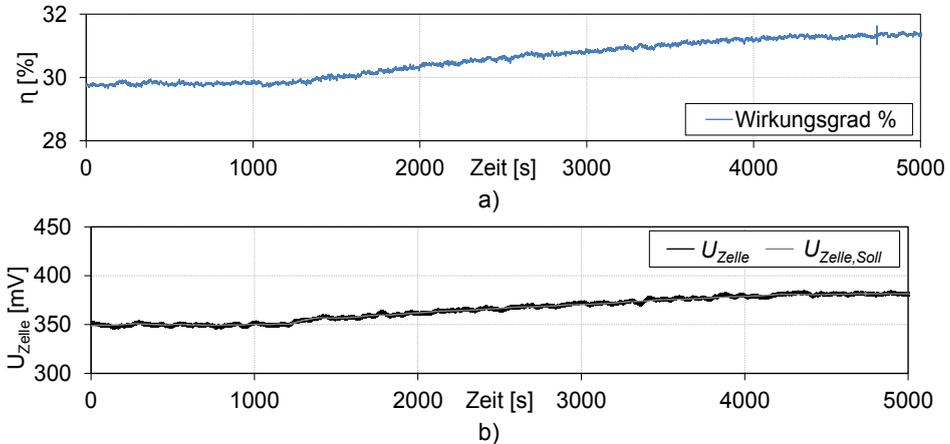


Abb. 52: η und U_{Zelle} bei praktischer Anwendung an einem 5-Zellen-DMFC-Stack

Die entwickelte Betriebsführung zeigte sich dabei – bei einer Alterung von 660 Betriebsstunden – mit einer Steigerung des Stackwirkungsgrads um 1,5 %-Punkte als effektiv (Abb. 52 a)). Die Langzeitstabilität – mit Fokus auf die erreichbare Zellspannung – wurde durch einen Zuwachs von höchstens $\Delta U_{Zelle} = 30$ mV in Abb. 52 b) auch experimentell nachgewiesen.

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.glösen@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 und Patente

Veröffentlichungen

Ince, A. C.; Karaoglan, M. U.; Glüsen, A.; Colpan, C. O.; Müller, M.; Stolten, D.,
Semiempirical Thermodynamic Modeling of a Direct Methanol Fuel Cell System.

International

Journal of Energy Research 2019, 0, 1-15. DOI: 10.1002/er.4508

Glüsen, A.; Dionigi, F.; Paciok, P.; Heggen, M.; Müller, M.; Gan, L.; Strasser, P.; Dunin-Borkowski, R. E.; Stolten, D.,

Dealloyed Pt_{ni}-Core-Shell Nanocatalysts Enable Significant Lowering of Pt Electrode Content in Direct Methanol Fuel Cells

ACS Catalysis 2019, 9, 3764-3772. DOI: 10.1021/acscatal.8b04883

Karaođlan, M. U.; Ince, A. C.; Colpan, C. O.; Glüsen, A.; Kuralay, N. S.; Müller, M.; Stolten, D.,

Simulation of a Hybrid Vehicle Powertrain Having Direct Methanol Fuel Cell System through a Semi-Theoretical Approach

Int. J. Hydrogen Energy 2018. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2018.11.039

Colpan, C. O.; Ouellette, D.; Glüsen, A.; Müller, M.; Stolten, D.,

Reduction of Methanol Crossover in a Flowing Electrolyte-Direct Methanol Fuel Cell

Int. J. Hydrogen Energy 2017, 42, 21530-21545. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.01.004

Wichtige Patente

Erteilte Patente:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
Dr. A. A. Kulikovskiy	1.2601	Verfahren zur Charakterisierung der Katalysatorstruktur in einer Brennstoffzelle, sowie dazu geeignetes Brennstoffzellendesign
Dr. A. A. Kulikovskiy	1.2644	Direkt-Alkohol-Brennstoffzelle und Direkt-Alkohol-Brennstoffzellenstapel mit effektiver CO ₂ -Entfernung, sowie Verfahren zum Betreiben einer solchen Direkt-Alkohol-Brennstoffzelle

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 großtechnisch realisierbarer Elektrolysesysteme und -komponenten. Dabei steht das Thema Kostenreduktion, über eine Erhöhung der Lebensdauer und der Leistungsdichte im Vordergrund. Aber auch eine Steigerung der Effizienz ist ein wichtiger Schlüssel um die Elektrolyse zukünftig im größeren Maßstab sinnvoll einsetzen zu können.

Hinsichtlich gesteigerter Leistungsdichte und Effizienz konnten große Fortschritte durch eine Reduzierung der Membrandicke und die damit verbundenen Steigerung der ionischen Leitfähigkeit erreicht werden. Diese Arbeiten richteten sich in den vergangenen Jahren hauptsächlich auf die PEM Elektrolyse und werden zukünftig auf die alkalische Elektrolyse erweitert.

Langfristig steht die Speicherung großer Energiemengen aus regenerativ erzeugtem Strom im Entwicklungsfokus. Dazu ist der Einsatz der Elektrolyse im GW-Maßstab notwendig. Zur Verbesserung der Wirtschaftlichkeit, muss der Anteil der Platingruppenmetalle so gering wie möglich gehalten werden und gleichzeitig die Haltbarkeit der Elektroden auf 40.000 Stunden und mehr gesteigert werden. Ein Ansatz dies zu erreichen liegt in der Entwicklung geeigneter Katalysator- und Elektrodenstrukturen. Insbesondere die am Institut entwickelten nanostrukturierte Katalysatoren können dazu eine Schlüsseltechnologie darstellen.

Ein weiterer Schwerpunkt liegt im Betrieb der Elektrolyse bei erhöhten Temperaturen. Durch eine Steigerung der Temperatur auf Werte bis ca. 200 °C soll die Reaktionskinetik verbessert werden und gleichzeitig die technisch sinnvolle Auskopplung von Abwärme ermöglicht werden. Wie in der weiteren Darstellung ersichtlich, verfolgen wir in der Niedertemperatur-Wasserelektrolyse einen ganzheitlichen Ansatz der sich von der Elektrochemie hin zum funktionierenden Gesamtsystem erstreckt. Dadurch ist es möglich die oftmals komplizierten Wechselwirkungen, zwischen den Zell- und Systemkomponenten, zu identifizieren und eine an den genannten Zielen orientierte Entwicklung zu erreichen.

3.5.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.5.2.1 Nanokatalysatoren für die Wasserelektrolyse

Die träge Kinetik der Sauerstoff-Entwicklungsreaktion (OER) veranlasst Forscher dazu, weiterhin aktivere und stabilere Elektrokatalysatoren für die Wasserelektrolyse zu entwickeln. Zurzeit bestehen die aktivsten OER-Katalysatoren in sauren Lösungen aus IrO_2 oder RuO_2 , jedoch haben diese Katalysatoren den Nachteil der Knappheit und hohen Kosten von Edelmetallen. Intensive Forschung wird zur Entwicklung großer Oberflächen, maximaler atomarer Ausnutzung sowie kostengünstiger Elektrokatalysatoren wie Übergangsmetall-

Oxiden der vierten Periode und Perowskiten betrieben¹⁰¹¹. Die Dotierung mit nicht-Edelmetallen kann den Ir-Gehalt von Elektrokatalysatoren reduzieren und aufgrund der synergistischen Effekte zwischen verschiedenen Metallen gleichzeitig ihre intrinsische Aktivität erhöhen¹². Ein sehr vielversprechender Ansatz sind bimetallische Gerüst-Nanostrukturen, die im Vergleich zu Volumenmaterialien eine hervorragende katalytische Aktivität erreichen. Die dreidimensionale Geometrie und exponierte Ecken und Kanten spielen eine positive Rolle als Aktivstellen. Wir berichten hier über eine Synthesestrategie für die Eintopfherstellung von Ni-Ir-Kern/Hülle-Nanostrukturen, die – anschließend geätzt – eine Nanogerüststruktur bilden. Thermodynamische Berechnungen deuten an, dass Iridium die Bildung binärer Legierungsphasen mit Ni aufgrund der negativen Seigerungsenergien von IrNi-Phasen nicht begünstigt; diese Daten prognostizieren, dass Ir-basierte multimetallische Nanokristalle als Modellsysteme für die erwünschten Kern/Hülle-Strukturen fungieren können. Aufnahmen durch Rastertransmissionselektronenmikroskopie (STEM) und Energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDX) wie in Abb. 53 zeigen, dass die Morphologie von entsprechend hergestelltem Ni-Ir eine Kern/Hülle-Struktur besitzt.

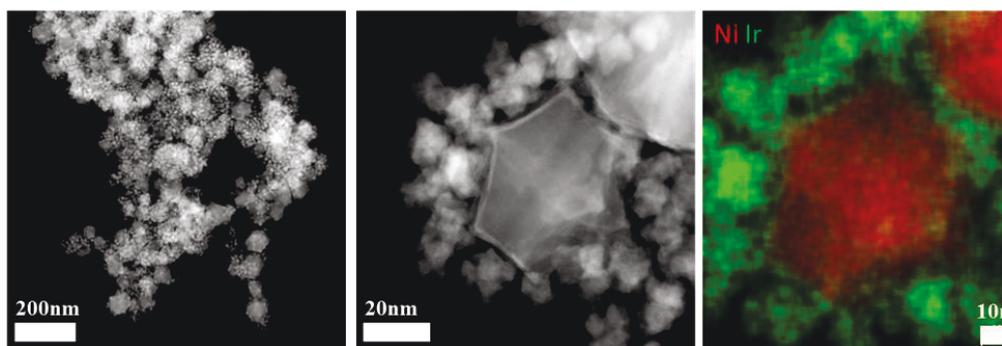


Abb. 53: (a) HAADF-STEM-Übersichtsbild (Weitwinkel-Dunkelfeld-Rastertransmissionselektronenmikroskopie) von entsprechend hergestellten Ni-Ir-Strukturen; (b) HAADF-STEM-Aufnahme einer einzelnen Ni-Ir-Nanostruktur; (c) entsprechende EDX-Karten: Ni (rot) und Ir (grün)

Da große Mengen Ni in der Struktur der OER in saurer Umgebung der Stabilität der Elektrokatalysatoren nicht zuträglich ist, wurde im nächsten Schritt das Ni vom Kern entfernt, sodass die Nanogerüst-Struktur zurückblieb. Das Nanogerüst wird durch selektives Ätzen der auslaugbaren Komponenten aus Phasen-geseigerten festen Legierungs-Nanopartikeln geformt. In unserem Fall ist Ni besser zur Auslaugung und Formung des Ni-Ir-Nanogerüsts durch Säurebehandlung geeignet. Abb. 54 zeigt die HAADF-STEM-Aufnahmen des Ni-Ir-Nanogerüsts nach dem Ätzprozess.

¹⁰ Koper, M. T. M. Thermodynamic Theory of Multi-Electron Transfer Reactions: Implications for Electrocatalysis. *J. Electroanal. Chem.* 2011, 660 (2), 254–260.

¹¹ Wang, H.; Dai, H. Strongly Coupled Inorganic-Nano-Carbon Hybrid Materials for Energy Storage. *Chem. Soc. Rev.* 2013, 42 (7), 3088–3113.

¹² Chen, C., Y. et al. Directions at low temperature in the Present Classical Theory without Randomness, *S. Science* (80-.). 2014, 343 (March), 1339–1343.

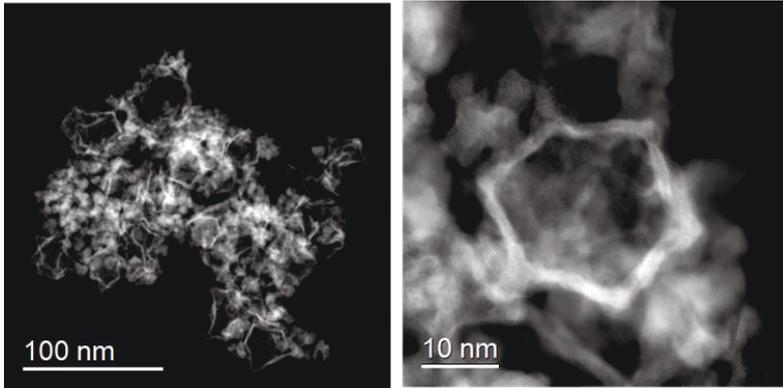


Abb. 54: (a) HAADF-STEM-Aufnahme des Ni-Ir-Nanogerüsts nach dem Ätzprozess; (b) Hoch aufgelöste HAADF-STEM-Aufnahme eines einzelnen Ni-Ir-Nanogerüstteils

Im nächsten Schritt untersuchen wir diese Nanogerüste als Elektrokatalysatoren für die OER in Säurelösungen. Wir sind der Überzeugung, dass diese Untersuchungen Alternativen für die Fertigung von legierten bimetallischen Nanostrukturen eröffnen und zu den OER-Katalysatoren für die Energiewandlung der Zukunft führen werden.

3.5.2.2 MEA Fertigung

Die Herstellung von Membran-Elektroden-Einheiten (MEA: engl.: membrane electrode assembly) für die PEM Wasserelektrolyse steht vor der Herausforderung, den elektrochemischen Wirkungsgrad der MEAs zu steigern und die dafür verwendeten Prozesse so aufzubauen, dass diese skalierbar sind und für die Massenfertigung genutzt werden können. Der elektrochemische Wirkungsgrad (η) der MEAs hängt deutlich von der Dicke der verwendeten Membran ab (Abb. 55), da die im Zellbetrieb durch die Membran fließenden Protonen Ohm'sche Verluste verursachen, die die Membran aufheizen.

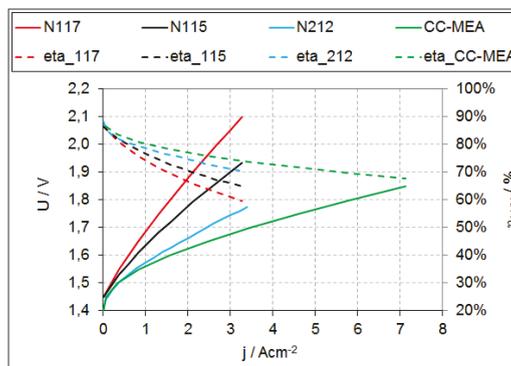


Abb. 55: Einfluss der Membrandicke auf die Polarisationskurve und den Wirkungsgrad (bezogen auf den unteren Heizwert LHV) einer MEA für die PEM Wasserelektrolyse. N117- Membrandicke 178 μm , N115- Membrandicke 127 μm und N212- Membrandicke 50 μm . In grüner Farbe sind die Ergebnisse für eine CC-MEA mit gleicher Katalysator-Beladung dargestellt. Die Membrandicke beträgt 20 μm .

Gelingt es, sehr dünne Membrane für den Bau von PEM MEAs zu verwenden, können diese Verlustprozesse deutlich reduziert und der Wirkungsgrad gesteigert werden. Der Nachteil von nur wenigen 10 μm dünnen Membranen ist allerdings, dass sich diese insbesondere im Herstellungsprozess großflächiger MEAs schwer verarbeiten lassen und leicht reißen können. Zudem führt die geringe Membrandicke im Zellbetrieb zu einer erhöhten Wasserstoffpermeation durch die Membran wodurch auf der Anode höhere Wasserstoffkonzentrationen entstehen, die gefährliche explosionsfähige Gemische aus Wasserstoff und Sauerstoff bilden können.

Um das mechanische Problem beim Umgang mit der dünnen Membranen zu lösen, wurde am IEK-3 ein neues Verfahren entwickelt. Hierbei wird die MEA ausschließlich durch einen Beschichtungsprozess und ohne Verwendung einer separaten Membran hergestellt. Die wesentlichen Schritte einer solchen CC-MEA (completely coated MEA) Herstellung sind in **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** Abb. 56 dargestellt.

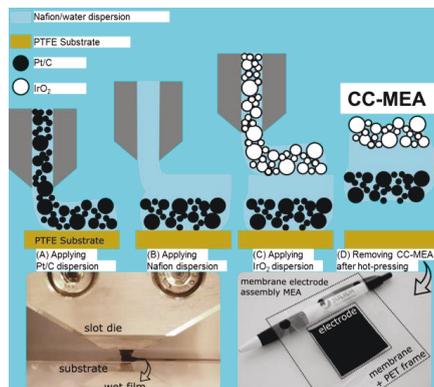


Abb. 56: A-C: Die Herstellung der CC-MEA erfolgt durch sukzessive Beschichtung der Kathode, der Membran und der Anode. D: Nach einem Heiß-Press-Prozess wird die CC-MEA von der Trägerfolie (PTFE) entfernt. Unten links: Seitenansicht der Schlitzdüse während der Beschichtung. Unten rechts: CC-MEA inklusive einer PET-Rahmen Stabilisierung (Die gepunktete Linie deutet den PET-Rahmen an).

Für die Fertigung der CC-MEA wird zunächst die Kathodendispersion mit Hilfe einer Schlitzdüse auf ein PTFE-Substrat appliziert und getrocknet. Für eine bessere Stabilität der späteren MEA wird in einem zweiten Schritt ein PET-Rahmen um die aktive Fläche der Elektrode gelegt und sowohl der Rahmen als auch die Elektrode mit einer Ionomerlösung (Nafion D2021) übergossen. Die getrocknete Membran wird in einem finalen Beschichtungsschritt mit der Anodendispersion beschichtet. Nach der Trocknung der Anode und einem Heiß-Press-Prozess kann die CC-MEA von dem PTFE entfernt werden. Durch den PET-Rahmen hat die CC-MEA trotz geringer Membrandicke von 20 μm eine ausreichende mechanische Stabilität und kann auf diese Weise gut in Einzelzellmessungen charakterisiert werden.

Um die bei den dünnen Membranen auftretende hohe Wasserstoffpermeation zu verringern müssen in weiteren Arbeiten die für das Zustandekommen der Permeation verantwortlichen Prozesse identifiziert werden. Ein Einflussfaktor für die Permeation ist die Elektrodenstruktur der Kathode, die sich bei der Herstellung, genauer gesagt bei der Trocknung der Elektrode ausbildet. Um die Zusammenhänge zwischen Trocknung und Strukturbildung in der

Elektrode zu verstehen, wurde eine am IEK-3 entwickelte Trocknungsanalysetechnik verwendet, um die Ursachen von Rissbildung und deren Abhängigkeit von Herstellungsparametern verstehen zu können.

Hierbei wurden Schichten aus wässrig-propanolhaltigen und katalysatorfreien Dummy-Dispersionen mittels Schlitzdüse bei unterschiedlicher Nassschichtdicke hergestellt. Es zeigte sich eine deutliche Zunahme des Rissanteils und der Rissbreite bei sowohl Zunahme der Schichtdicke als auch bei Abnahme des Propanolanteils in der Dispersion (siehe Abb. 57). Die Ergebnisse verdeutlichen die Möglichkeit einer gezielten Steuerung des makroskopischen Schichtbildungsprozesses bei nur geringer Veränderung des Ursprungssystems. Zukünftig sollen weitere Möglichkeiten geprüft werden, den Schichtbildungsprozess kontrollierbar zu gestalten. Dies ermöglichte eine Untersuchung des Zusammenhangs von Rissen, Elektroden-Performance und H₂-Permeation.

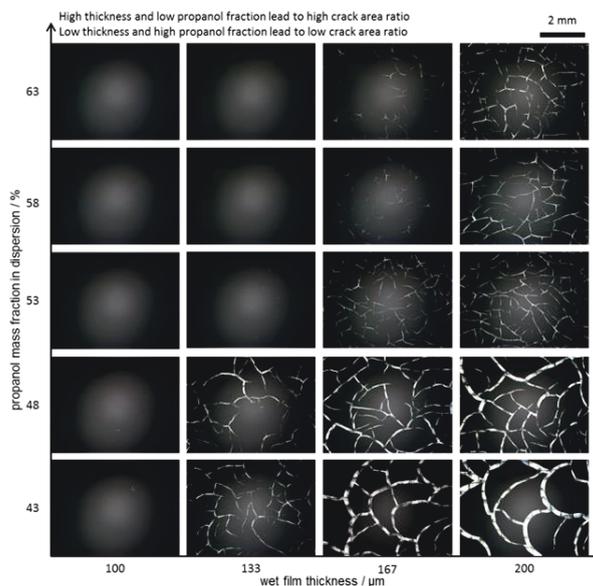


Abb. 57: Einfluss der Schichtdicke und des Propanol-Massenanteils in der Ausgangsdispersion auf die Rissbildung in der getrockneten Schicht.

In zukünftigen Arbeiten soll der Zusammenhang zwischen Wasserstoffpermeation und Elektrodenstruktur weiter untersucht werden, um die Permeation soweit zu reduzieren, dass keine sicherheitskritischen Aspekte auftreten. Das Ziel ist die Nutzung des CC-MEA-Verfahrens für die großskalige MEA Herstellung und deren sicherer Betrieb.

3.5.2.3 Alkalische Wasserelektrolyse

In enger Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer-Institut für Mikrostruktur von Werkstoffen und Systemen (IMWS) und der Firma Kumatec GmbH werden intensive Erforschung und Entwicklung von Elektroden für die Wasserstoffentwicklungsreaktion in alkalischen Elektrolyseuren betrieben. Das Ziel des Projektes

zur Entwicklung leistungsoptimierter und kostengünstiger Elektrodenstrukturen für die alkalische Elektrolyse (ELKE) ist die Konstruktion neuer Elektroden, die sowohl leistungsstark (1 A cm^{-2} bei 2 V) als auch günstig in der Herstellung und vor allem besonders langlebig sind. Raney-Nickel und verschiedene Ni/Mo-Legierungen wurden daher aufgrund ihrer großen Stabilität in stark alkalischen Umgebungen als Elektrokatalysator-Materialien gewählt. Die bevorzugte Beschichtungstechnik ist aufgrund seiner Anpassbarkeit an das Rolle-zu-Rolle-Verfahren das Rakelstreichverfahren, mit dem Elektrokatalysatoren kontinuierlich und im großen Maßstab – und daher kostengünstig – auf Trägermaterialien abgeschieden werden können. Im vergangenen Jahr (2018) wurde am IEK-3 ein neues Labor aufgebaut, das durch den gleichzeitigen Betrieb von acht einzelnen alkalischen Elektrolysezellen dabei helfen soll, diese Ziele zu erreichen. Abb. 58 zeigt eine von insgesamt vier Versuchsanlagen mit der Vorheizzelle zur Vorerhitzung des Elektrolyten bevor er in die beiden Messzellen fließt. Zwei der Versuchsanlagen dienen kurzen Messungen wie Polarisationskurven für schnelle anfängliche Einblicke in neu konstruierte Elektroden. Die beiden übrigen Versuchsanlagen dienen langfristigen Langlebigkeitsstudien.

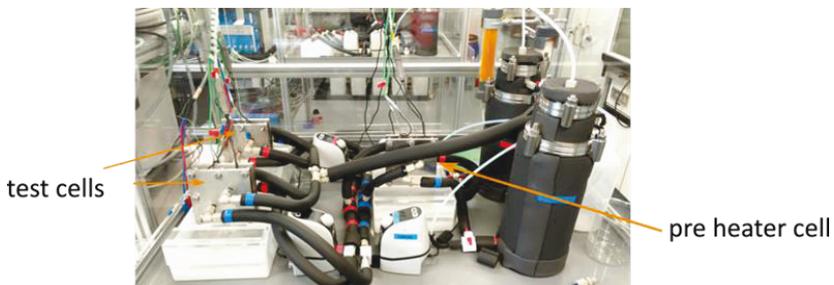


Abb. 58: Alkalische Versuchsanlage im neu aufgebauten Labor

Die im Verlauf des ELKE-Projektes neu entwickelten Elektroden müssen mit einer stabilen Benchmark-Elektrode verglichen werden; für diesen Zweck ist Nickelschaum die beste Wahl. Eine Skizze des verwendeten Zell-Designs ist in Abb. 59 dargestellt. Lediglich die Kathodenseite wird mit den neuen Elektrokatalysatoren modifiziert. Auf der Anodenseite wird vorgeheizter Ni-Schaum auf das Flowfield geschweißt, damit die Anode bei jeder Messung gleich ist. Die Temperatur der Zellen wird bei $80 \text{ }^\circ\text{C}$ gehalten und eine KOH-Konzentration von 32,5 Gew.-%

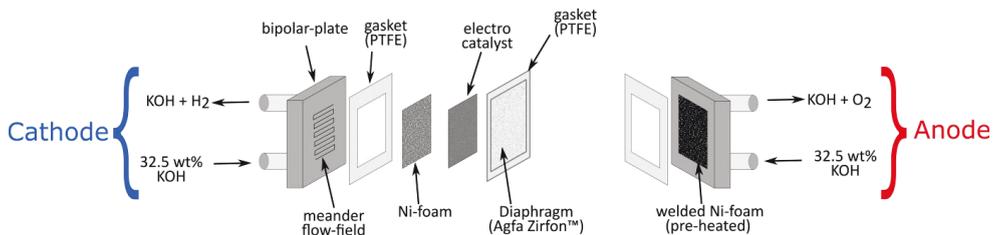


Abb. 59: Skizze des am IEK-3 verwendeten Zell-Designs für Untersuchungen der alkalischen Elektrolyse

Die Benchmark-Zelle wurde zehn Mal zusammengebaut und die Leistung mit zwei verschiedenen Versuchsanlagen gemessen, um die reproduzierbare und austauschbare

Charakterisierung der Benchmark-Zelle durch die neu aufgebauten Versuchsanlagen zu gewährleisten. Wie in Abb: 60 dargestellt, zeigen die so erzielten Ergebnisse eine angemessene Übereinstimmung zwischen den beiden Versuchsanlagen. Die durchschnittlichen Spannungen und Standardabweichungen sind durch Messpunkte bzw. Fehlerbalken dargestellt. Die Nominalspannung von 200 mA/cm^2 liegt bei einer Versuchsanlage bei $2,00 \pm 0,04 \text{ V}$ und beim anderen bei $2,01 \pm 0,03 \text{ V}$.

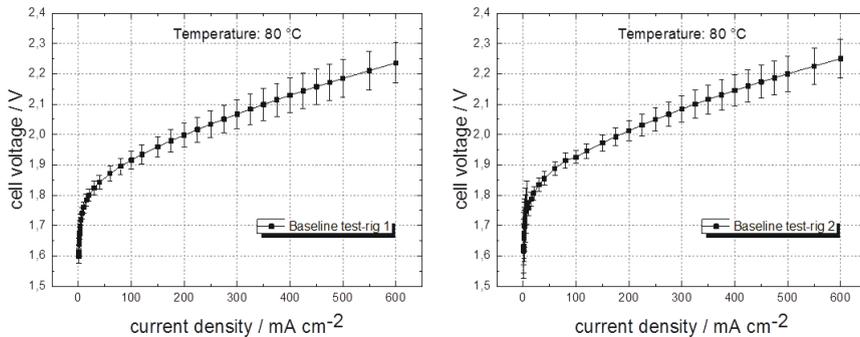


Abb: 60. Polarisationskurven der Nominalspannung beider Kurzzeit-Versuchsanlagen

Mit der Benchmark-Zelle wurde zudem ein Langzeit-Test durchgeführt, in dem über 1.000 h eine Spannung von 2 V angelegt wurde, um die Degradation des Nickel-Schaums über diesen Zeitraum festzustellen. Das Ergebnis in Abb. 61 zeigt, dass die Zelle nach 200 h einen stabilen Zustand erreicht hatte und anschließend keine weitere Degradation festgestellt wurde.

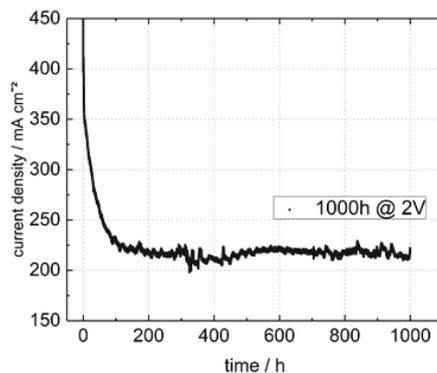


Abb. 61: Langzeit-Messung der Benchmark-Zelle über 1000 h bei 2 V

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. M. Carmo	5590 m.carmo@fz-juelich.de	Leiter der Abteilung Elektrochemie Elektrolyse
Dr. M. Stähler	2775 m.staehler@fz-juelich.de	Leiter der Gruppe MEA-Fertigung
D. Borah	6365 d.borah@fz-juelich.de	Strömungssimulation
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. Glösen	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
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

O. Panchenko	3079 o.panchenko@fz-juelich.de	Entwicklung und Charakterisierung poröse Schichten
L. Ritz	5725 l.ritz@fz-juelich.de	Mechanik
S. Saba	9568 s.saba@fz-juelich.de	Wirtschaftlichkeit Elektrolysesysteme
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

Borgardt, E., Panchenko, O., Hackemüller, F. J., Giffin, J., Bram M., Müller, M., Lehnert, W., Stolten, D.

Mechanical characterization and durability of sintered porous transport layers for polymer electrolyte membrane electrolysis

Journal of Power Sources 374, Pages 84-91 {2018}

Saba, S. M., Müller, M., Robinus, M., Stolten, D.

The investment costs of electrolysis--a comparison of cost studies from the past 30 years

International Journal of Hydrogen Energy 43, Pages 1209-1223, 2018

Tjarks, G., Gibelhaus, A., Lanzerath, F., Müller, M., Bardow, A., Stolten, D.

Energetically-optimal PEM electrolyzer pressure in power-to-gas plants

Applied Energy 218, Pages 192-198, 2018

Panchenko, O., Borgardt, E., Zwaygardt, W., Hackemüller, F. J., Bram, M., Kardjilov, N., Arlt, T., Manke, I., Müller, M., Stolten, D., Lehnert, W.

In-situ two-phase flow investigation of different porous transport layer for a polymer electrolyte membrane (PEM) electrolyzer with neutron spectroscopy

Journal of Power Sources 390, Pages 108-115, 2018

Carmo, M., Keeley, Gareth P., Holtz, D., Grube, T., Robinus, M., Müller, M., Stolten, D.

PEM water electrolysis: Innovative approaches towards catalyst separation, recovery and recycling,

International Journal of Hydrogen Energy 44 (7), Pages 3450-3455, 2019

Panchenko, O., Giesenberg, L., Borgardt, E., Zwaygardt, W., Kardjilov, N., Markotter, H., Arlt, T., Manke, I., Müller, M., Stolten, D., Lehnert, W.

Influence of Stoichiometry on the Two-Phase Flow Behavior of Proton Exchange Membrane Electrolyzers

Energies 12, 2019

Müller, M., Carmo, M., Glösen, A., Hehemann, M., Saba, S., Zwaygardt, W., Stolten, D.
Water management in membrane electrolysis and options for advanced plants
International Journal of Hydrogen Energy (44), Pages 10147-10155, 2019

Bender, G., Carmo, M., Smolinka, T., Gago, A., Danilovic, N., Mueller, M., Ganci, F., Fallisch, A., Lettenmeier, P., Friedrich, K. A., Stolten, D.

Initial approaches in benchmarking and round robin testing for proton exchange membrane water electrolyzers
International Journal of Hydrogen Energy, 2019

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

Die Abteilung Verfahrens- und Systemanalyse (VSA) hat im Berichtszeitraum einen erheblichen Wandel vollzogen. Dabei wurden insbesondere neue innovative Themen in das Forschungsportfolio aufgenommen (siehe weiter unten Beispiele). Dies führte zu einem erheblichen Personenaufwuchs auf zurzeit ca. 35 Wissenschaftler*innen, Doktor-, Master- und Bacheloranden*innen (siehe Abb. 62). Die Themen wurden dabei in der Abteilung (Leitung Dr. Martin Robinius) in die Gruppen „stationäre Energiesysteme (Leitung Dr. Peter Markewitz)“, „Mobilität (Leitung Dr. Thomas Grube)“ und „Sektorenkopplungen und Infrastrukturen (Leitung Dr. Jochen Linßen)“ untergliedert.



Abb. 62: Die Abteilung Verfahrens- und Systemanalyse

Die neuen Themen führen zu einer erheblichen Ausweitung der techno-ökonomischen Analysen von ehemals wasserstoffbasierten Versorgungspfaden hin zu Gesamtsystemanalysen. Dabei nutzt die Abteilung Energiesystemmodelle zur Analyse von Transformationsprozessen in der Energieversorgung und -nutzung in Deutschland und darüber hinaus gemäß den politischen Rahmensetzungen. Wesentliches Ziel ist die Bereitstellung von Handlungswissen zur Energietransformation für Entscheidungsträger in Politik und Wirtschaft.

Daneben ist das erklärte Ziel der VSA die Modellierungsgemeinschaft bzw. die Allgemeinheit hin zu Energiesystemmodellen zu führen. Dazu hat die VSA neben einer Reihe von Studien und Paper einige Modelle Open-Source zur Verfügung gestellt (siehe weiter unten). Dies bedeutet, dass der komplette Quellcode für jeden frei zugänglich gestellt wurde.

Die Arbeiten der VSA wurden im Berichtszeitraum mehrfach mit Preisen gewürdigt bspw. wurde das Paper von Welder et al.¹³ auf der SDEWES Konferenz in Dubrovnik aus 444

¹³ L. Welder, D.S. Ryberg, L. Kotzur, T. Grube, M. Robinius, D. Stolten, Spatio-temporal optimization of a future energy system for power-to-hydrogen applications in Germany, *Energy* 158 (2018) 1130-1149.

Einreichungen mit dem „Best paper award“ ausgezeichnet. Das Paper von Robinius et al.¹⁴ wurde aus allen Paper aus dem Open Access Journal „Energies“ mit dem „Third Research Paper prize of 2017“ ausgezeichnet.

Durch die laufenden Forschungsarbeiten konnte die VSA eine Reihe von geförderten Projekten einwerben und leitet aktuell zwei große Projekte („MODEX-NET“ und „METIS“) des Bundesministerium für Wirtschaft und Energie. Ziel des Projekts „METIS“ ist, die Genauigkeit von Energiesystemmodellen für Betriebs- und Auslegungsoptimierung weiter zu erhöhen und deren Betrachtungsumfang im Rahmen der Sektorkopplung zu erweitern. Gleichzeitig gilt es Anwenderbedürfnissen auf Nachvollziehbarkeit und kurzen Berechnungszeiten gerecht zu werden. Um die teils adversen Ansprüche an die Modellierung miteinander zu vereinbaren, werden zum einen Methoden zur systematischen Komplexitätsreduktion entwickelt mit dem Fokus der Bewahrung der Voraussagegenauigkeit der Modelle. Hierzu sollen auch neue Methoden zur Datenaggregation insbesondere im Hinblick auf Big Data entwickelt werden. Zum anderen werden zur Reduktion der Rechenzeit von linearen und gemischt-ganzzahligen Optimierungsproblemen verschiedene mathematische Dekompositionsalgorithmen getestet, um von einem erhöhten Grad an parallelisierten Rechenressourcen zu profitieren. Die Modellvalidierung erfolgt anhand von Ein- und Mehrknotenmodellen, sowohl mit myopischen, als auch mit Hard-Coupling-Ansätzen, um den Betrieb bestehender Systeme und die Auslegung geplanter Systeme gleichermaßen optimieren zu können. Die entwickelten Softwaretools werden open-source zur Verfügung gestellt, um eine Nachvollziehbarkeit und Qualität der entwickelten Methoden und Modelle zu garantieren und Offenheit und Transparenz zu gewährleisten.

Übergeordnetes Ziel des Forschungsprojekts „MODEX-NET“ ist ein Vergleich von bestehenden Stromnetzmodellen, die sowohl das nationale als auch das europäische Übertragungsnetz abbilden. Anhand von definierten Fallstudien (Modellexperimenten) werden die Unterschiede, die zwischen den Modellen bestehen, identifiziert und analysiert werden. Dies umfasst einen Vergleich der methodischen Grundlagen, der angelegten Modellarchitekturen sowie der genutzten Daten der beteiligten Übertragungsnetzmodelle. Besonderes Augenmerk wird hierbei auch auf die Rolle von Flexibilität auf Angebots- und Nachfrageseite gelegt. Auf der Basis der gewonnenen Erkenntnisse sollen Vorschläge für die Weiterentwicklung von Übertragungsnetzmodellen abgeleitet werden, um deren Aussagekraft für die Energiewende zu erhöhen.

Wie oben bereits erwähnt zeigen die Entwicklungen der VSA die stärkere Ausrichtung auf techno-ökonomische Energiesystemanalyse und Weg von konkreten Prozessanalysen. Um dieser Neuausrichtung Rechnung zu tragen ist geplant die Abteilung von „Verfahrens- und Systemanalyse (VSA)“ in „Techno-ökonomische Energiesystemanalyse (TSA)“ umzubenennen. Weiterhin soll der aktuelle Kurs in Richtung personeller Verstärkung konsequent fortgeführt werden. Dies erfordert ggf. die Unterteilung der Forschungsthemen in weitere Gruppen.

¹⁴ M. Robinius, A. Otto, P. Heuser, L. Welder, K. Syranidis, D. Ryberg, T. Grube, P. Markewitz, R. Peters, D. Stolten, Linking the Power and Transport Sectors—Part 1: The Principle of Sector Coupling, *Energies* 10(7) (2017) 956.

3.6.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

Im Weiteren sollen ausgewählte Forschungsergebnisse aus den Gruppen stationäre Energiesysteme (Leitung Dr. Peter Markewitz)¹⁵, „Mobilität (Leitung Dr. Thomas Grube)“ und „Sektorenkopplungen und Infrastrukturen (Leitung Dr. Jochen Linßen)“ vorgestellt werden.

3.6.2.1 Stationäre Energiesysteme

Lebensdauer von fossilen Kraftwerken

In vielen Energieszenarien spielt die Annahme von Kraftwerkslebensdauern eine zentrale Rolle, da sie häufig für die Fortschreibung des heutigen Kraftwerksbestandes benutzt oder als Stilllegungskriterium gesetzt werden. Ergebnisse solcher Analysen sind sogenannte Kraftwerkssterbelinien, auf deren Basis ein Ersatzbedarf abgeleitet wird. Viele Untersuchungen verweisen bei der Annahme von Lebensdauern auf Erfahrungsgrößen ohne dieser jedoch näher zu spezifizieren. Vor diesem Hintergrund wurde eine blockscharfe Ex-Post Analyse von deutschen Kraftwerken durchgeführt, die seit 1990 in Deutschland stillgelegt wurden. Die Analyse zeigt, dass sich die Lebensdauer von fossil gefeuerten Kraftwerken im Laufe der Dekaden deutlich verlängert hat. Während die realen Lebensdauern von Kohlekraftwerken in den 1990er Jahren noch in einer Bandbreite von 30 bis 35 Jahren lagen, liegen sie heute in einem Bereich von 40 bis 45 Jahren. Mit der Ex-Post Analyse liegt für Deutschland erstmalig eine belastbare Lebensdaueranalyse stillgelegter Kraftwerke vor, die für zukünftige Kraftwerksbestandsfortschreibungen eine solide Datengrundlage bildet. Auch im Zuge der aktuellen Diskussion eines Ausstiegs aus der Kohleverstromung und der damit korrelierenden vorzeitigen Abschaltung von Kohlekraftwerken stellen die ermittelten Lebensdauern eine gute Bewertungsgrundlage dar.¹⁵

Kostenunsicherheiten in Energiesystemmodellen

Für die Erstellung von Energie- bzw. Klimagasreduktionsszenarien werden oftmals Optimierungsmodelle eingesetzt, die in der Regel auf einen linearen Optimierungsansatz (LP) mit einer kostenminimierenden Zielfunktion basieren. Die Annahme von Inputdaten (z.B. zukünftige Investitionen für eine Technik) korreliert naturgemäß mit erheblichen Unsicherheiten. Ein wesentliches Ziel von Optimierungsrechnungen ist es, robuste Lösungen zu identifizieren. Für diesen Zweck wurde ein quadratischer Ansatz (Quadratic Programming) entwickelt, der die Investitionen als Funktion der Kapazität einer Technik beschreibt. Der Ansatz wurde in das am IEK-3 bestehende nationale Energiesystemmodell integriert. Die Ergebnisse verdeutlichen, dass im Vergleich zu herkömmlichen Ansätzen (LP) der neue Ansatz ein größeres Spektrum von Techniken wählt und Penny switching Effekte vermieden werden können. Im Vergleich zu alternativen Methoden wie stochastischen Ansätzen oder Monte Carlo Simulationen liegen die Rechenzeiten nur unwesentlich höher. Der entwickelte Ansatz lässt sich auch in bestehende Solver wie Gurobi, CPLEX oder XPRESS integrieren.

¹⁵ P. Markewitz, M. Robinius, D. Stolten, The Future of Fossil Fired Power Plants in Germany - A Lifetime Analysis, *energies* 11(6) (2018) 1616.

Möglichkeiten der Notstromversorgung von Einfamilienhäusern mit PV-Batteriespeichersystemen im Falle eines Blackouts

Die Kombination von Batteriespeichern mit Photovoltaikanlagen in Wohngebäuden ist in Deutschland mittlerweile Stand der Technik und ein etablierter Markt. Neben dem Ziel den Eigenverbrauch aus Photovoltaikanlagen zu erhöhen, spielt auch die Möglichkeit einer Notstromversorgung eine Rolle bei der Kaufentscheidung für einen Batteriespeicher. Die Notstromversorgungsfunktionalität von Photovoltaik-Batteriespeichersystemen (PV-BESS) wurde anhand einer Fallstudie bewertet, die ein Einfamilienhaus in Deutschland mit definiertem Stromlastprofil und installierter PV-BESS umfasst. Wichtige Faktoren, die die Notstromfunktionalität beeinflussen, sind: Beginn und Dauer des Blackouts, Stromlast und PV-Produktionsprofil während des Blackouts und der BESS-Ladezustand zu Beginn des Blackouts. Die Backup-Funktionalität hängt insbesondere von der verfügbaren Stromerzeugung aus der PV-Anlage ab und zeigt daher eine starke saisonale Abhängigkeit. Im Falle eines Stromausfalls stellt ein PV-BESS im Allgemeinen Strom zur Verfügung, der einem Haushalt ohne PV-BESS nicht zur Verfügung stehen würde. Die vollständige Abdeckung längerer Blackout-Perioden durch PV-BESS unter der Annahme eines normalen Lastprofils (100% autarker Systembetrieb) ist jedoch auf wenige hohe PV-Produktionsperioden während des Jahres beschränkt. In diesem Zusammenhang weisen Lastreduzierung und Lastverschiebung durch angepasstes Benutzerverhalten während eines Blackouts ein hohes Potenzial auf, die Backup-Versorgungsfunktionalität zu erhöhen, indem der Zeitraum verlängert wird, in dem die reduzierte Haushaltsstromlast aus dem PV-BESS gedeckt werden kann¹⁶.

Analyse und Bewertung zukünftiger energieverorgungskonzepte zur anforderungsgerechten Reduktion der Treibhausgasemissionen im urbanen Raum

Die urbane Energiewende erfordert neue Treibhausgas-Reduktionsstrategien aufgrund einer begrenzten Flächenverfügbarkeit bzgl. des Baus von Erzeugungseinheiten auf der einen Seite und einer hohen Bevölkerungsdichte mit einer einhergehenden hohen Energienachfrage auf der anderen Seite. Mögliche neue Strategien werden in einem realen urbanen Gebiet (Quartier) in einem Verbund von Wohngebäuden betrachtet. Zur Bestimmung der Strategien wird ein gemischt-ganzzahliger Optimierungsansatz gewählt. Ziel der Studie ist die Untersuchung dezentraler Sektorkopplungseffekte sowie die Bestimmung zukünftiger Anforderungen an Betriebsmittel (z.B. Ortsnetz-Transformatoren) in einem spezifischen urbanen Gebiet unter verschiedenen techno-ökonomischen Randbedingungen. Durch eine Vielzahl von Gebäuden und Technologieoptionen stellen Quartiere ein komplexes Optimierungsproblem dar, dessen Lösung mit hohen Rechenzeiten verbunden ist. In diesem Zusammenhang wurde ein neuer zweistufiger Ansatz für das gemischt-ganzzahlige Optimierungsproblem entwickelt, um die Komplexität und die Rechenzeit zu reduzieren bei weiterhin hoher Lösungsgüte¹⁷.

¹⁶ P. Stenzel, T. Kannengiesser, L. Kotzur, P. Markewitz, M. Robinius, D. Stolten, Emergency power supply from photovoltaic battery systems in private households in case of a blackout – A scenario analysis, Energy Procedia 155 (2018) 165-178.

¹⁷ T. Kannengiesser, M. Hoffmann, L. Kotzur, P. Markewitz, M. Robinius, D. Stolten, Optimization of Urban Energy Supply Systems with 2-Level Approach, (In Preparation).

Rückverstromung von Wasserstoff

In einer Studie¹⁸ wurden Wasserstoff-Strom-Umwandlungspfade zur Deckung von positiven Residuallasten durch nicht im System nutzbaren, erneuerbaren Strom techno-ökonomisch analysiert. Die Untersuchungen wurden auf einem Energieszenario für Nordrhein-Westfalen für das Untersuchungsjahr 2050 aufgebaut, in dem nicht nutzbarer Strom aus dem Norden von Deutschland in Wasserstoff umgewandelt und gespeichert wird. In Zeitperioden mit niedriger erneuerbaren Einspeisung kann der Wasserstoff zur Deckung der Stromnachfrage rückverstromt werden. Die Analyse wird mit Hilfe des kostenoptimierenden Energiesystemmodells FINE durchgeführt. Ein zentrales Ergebnis der Pfadanalyse ist, dass der Strombedarf in NRW in diesem Szenario vollständig aus erneuerbaren Energien gedeckt werden kann. Die CO₂-Einsparung beläuft sich dabei auf 44,4 Mio. t/a im Vergleich zu einem System mit Deckung des Residuallastbedarfs aus dem konventionellen Kraftwerkspark in NRW. Die Pfadanalyse ergibt als kostengünstigste Option die Nutzung von Gas- und Dampfturbinen zur Wasserstoff-Rückverstromung mit Stromgestehungskosten von 176 €/MWh (enthalten sind Strombezugskosten und Kosten der Elektrolyse, Speicher- und Infrastrukturkosten der Rückverstromung). Der Aufbau dieses Pfads ist in Abb. 63 dargestellt.

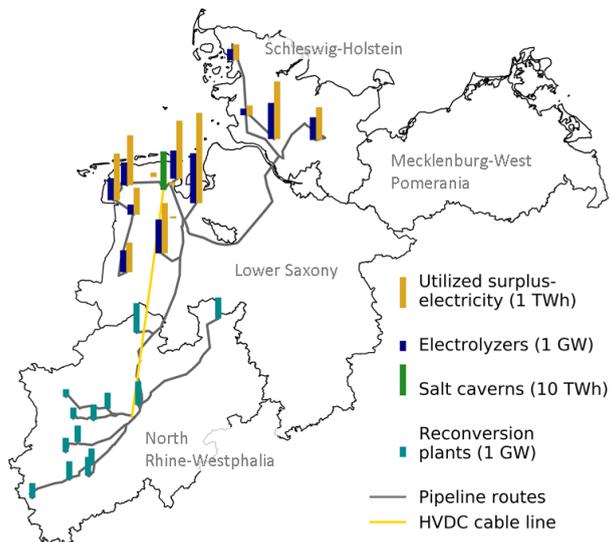


Abb. 63: Überschuss-Strommengen, installierte Kapazitäten der Elektrolyse und Kraftwerke sowie notwendige Transmissionsinfrastrukturen des kostenoptimalen Rückverstromungspfads

Eine umfangreiche Wasserstoffspeicherung und -umwandlung sowie die Nutzung der dafür gebauten Wasserstoffinfrastruktur können somit einen Beitrag zur Entlastung des Stromnetzes leisten. Darüber hinaus tragen die bewerteten Wasserstoffumwandlungspfade,

¹⁸ L. Welder, P. Stenzel, M. Robinius, D. Stolten, Design and Evaluation of Hydrogen Electricity Reconversion Pathways in National Energy Systems Using Spatially and Temporally Resolved Energy System Optimization, Submitted to International Journal of Hydrogen Energy 2018-11-18 (2018).

einschließlich der saisonalen Speicherung in Salzkavernen wesentlich zur Erhöhung der Versorgungssicherheit eines stark erneuerbaren Energiesystems bei.

3.6.2.2 Sektorenkopplung und Infrastruktur

Die Transformation des Energiesystems erfordert einen Umbau des existierenden Energiesystems mit deutlicher Erhöhung des Anteils an erneuerbaren Energien, der Steigerung der Energieeffizienz und der Defossilisierung der Endenergienachfrage¹². Diese Entwicklungen erfordern teilweise erhebliche Anpassungen, den Ausbau und auch den Rückbau von existierenden Infrastrukturen zur Umwandlung, Transport und Verteilung von Energieträgern. Das Element der Sektorenkopplung ermöglicht einen erweiterten Einsatz von erneuerbaren Energien in allen Endenergiesektoren. Das entwickelte Set an Modellen ermöglicht die Analyse und Bewertung von einzelnen Technikpfaden und gesamten Energiesystemen. Im Rahmen von Szenario-Analysen können Systemsimulationen und Optimierungsrechnungen durchgeführt werden und Effizienzen, Dynamiken, Emissionen und Kosten von zukünftigen Energiesystemen analysiert und bewertet werden. Ziele der Untersuchungen sind, potenzielle Beiträge zu Klimagasreduktionsstrategien von innovativen Techniken, Konzepten und Systemdesigns zu quantifizieren sowie techno-ökonomische Anforderungen an Infrastrukturen der Energie-versorgung zu definieren.

Die Stromerzeugung aus Windkraft an Land übernimmt einen wichtigen Beitrag zur Reduktion der Treibhausgasemissionen weltweit. Die Abschätzung von möglichen Windstrom-Erzeugungspotenzialen in Europa ist Gegenstand von zahlreichen Forschungsaktivitäten. Die Potenzialschätzungen stützten sich hierbei zahlreichen Annahmen zur Verteilung der Windenergieanlagen, deren derzeitiges Design und Leistungsgrößen sowie den Windverhältnissen vor Ort. Zukünftig mögliche und an die Windverhältnisse angepasste Turbinendesigns sind in derzeitig publizierten Potenzialabschätzungen nur in Ansätzen berücksichtigt. Um zukünftige Turbinendesigns und resultierende Stromgestehungskosten in den Potenzialanalysen für Europa zu berücksichtigen, wurde ein existierendes Kostenmodell um zukünftige Turbinendesigns erweitert und bei den Potenzialanalysen berücksichtigt. Basierend auf dem Modell GLAES und Daten zur Landverfügbarkeit in Europa aus¹⁹ ergibt sich mit einem angepassten Turbinendesign für das Jahr 2050 ein maximal installierbare Erzeugungskapazität der Onshore-Windstromerzeugung von 13,5 TW in Europa. Unter Berücksichtigung der räumlich aufgelösten Windgeschwindigkeitsverläufe verschiedener Wetterjahre ergibt sich daraus ein technisches Stromerzeugungspotential von 34,4 PWh. Die Stromgestehungskosten der jeweiligen Erzeugungsstandorte unterschieden sich je nach Windgeschwindigkeit und Turbinendesign teilweise deutlich, so dass die Stromgestehungskosten über die Gesamtkapazitäten einer Region ansteigen. Dies ist dadurch begründet, dass zur Erreichung von hohen regionalen Erzeugungspotentialen auch die Erschließung von ungünstigen Windstandorten erforderlich ist. Abb. 64 zeigt den Verlauf der durchschnittlichen Stromgestehungskosten von Onshore-Windenergieanlagen über den gewünschten Erzeugungskapazitäten Wind-Onshore eines Landes in Europa. Die jeweilige Kostensteigerung ist sehr stark abhängig von der Windsituation vor Ort und den verfügbaren Flächen mit guten Windertragssituationen. So bieten Großbritannien, Frankreich, Spanien, Norwegen, Österreich, Irland, Dänemark, Schweden, Finnland und Griechenland Stromerzeu-

¹⁹ S. Ryberg, M. Robinius, D. Stolten, Methodological Framework for Determining the Land Eligibility of Renewable Energy Sources, arXiv, 2017.

gungspotentiale mit Gestehungskosten von unter 3 ct/kWh. Norwegen weist dabei die höchsten Kapazitätspotentiale auf und überschreitet die Marke von 3 ct/kWh erst bei einer installierten Kapazität von knapp 50 GW. Deutschland weist nach dieser Potenzialabschätzung eine Windenergieanlagenkapazität von etwas über 100 GW mit Stromgestehungskosten unter 5 ct/kWh auf.

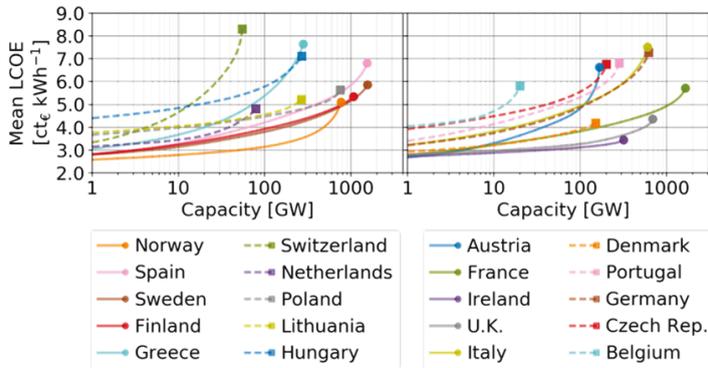


Abb. 64: Entwicklung der mittleren Stromgestehungskosten von Onshore-Windenergieanlagen über den Gesamtkapazitäten einer Region²⁰

Die signifikante Steigerung der dargebotsabhängigen Stromerzeugung aus erneuerbaren Energiequellen (maßgeblich Wind und PV) in Europa erfordert eine deutliche Erweiterung der Flexibilitäten in der Stromnachfrage. Auf Basis des zeitlich und räumlich hochauflösenden Stromnetzmodells EUROPOWER wurde der Einfluss von Nachfrage-Flexibilitäten durch Speicher oder steuerbare Verbraucher auf die Integration der erneuerbaren Energien in das zukünftige europäische Stromversorgungssystem analysiert²¹. Um zukünftig hohen Marktdurchdringungen von erneuerbaren Energien untersuchen zu können, wurde ein Szenario für die Stromversorgung des Jahres 2050 in Europa entworfen. Die Variation des Anteils an flexibler Stromnachfrage zeigt, dass sowohl Stromüberschüsse als auch Lastunterdeckungen bei Erhöhung der Flexibilitäten europaweit verringert werden können. Dieser Effekt wird jedoch deutlich durch die Verschiebedauer der flexiblen Lasten begrenzt. Bei einer unterstellten flexiblen Stromnachfrage von 10 % der Gesamtnachfrage und einer 24 h Verschiebezeit der Last kann nur ein Rückgang der erneuerbaren Stromüberschüsse von 7 % und eine Rückgang der Lastunterdeckung von 12,1% erreicht werden können. Zur weiteren Reduktion von Stromüberschüssen und Lastunterdeckungen sind insbesondere saisonale Energiespeicher und weiterer Netzausbau erforderlich.

In einer Analyse von zukünftigen Energiesystemdesigns wurde unter Berücksichtigung von räumlich und zeitlich aufgelösten Daten möglichen Power-to-Hydrogen Pfade für Deutsch-

²⁰ Ryberg, D.S.; Caglayan, D.G.; Schmitt, S.; Linßen, J.; Stolten, D.; Robinius, M. The Future of European Onshore Wind Energy Potential: Detailed Distribution and Simulation of Advanced Turbine Designs. Preprints 2018, doi: 10.20944/preprints201812.0196.v1.

²¹ K. Syranidis, P. Markowitz, J. Linssen, M. Robinius, D. Stolten, Flexible Demand for Higher Integration of Renewables into the European Power System, 2018 15th International Conference on the European Energy Market (EEM), 2018, pp. 1-6.

land untersucht²². Für die Optimierung des Energiesystems wurde der Modellgenerator FINE eingesetzt. Das untersuchte Energiesystem bildet eine erneuerbare Stromerzeugung basierend auf Wind-Onshore zur Wasserstoffherzeugung mittels Elektrolyse ab, welche zur Versorgung des Pkw-Verkehrs und der Industrie genutzt wird. Es wird eine 75 %-Durchdringung des PKW Bestands mit Brennstoffzellen-Antrieben unterstellt und ein industrieller Einsatz von Wasserstoff in Ammoniak-, Methanol- und Hochofenstahlherstellungsprozessen sowie in Raffinationsprozessen im Jahr 2050 angenommen. Insgesamt ergibt sich daraus ein zu deckender jährlicher Wasserstoffbedarf von insgesamt ca. 4,1 Mio. t/a. Das Energieversorgungssystem wird einmal mit und einmal ohne die Option einer geologischen Speicherung von Wasserstoff in Salzkavernen optimiert. Die resultierenden Systemdesigns sind in Abb. 65 dargestellt.

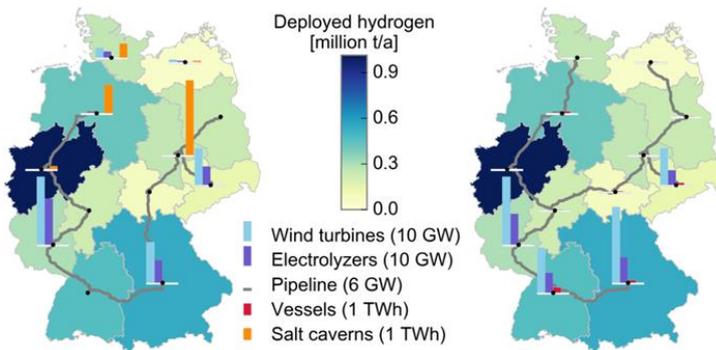


Abb. 65: Ergebnis der Energiesystemoptimierung (links: mit Salzkavernen als geologische Speicheroption, rechts: ohne Salzkavernen-Speicher).

Im ersten Fall werden Salzkavernen mit einer Kapazität von 10 TW_H (bezogen auf den Heizwert des gespeicherten Wasserstoffs) und Onshore-Windkraftanlagen mit einer Kapazität von 79 GW_{el} berechnet. Die geologischen Speicher werden zur saisonalen Speicherung und auch zur Abfederung von Nachfrageschwankungen eingesetzt.

Im Fall ohne Salzkavernen müssen technische Speicher mit deutlich höheren spezifischen Speicherkosten errichtet werden. Die Kostenoptimierung führt zu einer signifikanten Verringerung der Speicherkapazität von technischen Speichern (0,8 TW_{H₂}) bei gleichzeitig deutlich erhöhten installierten Leistungen der Onshore-Windenergieanlagen (116 GW_{el}). Dies führt im Vergleich zum Fall mit Salzkavernen zu einer deutlich höheren Abregelungen von Windstrom. Der Vergleich der resultierenden Wasserstoff-Gestehungskosten ist in Abb. 66 dargestellt.

²² L. Welder, D.S. Ryberg, L. Kotzur, T. Grube, M. Robinius, D. Stolten, Spatio-temporal optimization of a future energy system for power-to-hydrogen applications in Germany. In: Energy 158 (2018), pp. 1130-1149.

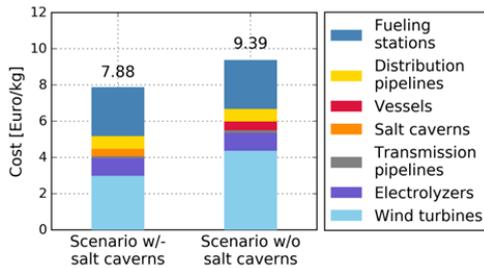


Abb. 66: Spezifische Wasserstoff-Gestehungskosten im Szenario 2050

Die spezifischen Wasserstoffgestehungskosten werden in beiden Fällen zu weniger als 10 €/kg_{H₂} berechnet. Der Vergleich der beiden Versorgungssysteme zeigt, dass die Verfügbarkeit von Salzkavernen zur geologischen Speicherung von Wasserstoff zu einer Kostensenkung von ca. 1,5 €/kg_{H₂} führt und damit den Wert von Salzkavernen in Wasserstoffversorgungssystemen deutlich macht.

3.6.2.3 Mobilität

Analyse des Beitrages unterschiedlicher Antriebsstrategien zur Erreichung der Klimaschutzziele

Im Kontext der nationalen Treibhausgasminderungsziele ist neben der Energiewirtschaft insbesondere der Verkehrssektor gefordert, substantielle Beiträge zu leisten. Für diesbezügliche Untersuchungen wurde in einem ersten Schritt ein Python-basiertes Modell entwickelt, das die Beschreibung des Beitrags unterschiedlicher Antriebsoptionen und der zugehörigen Kraftstoffe zunächst für den PKW-Verkehr ermöglicht. Die Modellierung orientiert sich an der Methodik der Well-to-wheel Bilanzierung. Im Ergebnis der szenario-basierten Analyse stehen Primär- und Endenergieverbrauch, Treibhausgasemissionen und Kosten in zeitlicher Auflösung bis zum Jahr 2050. Eingangsparmeter der Simulation sind unter anderem zeitabhängige Durchdringungsraten alternativer Antriebskonzepte sowie Annahmen zur Primärenergiebasis der eingesetzten Kraftstoffe im Zeitverlauf. Die Analyse zeigt, dass gravierende Umbrüche in der Struktur des PKW-Antriebsmix, beispielsweise hinsichtlich der Durchdringung elektrischer Antriebe mit Batterien und Brennstoffzellen zur Erreichung der Treibhausgas-Minderungsziele notwendig sind. Für ein exemplarisches Szenario zeigt Abb. 67, dass unter Annahme eines stark zunehmenden Anteils an Brennstoffzellen-PKW und gleichzeitiger Umstellung der Wasserstoffherzeugung auf erneuerbare Energien Treibhausgasminderungen in der geforderten Quantität erzielbar sind. Das Modell bietet darüber hinaus eine Grundlage für die Untersuchung weiterer Verkehrsträger und dient damit hinsichtlich der Bestands- oder Kostenmodellierung als Ausgangspunkt für dementsprechende Weiterentwicklungen.

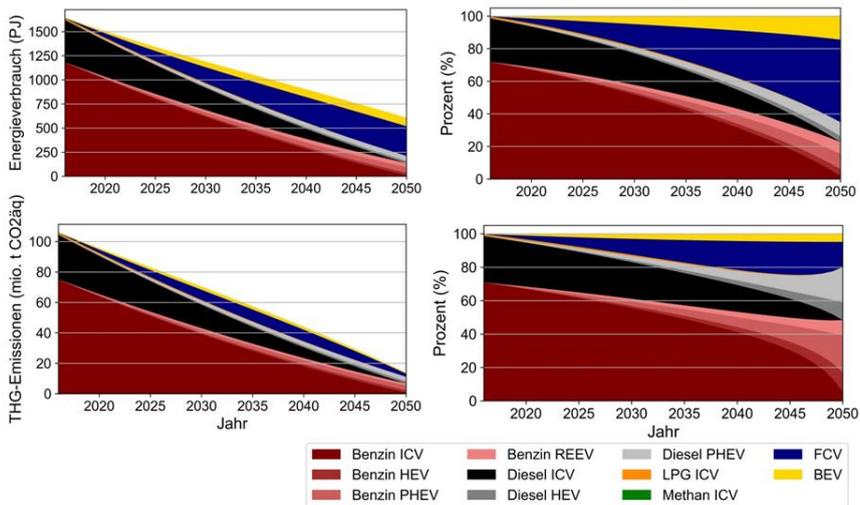


Abb. 67: WTW-Ergebnisse im Wasserstoff-Szenario; eigene Darstellung

Aufbau Infrastrukturen

Die technologische Vormachtstellung des derzeitigen kohlenstoffbasierten Kraftstoffsystems ist zum Teil auf die begrenzte Verfügbarkeit alternativer Kraftstoffinfrastrukturen zurückzuführen. Im Falle von Wasserstoff stellt der hohe Investitionsbedarf für die Infrastruktur bei niedriger Auslastung eine der größten Herausforderungen für die Einführung von Wasserstoff-Technologien dar. In früheren Arbeiten am IEK-3 wurde von Robinus et al. und Reuß et al. die wirtschaftliche Tragfähigkeit der Wasserstoffversorgung bei hohen Marktanteilen aufgezeigt^{23,24}. Darauf aufbauend gilt es nun, den Weg von heutigen niedrigem Umsatz hin zu hohen Marktdurchdringungen zu untersuchen und Strategien für die wirtschaftliche Einführung von Wasserstoffinfrastruktur zu erarbeiten. Hierfür wird eine detaillierte Systemmodellierung der landesweiten Entwicklung der Wasserstoff-Infrastruktur für einen niedrigen bis mittleren Wasserstoffbedarf durchgeführt, welche denen einer Einführungsphase entspricht. Eine diskrete Punkt-zu-Punkt-Lieferkettenanalyse, die sich von 2023 bis 2050 erstreckt, wird eingesetzt, um vielversprechende Infrastruktur-Entwicklungsszenarien und die damit verbundenen Wasserstoffverteilungskosten zu untersuchen. Zu den Lieferkettenpfaden gehören der Wasserstofftransport per LKW- und Pipeline sowie die saisonale Speicherung zum Ausgleich zeitlich variabler H₂-Produktion aufgrund fluktuierender erneuerbarer Stromerzeugung. In unseren aktuellen Untersuchungen werden verschiedene Penetrationsszenarien für brennstoffzellenbasierte Mobilitätsanwendungen wie Busse, Bahnen, Flurförderzeuge und Personenkraftwagen (PKWs), sowie weitere Wasserstoffnutzungen in der Industrie entworfen und analysiert.

²³ M. Robinus, A. Otto, K. Syranidis, D.S. Ryberg, P. Heuser, L. Welder, T. Grube, P. Markewitz, V. Tietze, D. Stolten, Linking the Power and Transport Sectors—Part 2: Modelling a Sector Coupling Scenario for Germany, *Energies* 10(7) (2017) 957.

²⁴ M. Reuß, T. Grube, M. Robinus, P. Preuster, P. Wasserscheid, D. Stolten, Seasonal storage and alternative carriers: A flexible hydrogen supply chain model, *Applied Energy* 200 (2017) 290-302.

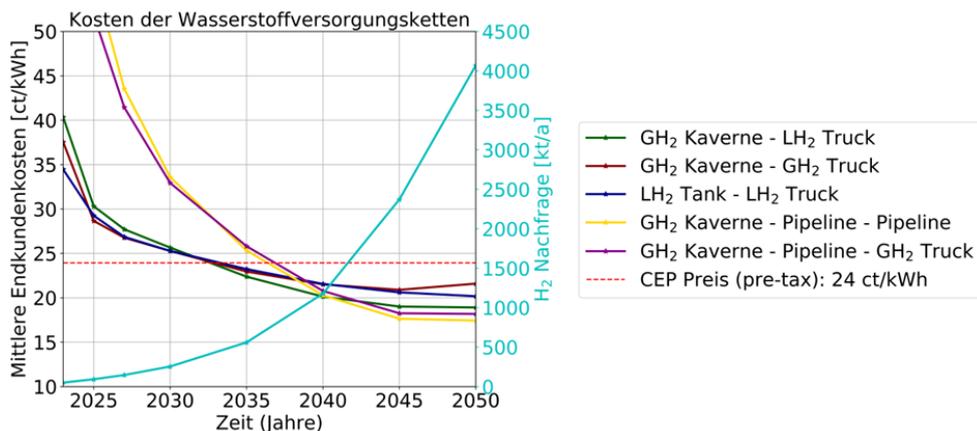


Abb. 68: Mittlere Wasserstoffversorgungskosten für unterschiedliche Zeitschritte

Erste Ergebnisse weisen für die Einführungsphase auf signifikante Kostendegressionen von bis zu 40%-50% in den untersuchten erneuerbaren Wasserstoff-Bereitstellungspfaden hin. Diese Kostenreduktionen können bereits bei einem jährlichen Gesamtbedarf von 400 kt (13,3 TWh) erreicht werden, was etwa 20% des heutigen jährlichen Wasserstoffabsatzes in Deutschland entspricht²⁵. In dem gewählten Wasserstoffnachfrageszenario erreichen alle untersuchten Versorgungspfade eine wettbewerbsfähige Preiszone in den Jahren 2033–2037. Daraus können wir schlussfolgern, dass wettbewerbsfähige Kosten für vollständig erneuerbare und landesweite Wasserstofflieferketten innerhalb von einer Dekade erreicht werden können.

Techno-ökonomische Analyse einer weltweiten Bereitstellung von Wasserstoff auf Basis erneuerbarer Energien

Zur technisch und ökonomisch sinnvollen Nutzbarmachung des Energiepotentials internationaler Vorzugsregionen der beiden erneuerbaren Energien (EE) Wind- und Solarenergie bietet sich die elektrolytische Herstellung von Wasserstoff (Power-to-Gas) an. Im Rahmen der am IEK-3 durchgeführten techno-ökonomischen Analyse einer weltweiten Wasserstoffversorgungsinfrastruktur auf Basis erneuerbarer Energien werden zunächst ausgewählte Regionen der Welt in Bezug auf ihr Wind- oder ihr PV-Energiepotential untersucht. Die höchsten Windenergieerträge wurden dabei unter anderem für Patagonien, Chile, Kanada und Island ermittelt²⁶. Die nachfolgende Analyse beinhaltet die Platzierung von Windenergieanlagen unter Berücksichtigung der Landverfügbarkeit, die Dimensionierung der Elektrolyseure, der Verdichter sowie der Transportleitungen bis zum Hafen und schließlich der Verflüssigung beziehungsweise Bindung des Wasserstoffs an organische Trägermaterialien (Liquid organic hydrogen carriers, LOHC). Bei der Speicherung am Hafen

²⁵ Roads2HyCom, *European Hydrogen Infrastructure Atlas and Industrial Excess Hydrogen Analysis*. 2007. p. 55-86.

²⁶ P.-M. Heuser, D.S. Ryberg, T. Grube, M. Robinus, D. Stolten, Techno-economic analysis of a potential energy trading link between Patagonia and Japan based on CO2 free hydrogen, *International Journal of Hydrogen Energy* (2019).

wird von einer 30 Tagereserve ausgegangen. Zur Ableitung regionsspezifischer Kostenfunktionen der Wasserstoffbereitstellung werden die minimale Volllaststundenzahl und damit der EE-Ausbaugrad variiert. Abb. 69 zeigt zusammenfassend die Elemente der Wasserstoffbereitstellungsinfrastruktur und die exemplarische Kostenkurve für Wasserstoff basierend auf Windenergie in Argentinien.

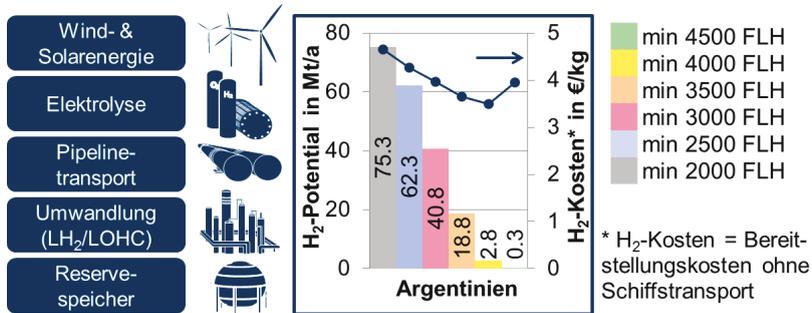


Abb. 69: Darstellung der Infrastrukturelemente und beispielhafte Bereitstellungskostenkurve für Argentinien

Auf Basis des so ermittelten Wasserstoffangebots, der damit verbundenen Bereitstellungskostenkurven und der entsprechenden Schiffstransportkosten wird ein angenommener weltweiter Wasserstoffbedarf, verteilt auf einzelne Regionen, unter der Prämisse eines globalen Versorgungskostenminimums gedeckt. Abb. 70 zeigt die Deckung eines auf den derzeitigen Pkw-Zahlen ausgewählter Importregionen basierenden Wasserstoffbedarfs. Angenommen wurde hier ein Brennstoffzellenfahrzeuganteil von 75% am Gesamtbestand. Unter Berücksichtigung des Schiffstransportes ergeben sich vorläufige Importkosten zwischen 4,34 und 4,81 €/kg, je nach Entfernung der Handelspartner.

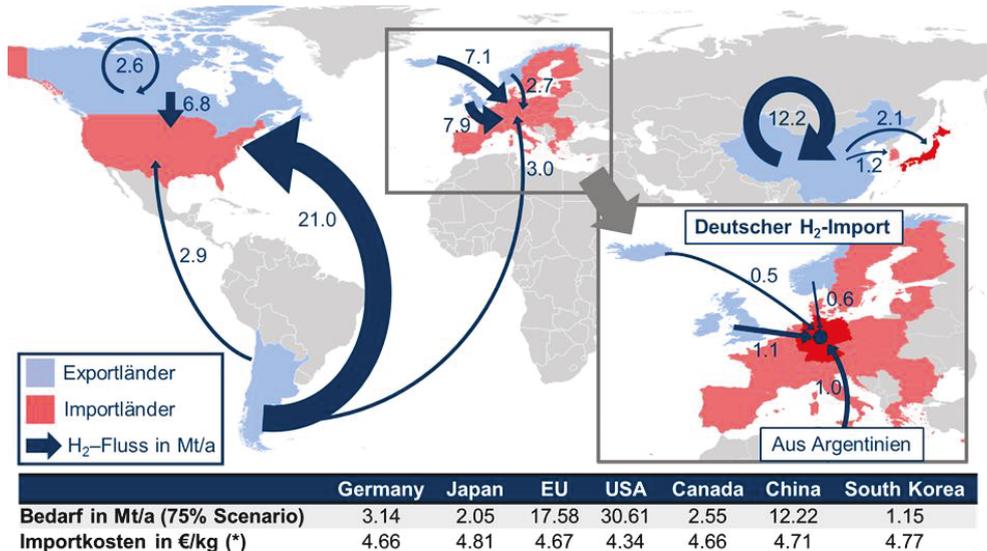


Abb. 70: Exemplarische Deckung eines regional angenommenen Wasserstoffbedarfs und zugehörige Importkosten

Das Verteilungsergebnis macht deutlich, dass der Wasserstofftransport überwiegend regionsweise (Amerika, Europa, Asien) erfolgt und dass die Importkosten stark von der globalen Nachfrage abhängen. Mit Hilfe unterschiedlicher Verteilungsschlüssel für den angenommenen, globalen Wasserstoffbedarf und unter Berücksichtigung einer geplanten Einbindung des Wasserstoffangebots aus solarer Stromproduktion kann die Option eines emissionsfreien Energieimportes für unterschiedliche Szenarien in technischer und ökonomischer Sicht weiter präzisiert werden.

3.6.2.4 Open-Source Modelle aus der Abteilung VSA

Das am IEK-3 entwickelte FINE-Python-Paket (veröffentlicht auf GitHub <https://github.com/FZJ-IEK3-VSA/FINE>, Juli 2018) ist ein Modellgenerator zur Abbildung, Optimierung und Bewertung von Energiesystemen. Mit dem Framework können Systeme mit mehreren Regionen/Standorten, Rohstoffen und Zeitschritten modelliert werden. Optimierungskriterium ist die Minimierung der jährlichen Gesamtsystemkosten unter Berücksichtigung technischer Randbedingungen und weiteren Zielkriterien wie zum Beispiel CO₂-Emissionsminderungen. Das Modell besitzt weiterhin die Option kontinuierlich aufgelöste Zeitreihen in zusammenhängende Zeitperioden zu aggregieren, um die Komplexität des Optimierungsproblems und damit auch die Rechenzeit des Modells reduziert. Der vielfältig einsetzbare Modellgenerator wird derzeit zur Optimierung von sowohl einzelnen Quartieren als nationalen und internationalen Energiesystemen inklusive deren Versorgungsinfrastrukturen eingesetzt.

Das entwickelte OpenSource Tool GLAES (Geospatial Land Availability for Energy Systems; <https://github.com/FZJ-IEK3-VSA/glaes>) können Szenario-Analysen zur Platzierung von Stromerzeugungsanlagen basierend auf erneuerbaren Energie unter Berücksichtigung von möglichen Landnutzungskriterien durchgeführt werden. Darauf aufbauend können mit weiteren Tools Potentialanalysen für Europa und weltweit durchgeführt werden. Mit dem Tool

ist es möglich unterschiedliche georeferenzierte Daten aus verschiedenen Quellen zu kombinieren und zu analysieren. GLAES ist dabei auf der Geospatial Data Abstraction Library (GDAL) aufgebaut und kann Informationen aus jedem Geodatensatz übernehmen, den GDAL interpretieren kann. Der gewählte Aufbau des Modells bietet somit ein hohes Maß an Flexibilität bei gleichzeitig konsistenter Datenaufbereitung und Anwendung.

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“
Dr. J. Linßen	3581 j.linssen@fz-juelich.de	Fachliche Verantwortung für das Arbeitsgebiet „Infrastrukturen und Sektorenkopplung“
R. Beer	85447 r.beer@fz-juelich.de	Räumliche Aggregation für die Energiesystemanalyse
D. Caglayan	5396 d.caglayan@fz-juelich.de	Europäische Gesamtlösung zur Sektorkopplung mittels Wasserstoff
S. Cerniauskas	9154 s.cerniauskas@fz-juelich.de	Einführungsstrategie für Wasserstoff Infrastruktur
T. Groß	96995 t.gross@fz-juelich.de	Infrastrukturanalyse in einem Mehr-Knoten-Energiesystemmodell
Dr. H. Heinrichs	9166 h.heinrichs@fz-juelich.de	Globale Energie- und Ressourcenströme
P. Heuser	9742 p.heuser@fz-juelich.de	Techno-ökonomische Analyse einer weltweiten Wasserstoffinfrastruktur
M. Hoffmann	85402 max.hoffmann@fz-juelich.de	Komplexitätsreduktion bei Energiesystemmodellen durch Zeitreihenaggregation
T. Kannengießler	8732 t.kannengiesser@fz-juelich.de	Kostenoptimale Versorgungssysteme für Quartiere
L. Kotzur	6689 l.kotzur@fz-juelich.de	Kostenoptimale Versorgungssysteme für Häuser
P. Kuckertz	1822 p.kuckertz@fz-juelich.de	Forschungsdatenmanagement und technische Modellkopplung
F. Kullmann	85446	Modellierung von Industrieprozessen und

	f.kullmann@fz-juelich.de	Recyclingpfaden in Deutschland
P. Lopion	1923 p.lopion@fz-juelich.de	Sektorkopplungspotentialanalysen für Deutschland
M. Reuss	9153 m.reuss@fz-juelich.de	Techno-ökonomische Analyse Wasserstoffversorgungspfade
S. Ryberg	4064 s.ryberg@fz-juelich.de	Modellierung der europäischen Residuallast bei unterschiedlichen Ausbaugraden der EE
Dr. P. Stenzel	6556 p.stenzel@fz-juelich.de	Urbane und Industrielle Energiesysteme
K. Syranidis	9156 k.syranidis@fz-juelich.de	Techno-ökonomische Analysen der Stromerzeugung und –Übertragung im europäischen Kontext
Y. Wang	3742 yu.wang@fz-juelich.de	Membranbasierte Gastrennprozesse in der Energietechnik
L. Welder	96992 l.welder@fz-juelich.de	Entwicklung eines räumlich und zeitlich hochaufgelösten Mehrknoten-Energiesystemmodells
Dr. L. Zhao	4064 l.zhao@fz-juelich.de	Membranbasierte Gastrennprozesse in der Energietechnik

3.6.4 Wichtige Veröffentlichungen, Dissertationen und Patente

Veröffentlichungen

- Robinius, M., Otto, A., Stolten, D., Heuser, P., Welder, L., Syranidis, K., Peters, R.
Linking the power and transport sectors - Part 1: The principle of sector coupling
Energies 10(7), 956 doi:10.3390/en10070956
- Reuss, M., Grube, T., Robinius, M., Preuster, P., Wasserscheid, P., Stolten, D
Seasonal storage and alternative carriers: A flexible hydrogen supply chain architecture model
Applied Energy, 200, 290 - 302. doi:10.1016/j.apenergy.2017.05.050
- Lopion, P., Markewitz, P., Robinius, M., Stolten, D.
A Review of Current Challenges and Trends in Energy Systems Modeling. Renewable & sustainable energy reviews
96, 156 - 166. doi:10.1016/j.rser.2018.07.045
- Welder, L., Ryberg, S. D., Kotzur, L., Grube, T., Robinius, M., Stolten, D.
Spatio-temporal optimization of a future energy system for power-to-hydrogen applications in Germany
Energy, 158, 1130 - 1149. doi:10.1016/j.energy.2018.05.059
- Ryberg, S. D., Robinius, M., & Stolten, D.
Evaluating Land Eligibility Constraints of Renewable Energy Sources in Europe
Energies, 11(5), 1246 -. doi:10.3390/en11051246
- Robinius, M., Raje, T., Nykamp, S., Rott, T., Müller, M., Grube, T., Stolten, D
Power-to-Gas Electrolyzers as an Alternative to Network Expansion - An Example from a Distribution System Operator
Applied Energy, 210, 182 - 197. doi:10.1016/j.apenergy.2017.10.117

Syranidis, K., Robinius, M., Stolten, D.

Control Techniques and the Modeling of Electrical Power Flow across Transmission Networks

Renewable & sustainable energy reviews, 82(3), 3452 - 3467. doi:10.1016/j.rser.2017.10.110

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

Impact of Different Time Series Aggregation Methods on Optimal Energy System Design

Renewable energy, 117, 474 - 487. doi:10.1016/j.renene.2017.10.017

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

Time Series Aggregation for Energy Systems Design: Modeling of Seasonal Storage

Applied Energy, 213, 123 - 135. doi:10.1016/j.apenergy.2018.01.023

Otto, A., Robinius, M., Grube, T., Schiebahn, S., Stolten, D., Praktiknjo, A.

Power-to-Steel: Reducing CO2 through the integration of renewable energy into the German steel industry

Energies, 10(4), 451 doi:10.3390/en10040451

Dissertationen

Kotzur, L.

Future Grid Load of the Residential Building Sector

Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt, Band 442, 2018

ISBN 978-3-95806-370-9

Wichtige Patente

Patenterteilungen:

Federführender Erfinder	PT	Bezeichnung
S. Schiebahn	1.2584	Verfahren zum Betreiben zweier Teilprozesse mit unterschiedlichen Wasserdampfanforderungen in einem Gesamtprozess
S. Schiebahn	1.2585	Verfahren zum Betreiben eines Wasserdampf benötigenden Teilprozesses in einem Gesamtprozess

3.7 Physikalisch-Chemische Grundlagen / Elektrochemie

3.7.1 Ziele und Tätigkeitsfelder

Die Abteilung „Physikalisch-Chemisches Labor“ (PCL) beschäftigt sich mit der Untersuchung grundlegender physikalisch-chemischer bzw. elektrochemischer Fragestellungen aus den Gebieten der Polymerbrennstoffzelle, der protonenleitenden nichtwässrigen Elektrolyte, der Elektroden- und Elektrolytmaterialien für Li-Batterieanwendungen und der keramischen Festoxidzellen. Neben der Redoxkinetik von Elektroden und dem ionischen Bulktransport ist der Fokus auch auf die Ionentransferkinetik über Grenzflächen zwischen verschiedenen Elektrolyten und auf Leitungsprozesse entlang dieser Grenzflächen gerichtet. Die grundlegenden Struktur-/Wirkungsbeziehungen der komplexen Vorgänge werden analysiert, um über die Optimierung der Zellauslegung, der Betriebsparameter und mit neuen Funktionsmaterialien zur Verbesserung von elektrochemischen Wandlern und Speichern beizutragen. Zum Einsatz kommen verschiedene *in-situ*- und *ex-situ* Methoden:

- Bildgebende Analysemethoden
 - Rasterelektronenmikroskopie (REM/EDX)
 - Lichtmikroskopie
 - Röntgentomographie (n-CT)
 - Rasterkraftmikroskopie (AFM)
- Materialanalytik, chemische Analytik
 - Ramanspektroskopie
 - IR-Spektroskopie / ATR
 - Röntgenbeugung (XRD), Reflektometrie (XRR)
- Thermochemische und mechanische Analysemethoden
 - Thermogravimetrie und Kalorimetrie (TGA/DSC)
 - Elastizitäts-/Dehnungsmessungen
 - Bestimmung der inneren Oberfläche (BET), Dichtemessungen (Gaspyknometer)
- Elektrochemische Analysemethoden
 - Impedanzspektroskopie (EIS)
 - Zyklovoltametrie (CV) / Zyklisierung von Batteriezellen/differentielle Kapazität
 - Mikroelektrodenmessungen / rotierende Scheibenelektrode

Die vorhandenen Methoden werden den Fragestellungen angepasst bzw. neue Methoden werden entsprechend etabliert.

3.7.2 Wichtige Arbeitsergebnisse

3.7.2.1 Ionische Flüssigkeiten als nichtwässrige protonenleitende Elektrolyte für den Einsatz in Polymermembranbrennstoffzellen (PEFC) bei Betriebstemperaturen um 120 °C

Eine Betriebstemperatur von über 100 °C würde bei einer Polymerelektrolytbrennstoffzelle (PEFC) einen wesentlich einfacheren Systemaufbau ermöglichen: i) keine Befeuchtung des Brenngases bzw. der zugeführten Luft und damit keine Wasserzyklisierung, ii) ein effizienteres Kühlsystem, bzw. die Gewinnung nutzbarer Abwärme und ii) eine höhere Toleranz gegenüber Brenngas- und Luftverunreinigungen. Derzeit können (Hochtemperatur-) HT-PEFCs, basierend auf phosphorsäuredotierten Polybenzimidazolmembranen (PBI) und geeignet für Betriebstemperaturen zwischen 160 – 180 °C, nicht mit der Leistungsdichte von PEFCs auf NAFION®-Basis mithalten. Die Anwesenheit von H₃PO₄ hemmt die kathodische Sauerstoffreduktionsreaktion (ORR). Es besteht daher ein Bedarf an neuen nichtwässrigen protonenleitenden Elektrolyten, die einen Brennstoffzellenbetrieb im Temperaturbereich zwischen 100 – 120 °C zulassen. Protonenleitende ionische Flüssigkeiten (PIL) mit sauren Kationen sind vielversprechende Kandidaten für die künftige Verwendung als nichtwässrige Elektrolyte bei Betriebstemperaturen über 100 °C.

Elektrodenkinetik PIL/Wasser

Alle für die Brennstoffzelle relevanten elektrochemischen Prozesse finden in der Grenzfläche des (Platin)-Katalysators mit dem Elektrolyten, wie z.B. einer ionischen Flüssigkeit, statt. Die Kenntnis der Struktur und Eigenschaften dieser sogenannten „elektrolytischen Doppelschicht“ beeinflusst die elektrochemischen Reaktionen und ist daher für die Optimierung dieser Prozesse von entscheidender Bedeutung. Selbst bei 120 °C ist während des Brennstoffzellenbetriebs eine ausgeprägte Restwasseraktivität vorhanden, so dass dieser als wichtiger Einflussparameter zu berücksichtigen ist. Der Wassergehalt in einer HT-PEFC steigt mit der Betriebsstromdichte und mit sinkender Temperatur.

In einer ersten Arbeit wurden die Doppelschichteigenschaften der Grenzfläche Platin/2-Sulfoethylmethylammonium triflat ([2-Sema][TfO]) mit Hilfe von Impedanzspektroskopie (EIS) untersucht und die Ergebnisse publiziert.²⁷ Neben dem Elektrodenpotential und der Temperatur lag der Schwerpunkt dieser Arbeit im Einfluss des Wassergehalts (0,7 – 6,1 Gew%) in der ionischen Flüssigkeit auf die Doppelschichtkapazität. Er ist ein wichtiger Parameter, da Wasser in seiner protonierten Form als Protonenquelle für Elektrodenprozesse wie die Sauerstoffreduktion und die Wasserstoffunterpotentialabscheidung (H_{UPD}) fungiert und diese wesentlich beschleunigt. Außerdem ist Wasser essentiell für die Bildung von Platinhydroxiden und -oxiden, was wiederum die Doppelschichteigenschaften und die Elektrodenprozesse beeinflusst.

²⁷ K. Wippermann, J. Giffin, S. Kuhri, W. Lehnert und C. Korte, Phys. Chem. Chem. Phys. 19 (2017) 24706 24723

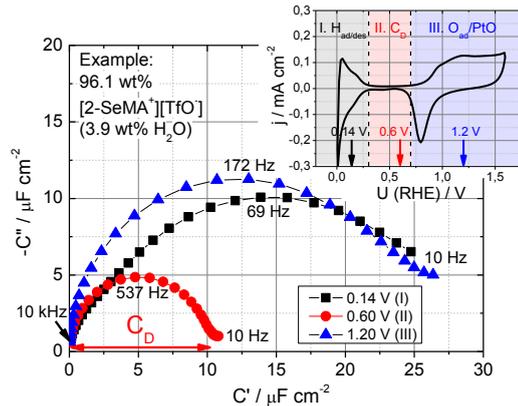


Abb. 71: Impedanzspektren in der Darstellung als komplexe Kapazität bei 3 Potentialen in 3 Potentialregionen: I. $H_{ad/des}$, II. Doppelschichtbereich, III. Platinoxidbildung.

Die Auswertung der Impedanzspektren aus Abb. 71 in Form von komplexen Impedanzen ergab folgende wichtige Ergebnisse: (i) es treten bis zu vier kapazitive Prozesse im gesamten Frequenzbereich der Spektren auf, (ii) die Doppelschichtkapazität der hochfrequenten (schnellen) Prozesse steigen mit dem Wassergehalt an und sind mit der stärkeren Adsorption von Wasser auf der Platinoberfläche zu erklären, (iii) die hochfrequenten Kapazitäten lassen sich mit dem Ionentransport in der Doppelschicht, die niederfrequenten Kapazitäten als Pseudokapazitäten mit elektrochemischen Prozessen assoziieren.

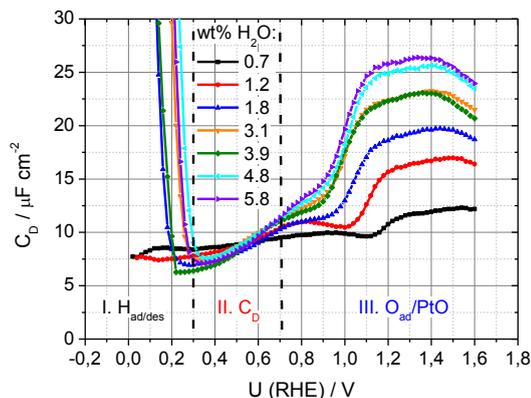


Abb. 72: Differentielle Doppelchichtkapazität in der Grenzfläche Platin/2-Sema][TfO] bei verschiedenen Wassergehalten.

Die Konstanthaltung der Wassergehalte der ionischen Flüssigkeiten bei elektrochemischen Experimenten über einen längeren Zeitraum ist schwierig, da meist offene, gasdurchströmte Systeme vorliegen. Umso wichtiger ist es, den Wassergehalt über die Dauer eines Experiments möglichst exakt zu bestimmen. In einer weiteren, publizierten Arbeit wurden vier elektrochemische Methoden am Beispiel zweier ionischer Flüssigkeiten mit sehr

unterschiedlichen aziden und hygroskopischen Eigenschaften, d.h. [2-Sema][TfO] und Diethylmethylammonium triflat ([Dema][TfO]), getestet.²⁸ Bei den Methoden handelt es sich um Leitfähigkeitsmessungen, Wasserstoffunterpotentialabscheidung, Platinoxidreduktion und Startpotential der Platinoxidation. Die gemessenen Parameter, also die spezifische Leitfähigkeit, die H_{UPD} - und Reduktionsladungen sowie das Startpotential wurden in Abhängigkeit vom Wassergehalt aufgetragen und Eichkurven erstellt (siehe Abb. 72).

Es ergab sich im Vergleich der vier Methoden, dass die Messung der spezifischen Leitfähigkeit die exakteste und einfachste Methode ist. Außerdem ist sie als Referenzmethode wichtig, da sie sich unter weitgehend abgeschlossenen Bedingungen ohne Gasspülung durchführen lässt. Allerdings ist sie bei kleinen Wassergehalten ungeeignet, da hier die Leitfähigkeit fast konstant ist. Bei diesen Bedingungen ist die Platinoxidreduktionsladung die Methode der Wahl, da sie auch auf Änderungen bei geringen Wassergehalten empfindlich ist. Mit einer Kombination dieser und anderer Methoden lässt sich die Genauigkeit weiter steigern.

Im Vergleich der beiden untersuchten ILs zeigte die wenig azide PIL, [DEMA][TfO], bei kleinen Wassergehalten erheblich kleinere Reduktionsladungen und damit auch eine geringere Genauigkeit in der Wasserbestimmung. Die Präzision der Bestimmung des Wassergehalts hängt also auch von der Art der PIL ab. Beiden PILs gemeinsam ist, dass die Extrapolation der H_{UPD} -Ladungen auf einen Wassergehalt gleich Null ebenso nur sehr kleine Ladungen nahe Null ergeben. Dieses Ergebnis ist wichtig, denn es zeigt, dass PILs unabhängig von ihrer Azidität bei Abwesenheit von Wasser als Protonenquelle bei elektrochemischen Reaktionen nur eine untergeordnete Rolle spielen. Dagegen scheinen bereits kleine Anteile von Wasser bzw. nach der Protolyse H_3O^+ elektrochemische Prozesse deutlich zu beschleunigen.

Es wurden außerdem zwei Teststände für elektrochemische Messungen mit Mikroelektroden aufgebaut. Mit Hilfe der Mikroelektroden lassen sich sowohl Bulkeigenschaften der ILs, wie zum Beispiel der Diffusionskoeffizient und die Löslichkeit von Gasen wie Sauerstoff bestimmen, aber auch die Kinetiken und Mechanismen elektrochemischer Prozesse wie zum Beispiel der Sauerstoffreduktionsreaktion untersuchen.

Wechselwirkung PIL/ionogene Polymere

Neben den elektrochemischen Verhalten ist auch die Untersuchung der (Protonen-)leitfähigkeit, der Ladungstransportmechanismen und der intermolekularen Wechselwirkung mit einem Wirtspolymer von großer Bedeutung. Zur Verwendung als Elektrolyt in einer PEFC muss die PIL in einer geeigneten Polymermatrix immobilisiert werden.

Verschieden azide PILs, jeweils basierend auf dem Triflatanion, sind bezüglich ihrer Leitfähigkeit und deren Abhängigkeit vom Wassergehalt untersucht worden. Ausgewählt wurden [DEMA][TfO], 1-Ethylimidazolium triflat [1-Elm][TfO] und [2-SEMA][TfO], deren Kationenazidität sich um viele Größenordnungen unterscheidet (pK_A -Werte von -1, 7 und 10). In dieser Reihe überspannt die im Protolysegleichgewicht mit Wasser auftretende Konzentration von H_3O^+ mehrere Dekaden, d.h. von nahezu neutral für [DEMA][TfO] bis hin zu stark sauer für [2-SEMA][TfO].

²⁸ K. Wippermann, J. Giffin und C. Korte, J. Electrochem. Soc. 165(5) (2018) H263-H270

Die Leitfähigkeit von [2-SEMA][TfO] zeigt im Vergleich die stärkste Zunahme mit dem Wassergehalt (Abb. 73 und Abb. 74). Die dazugehörige Protolyse- und Austauschprozesse wurden zusätzlich mittels Raman- und $^1\text{H-NMR}$ -Spektroskopie (speziell DOSY) untersucht. Im Falle von [2-SEMA][TfO] findet man einen Übergang von einem reinen Vehikelmechanismus für den wasserarmen Zustand zu einem kooperativem Mechanismus mit schnellem Protonenaustausch mit zunehmendem Wassergehalt. Bei den wenig aziden PILs geht die Leitfähigkeitszunahme mit steigendem Wassergehalt überwiegend mit einer Absenkung der Viskosität einher. Das azide Proton bleibt am Kation lokalisiert.

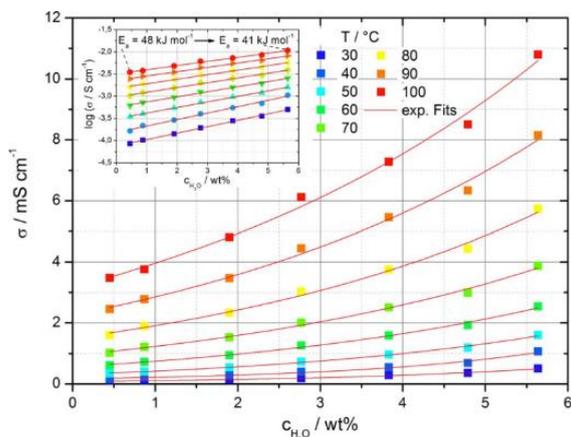


Abb. 73: (Gesamt-)leitfähigkeit von [2-SEMA][TfO] als Funktion des Wassergehalts und der Temperatur

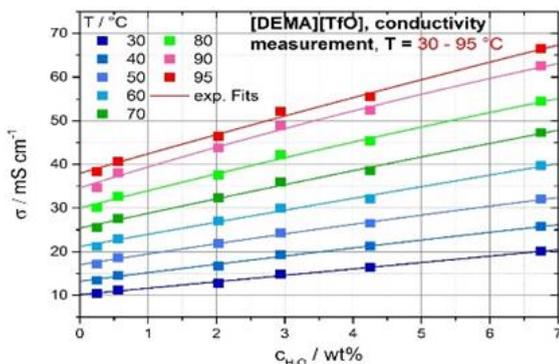


Abb. 74: (Gesamt-)leitfähigkeit von [DEMA][TfO] als Funktion des Wassergehalts und der Temperatur

Ein weiterer Aspekt ist die Immobilisierung/Absorption der PIL in eine Polymermatrix zur Nutzung als Membranelektrolyt in einer Brennstoffzelle. Hierbei wurde eine langsame Aufnahme von [SEMA][TfO] in *m*-PBI festgestellt. Der gemessene Diffusionskoeffizient von etwa $4,4 \cdot 10^{-11} \text{ cm s}^{-1}$ ist etwa drei Größenordnungen kleiner als bei Phosphorsäure. Ebenso ist der molare Dotierungsgrad (PIL-Formeleinheiten je Polymerwiederholeinheit) mit ca. 135% eher klein. Es laufen daher Untersuchungen zu alternativen Membranherstellungsverfahren wie Solution casting um höhere Dotierungsgrade und somit auch höhere

Leitfähigkeitsdaten zu erreichen, bzw. zu alternativen Membranmaterialien wie sPEEK (sulfonylierte Polyetheretherketone).

3.7.2.2 Operando-Ramanspektroskopie zur Untersuchung der Degradationsphänomene von Hochvoltkathodenmaterialien in Lithiumakkumulatoren

Aufgrund der wachsenden Bedeutung von Elektromobilität und den erforderlichen Reichweiten rücken Hochvoltkathodenmaterialien, die Zellspannungen von über 4,5 V (gegen Li) ermöglichen und den sich daraus ergebenden hohen Leistungsdichten, zunehmend in den Fokus. Ein vielversprechender Kandidat ist $\text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_4$ (LNMO) mit einem Redoxpotential von 4,75 V (gegen Li). Im Vergleich zu den z.Z. üblichen Kathodenmaterialien wie LiCoO_2 oder LiFePO_4 ist die Energiedichte von LNMO um 20-30% höher. LNMO kristallisiert in zwei verschiedenen kubischen Kristallstrukturen. Die Ni und Mn-Ionen befinden sich auf einer oktaedrisch koordinierten Gitterposition, die Li-Ionen auf tetraedrisch koordinierten und Zwischengitterpositionen und die Oxidionen sind kubisch dichtest gepackt. Im Falle einer statistischen Verteilung der Ni und Mn-Ionen liegt ein Spinelltyp (Fd-3m) und im Falle einer geordneten Anordnung von Ni und Mn-Ionen liegt ein LiFe_5O_8 -Typ vor (P4₃32).

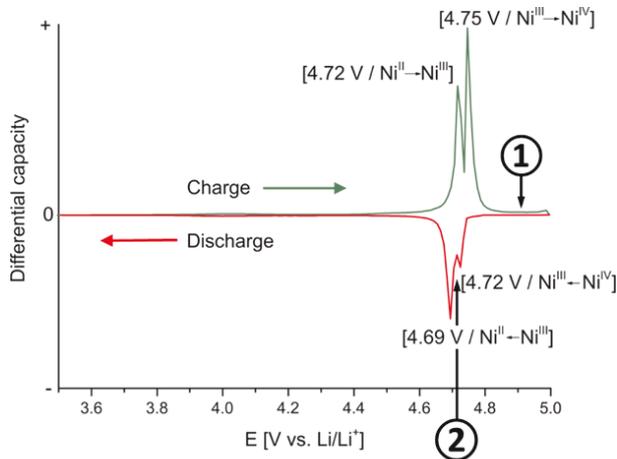


Abb. 75: Differentielle Kapazität einer Halbzelle mit o-LNMO-Kathode (Li-Anode). Die ramanspektroskopisch detektierte Umwandlung von $\text{Li}_{0,5}\text{Ni}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_4$ nach $\text{Ni}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_4$ ist mit einer ① und einer ② markiert (siehe auch Abb. yy).

Das elektrochemische Stabilitätsfenster herkömmlicher Elektrolyte auf der Basis von Alkylcarbonaten liegt zwischen 0,7 und 4,4 V (gegen Li). Auf der Li/Graphitinterkalationsanode bildet sich daher durch Reduktion des Elektrolyten eine Oberflächenschicht (SEI). Diese Anoden-SEI verhindert den weiteren Abbau, da sie die Oberfläche deckend überzieht aber für Li-Ionen leitfähig ist. Mit einem Redoxpotential von annähernd 5 V überschreiten Hochvoltkathodenmaterialien allerdings auch die Stabilität des Elektrolyten gegen Oxidation. Mit Hochvoltkathodenmaterialien lassen sich z.Z. noch keine Zellen konstruieren die eine für technische Anwendungen ausreichende Zyklenfestigkeit besitzen. Das Redoxpotential von LNMO bei 4,75 V im delithiierten (d.h. geladenen Zustand) führt wahrscheinlich zu schnellen oxidativen Degradationsprozessen zwischen Kathode und Elektrolyt. Die mögliche Bildung einer Degradationsschicht, deren Zusammensetzung, Stabilität, Porosität und Dicke im Ver-

gleich zur bekannten Anoden-SEI sowie eine mögliche irreversible Zersetzung des Kathodenmaterials sind noch nicht abschließend geklärt. Nur ein genaues Verständnis dieser Prozesse ermöglicht eine substantielle Verbesserung Zyklenfestigkeit von Zellen mit Hochvoltkathodenmaterialien.

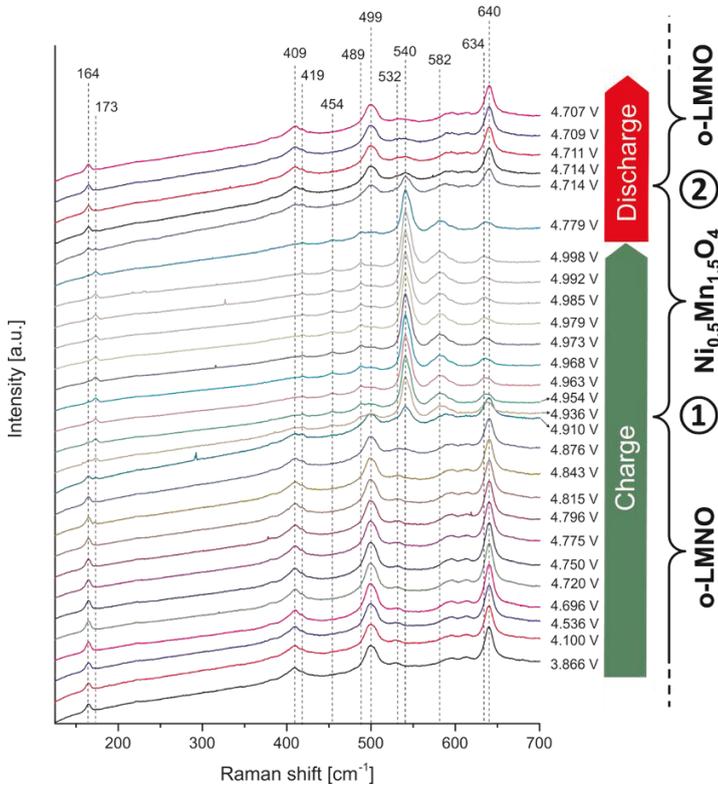


Abb. 76: Nach dem Zellpotential gestaffelte Ramanspektren einer Halbzelle mit einer o-LNMO-Kathode (Li-Anode). Die ramanspektroskopisch detektierte Umwandlung von $\text{Li}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ nach $\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ ist mit einer 1 und einer 2 markiert (siehe auch Abb. xx).

Zur Untersuchung dieser Degradationsphänomene sind daher *operando*-Ramanuntersuchungen an Vollzellen mit $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -Anode und Halbzellen mit Li-Anode durchgeführt worden. Insbesondere wurde auch das Zyklierungsverhalten bezüglich Anoden- und Kathodenkapazität unterschiedlich balancierter Vollzellen untersucht.²⁹ Die erhaltenen Ramanspektren enthalten Informationen über das Kathodenmaterial und der Elektrolytphase. Die während des Zyklierens auftretenden Materialveränderungen können auf diese Weise mit elektrochemischen Messungen korreliert werden (Abb. 75 und Abb. 76).

Es sind Untersuchungen mit Kathoden aus der geordneten LNMO-Phase (o-LMNO) und der ungeordneten durchgeführt worden (d-LNMO). Die Phasenwechsel zwischen der volllithiierten Phase ($\text{Li}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$), der halblithiierten ($\text{Li}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$) und der (nahezu) vollständig delithiierten Phase ($\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$, $\lambda\text{-MnO}_2$ -Typ) lassen sich ramanspektroskopisch gut unter-

²⁹ P. Jehnichen, K. Wedlich und C. Korte, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20(1)** (2019) 1-9

scheiden. Auffällig ist, dass die ramanspektroskopisch detektierte Phasenumwandlung gegenüber der elektrochemisch detektierten bei höheren Zellpotentialen (d.h. verzögert) auftritt (siehe Markierung ① in Abb. 75 und Abb. 76). Die Phasenumwandlungen bei der Delithierung (Laden) schreiten in der Kathode offenbar vom Stromableiter hin zur Oberflächen fort, wo sie ramanspektroskopisch detektiert werden können. Ähnliche Beobachtungen findet man in der Literatur in *operando*-XRD-Studien. Die Phasenumwandlungen beim Lithieren (Entladen) zeigen keine derartig auffällige Verzögerung (siehe Markierung ② in Abb. 75 und Abb. 76).

Nach ca. 300 Zyklen sind die *operando*-Halbzellen aufgrund der Degradationsprozesse nicht mehr zyklisierbar. Das Kathodenmaterial bleibt im delithierten Zustand. Es treten neben den Signalen des Kathodenmaterials und des Elektrolyten neue Ramansignale auf. Diese lassen sich entsprechend ihrer Lage auf die Bildung von (offenkettigen) Estern und Ketonen zurückführen. Die Ramansignale vom Ethylencarbonat schwächen relativ zu den Signalen vom Dimethylcarbonat stark ab (Bestandteile von LP30). Die Intensität des Signals vom PF_6^- -Anion sinkt unter die Detektionsgrenze. SEM-Untersuchungen zeigen keine kompakte Deckschicht auf der Oberfläche. Es finden sich Ablagerungen von Degradationsprodukten auch auf dem Separator zwischen Anode und Kathode.

Das Lösungsmittel LP30 wird oxidativ an der geladenen Kathode bei Potentialen oberhalb 4,5 V zersetzt. Ethylencarbonat wird offenbar bevorzugt verbraucht. Bei dem Prozess werden auch die im Elektrolyten als LiPF_6 gelösten Li-Ionen immobilisiert und sind so nicht mehr für die Zyklisierung der Zelle verfügbar. Das Kathodenmaterial kann nicht mehr re-lithiert werden, die Kapazität bricht ein. Li-Ionen und PF_6^- werden in schwerlöslichen Verbindungen eingebaut oder zersetzen sich. Die Degradationsprodukte des Elektrolyten bilden keine kompakte Deckschicht auf der Kathode, bzw. sie löst sich von der Kathode ab (Nachweis auf dem Separator). Die irreversible Zersetzung des Kathodenmaterials findet auch statt. Mn und Ni können auch auf der Anode nachgewiesen werden. Sie ist aber nicht der limitierende Prozess für die starke Degradation der Zelle.

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, XRD, n-CT
Dr. J. Giffin	6228 j.giffin@fz-juelich.de	Physikalische Eigenschaften: DSC, TGA, mechanische Eigenschaften, Leitfähigkeit
Fr. H. Hou	85360 h.hou@fz-juelich.de	Elektrochemische und physikalische Charakterisierung neuer PILs (HIFIPEFC)
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 Raster- elektronen- und Lichtmikroskopie,
Fr. J. Lin	9804 j.lin@fz-juelich.de	Leitungsmechanismus in PILs, Wechselwirkung von PILs mit iono- genen/polaren Polymeren
Dr. Chr. Rodenbücher	6142 c.rodenbuecher@fz-juelich.de	Physikalische Untersuchungen von Grenzflächen: XRD, n-CT, Spektroskopie (Raman/IR), Rasterkraftmikroskopie (AFM)
J. Sanarov	85356 j.sanarov@fz-juelich.de	Bau und Test von PEFCs mit neuen Membranmaterialien, PIL/Polymer und POLY-ILs (HIFIPEFC)
Y. Suo	1579 y.suo@fz-juelich.de	Grundlegende Untersuchung der Redoxkinetik (ORR, HUPD, PtOx) von PILs
Dr. K. Wippermann	2572 k.wippermann@fz-juelich.de	Elektrochemische Untersuchungen: Doppelschichtverhalten, elektrochemische Kinetik, ortsaufgelöste Messungen, Alterungsprozesse
T. Wekking	1891 t.wekking@fz-juelich.de	Ladungstransfer zwischen Li- Festelektrolyten und flüssigen Li- Elektrolyten

3.7.4 Wichtige Veröffentlichungen und Patente

Veröffentlichungen

M. Schleutker, J. Bahner, C.-L. Tsai, D. Stolten und C. Korte

On the interfacial charge transfer between solid and liquid Li⁺ electrolytes

Phys. Chem. Chem. Phys. **19** (2017) 26596-26605

K. Wippermann, J. Giffin, S. Kuhri, W. Lehnert und C. Korte

The influence of water content in a proton-conducting ionic liquid on the double layer properties of the Pt/PIL interface

Phys. Chem. Chem. Phys. **19** (2017) 24706-24723

J. Keppner, J. Schubert, M. Ziegner, B. Mogwitz, J. Janek und C. Korte

Influence of texture and grain misorientation on the ionic conduction in multilayered solid electrolytes – interface strain effects in competition with blocking grain boundaries

Phys. Chem. Chem. Phys. **20** (2018) 9269-9280

K. Wippermann, J. Giffin und C. Korte

In Situ Determination of the Water Content of Ionic Liquids

J. Electrochem. Soc. **165**(5) (2018) H263-H270

P. Jehnichen, K. Wedlich und C. Korte

Degradation of high-voltage cathodes for advanced lithium-ion batteries – differential

capacity study on differently balanced cells

Sci. Technol. Adv. Mater. **20(1)** (2019) 1-9

Wichtige Patente

Patenterteilungen:

T. Bergholz

1.2660

Elektrolytsystem für den Einsatz in elektrochemischen Bauteilen





4

Highlights

Besondere Ergebnisse

- Jülicher Hochtemperatur-Brennstoffzelle besteht Langzeitversuch seit mehr als zehn Jahren
- Reduktion der Edelmetallbeladung
- Infrastrukturstudie

4.1 Jülicher Hochtemperatur-Brennstoffzelle besteht Langzeitversuch seit mehr als zehn Jahren

Wie bereits berichtet, wurde im Oktober 2015 ein Weltrekord für einen SOFC-Langzeittest erreicht. Ein Short-Stack erreichte eine Betriebszeit von 70.000 Stunden unter Last. In der Zwischenzeit hat dieser Stack eine Betriebsdauer von 11,5 Jahren erreicht, wobei er 93.138 Betriebsstunden unter Last mit einer Gesamtspannungsalterung von 0,5 %/kh betrieben wurde (siehe Abb. 77). Die Zunahme der ASR während der ersten 40.000 Stunden betrug etwa $16 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2/\text{kh}$ (3,7 %/kh). In den folgenden 50.000 Stunden hat sich die ASR-Anstiegsrate auf etwa $3 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2/\text{kh}$ (0,3 %/kh) verringert. Wegen eines Fehlers in der Testeinrichtung wurde der Stack die letzten sechs Monate im Wesentlichen im Leerlauf betrieben (mit regelmäßigen Impedanzmessungen). Nach Erreichen von 100.000 Stunden auf Betriebstemperatur wurde der Stack im Januar 2019 abgeschaltet und wird anschließend intensiv nachuntersucht.

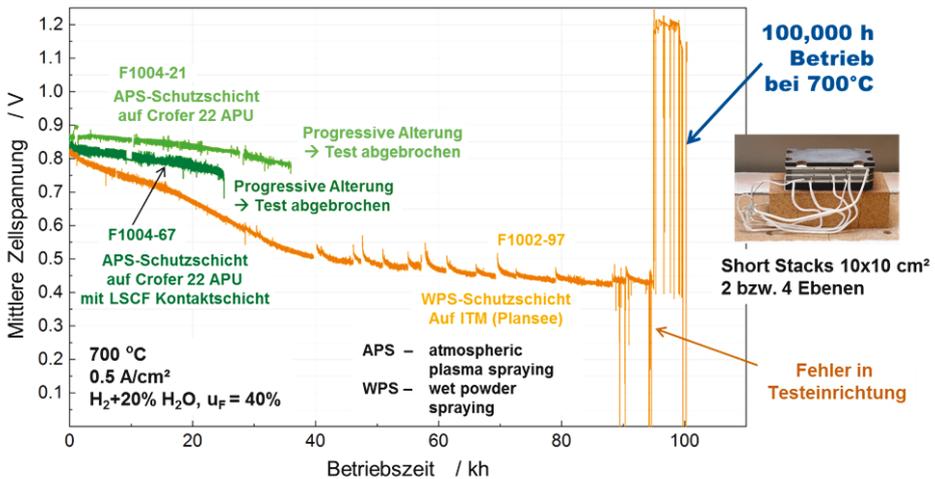


Abb. 77: Langzeitbetrieb des 2-Ebenen Short Stacks F1002-97 und des 4-Ebenen Short Stacks F1004-67

Ein zweiter Short Stack (F1004-21) mit einer verbesserten Chromschutzschicht musste nach 34.500 Betriebsstunden aufgrund eines plötzlichen und unerwartet starken Abfalls der Spannung einer Ebene heruntergefahren werden. Eine Analyse nach dem Test ergab, dass die Mn-Diffusion von der Kontaktschicht zur Anode den Elektrolyten zerstört hatte.

Ein weiterer Short Stack (F1004-67) ohne Mn in der Kontaktschicht zeigte bis 23.500 Betriebsstunden eine mittlere Spannungsabnahme von 0,25 %/kh, was einer ASR-Zunahme von etwa $5 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2/\text{kh}$ (1,2%) entspricht. Nach ca. 25.000 trat auch hier eine plötzliche Spannungsabnahme in einer Ebene auf, weshalb der Stack vorzeitig abgeschaltet werden musste. Erste Nachuntersuchungsergebnisse deuten darauf hin, dass auch in diesem Fall Mn an der Anodengrenzschicht zum Elektrolyten das Problem war. In diesem Fall scheint das Mn allerdings aus der Oxidschicht des Stahls auf der Anodenseite zu kommen. Hier sind noch weitere Analysen notwendig.

4.2 Reduktion der Edelmetallbeladung

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. 78 dargestellt.

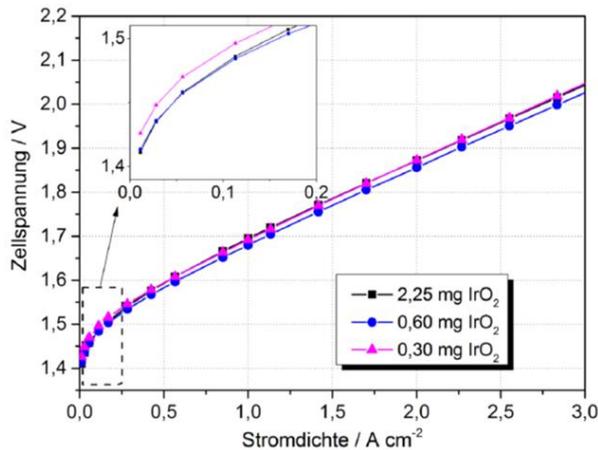


Abb. 78: Langzeitbetrieb des 2-Ebenen Short Stacks F1002-97 und des 4-Ebenen Short Stacks F1004-67

Ein Vergleich der Polarisationskurven der drei unterschiedlichen Beladungen in Abb. 78 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 $U_{j0,01}$ 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 84 GW an PEM-Elektrolyseleistung von 117 auf 14 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 des neuen Katalysators Kat. A. Die Literatur zeigt ebenfalls, dass die Iridiumbeladung der Anode nur einen geringen Einfluss auf die Polarisationskurve der CCMs aufweist.

Langzeitstabilität unter reduzierter Anodenbeladung

Die Zellen mit Anodenbeladungen von $0,6$ und $0,3 \text{ A/cm}^2$ wurden über einen Zeitraum von 1077 h bei $80 \text{ }^\circ\text{C}$ und 2 A/cm^2 betrieben. Dabei wurden die Einzelpotentiale mithilfe einer Nafionbrücke gemessen. Die Zeitverläufe der Zellspannung, sowie der Einzelpotentiale von Anode (rot) und von Kathode (grün) sind für die CCM mit $0,6 \text{ mg/cm}^2$ in Abb. 79 dargestellt. Zusätzlich sind die Zellspannungen U_{j2} aus der Polarisationskurve mit grauen Dreiecken eingezeichnet.

Bei der Zelle mit einer Anodenbeladung von $0,6 \text{ mg/cm}^2$ in Abb. 79 liegt die Zellspannung bei 1077 h nur um 3 mV höher als zu Beginn des Tests bei 0 h . Es sind jedoch Perioden mit abfallender und mit ansteigender Zellspannung unterscheidbar, sodass eine Mittelung der

Alterungsraten keinen Aufschluss über die stattfindende Spannungsveränderung zulässt. Die vorgestellte Zelle mit Standardbelastung wird deswegen auch hier eine Unterteilung des Testzeitraums in Teilbereiche vorgenommen. Es werden zwei Teilbereiche definiert. Die Zeitspanne von 0 bis 74 h wird als Einfahrzeit mit Bereich (0) bezeichnet und die restliche Versuchsdauer zwischen 74 h und 1077 h wird als Bereich (I) bezeichnet.

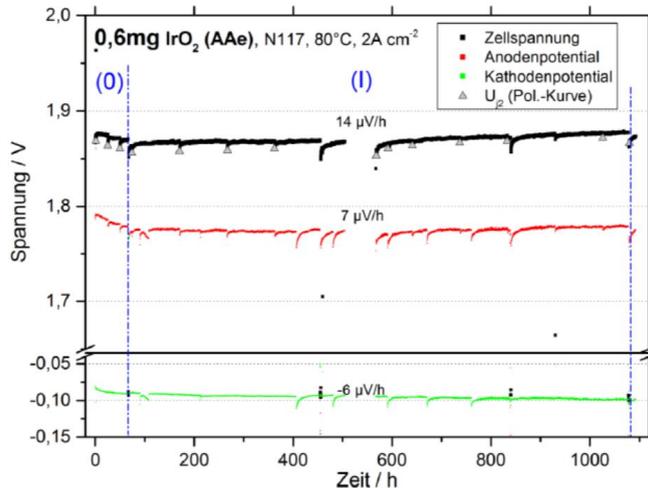


Abb. 79: Reduzierte Anodenbelastung mit 0,6 mg/cm² IrO₂ (AAe). Zellspannung und Einzelpotentiale im Zeitverlauf.

Die Zellspannung fällt zunächst in Bereich (0) ab und steigt danach im Verlauf des Bereichs (I) mit einer Rate von 14 $\mu\text{V/h}$ an. Die Einzelpotentiale, die an den Bipolarplatten abgegriffen werden, verändern sich ebenfalls. Das anodische Potential steigt mit einer Rate von 7 $\mu\text{V/h}$, während Potential der kathodischen Bipolarplatte um 6 $\mu\text{V/h}$ fällt. Durch die Einzelpotentialmessung ist erkennbar, dass sich die Überspannungen der Kathoden- und der Anodenseite etwa gleichermaßen erhöhen. Die Zellspannung U_{j2} , die bei der Referenzstromdichte von 2 A/cm² aus der Polarisationskurve ermittelt wurde, zeigt einen vergleichbaren Zeitverlauf wie die Zellspannung im Langzeitexperiment. Während die Zellspannung im Langzeitexperiment in Bereich (I) um insgesamt 15 mV steigt, zeigt die Polarisationskurve einen Anstieg der Zellspannung U_{j2} um 13 mV. Sie kann daher für die Bewertung der Zelleistung herangezogen werden. U_{j2} ist dabei etwa 8 mV kleiner als die Spannung im Langzeittest. Der Verlauf der Zellspannung bei der Anodenbelastung von 0,3 mg/cm² ist in Abb. 80 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.

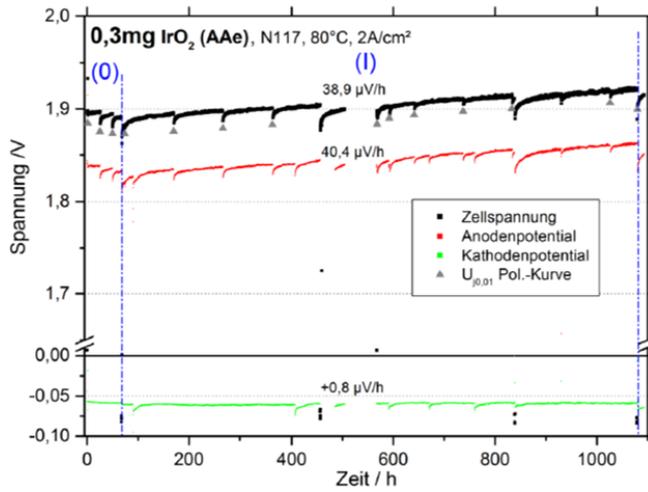


Abb. 80: Reduzierte Anodenbeladung mit 0,3 mg/cm² IrO₂ (AAe). Zellspannung und Einzelpotentiale im Zeitverlauf.

4.3 Infrastrukturstudie

Elektrische Antriebe sind der Schlüssel zu einem klimafreundlichen Verkehr basierend auf erneuerbaren Energien. Die lokale Emissionsfreiheit des Verkehrs ist eine weitere wichtige Voraussetzung, um zukünftig die Lebensqualität vor allem in Ballungszentren erheblich zu verbessern. Sowohl Batterie- als auch Brennstoffzellen-Fahrzeuge erfüllen diese wichtigen Kriterien. Für beide Technologiepfade sind jedoch neue Infrastrukturkonzepte notwendig.

Zielsetzung und Vorgehen

Zielsetzung der Analyse war eine detaillierte Auslegung und Untersuchung der notwendigen Infrastrukturen für unterschiedliche Marktdurchdringungen von batterieelektrischen Fahrzeugen sowie von Wasserstoff-Brennstoffzellen-Elektrofahrzeugen in Deutschland. Die Studie beantwortet die Fragen, wie hoch die Investitionen, Kosten, Wirkungsgrade und Emissionen der jeweiligen Infrastrukturen zur Versorgung von einigen Hunderttausend bis hin zu mehreren Millionen Fahrzeugen mit Strom oder Wasserstoff sind. Aktuell stehen beide Technologien noch am Anfang ihrer Marktentwicklung und die Auslegung sowie Anpassung der benötigten Infrastruktur an die jeweilige Marktdurchdringung der Fahrzeuge ist unklar. Weiterhin müssen die Infrastrukturen auch Optionen zur Integration von Strom-Überschüssen bieten, welche zukünftig in von erneuerbaren Energien dominierten Energiesystemen entstehen werden. Die vorliegende Studie beinhaltet eine detaillierte Auslegung der Infrastrukturen und deren Komponenten (siehe Abb. 81) unter Offenlegung der getroffenen Annahmen. Hierdurch wird eine transparente Faktengrundlage geschaffen, die mit neuen Erfahrungswerten angepasst werden kann und eine faktenbasierte Diskussion ermöglicht.

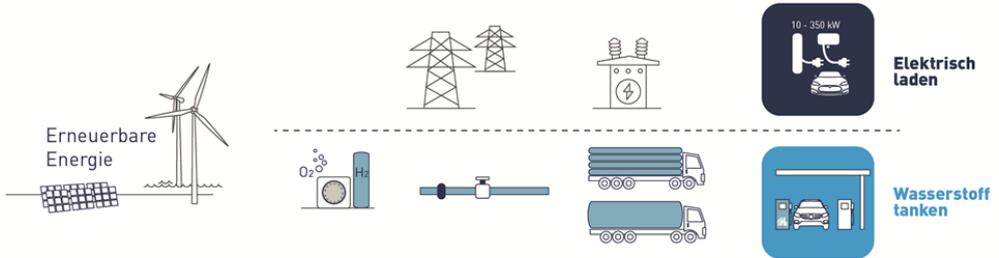


Abb. 81: Schematische Darstellung der untersuchten Versorgungsinfrastrukturen.

Wichtiger Bestandteil der Studie ist eine umfangreiche Meta-Analyse von bestehenden Studien mit Aussagen zum Infrastrukturausbau beider Technologien. Basierend auf der Erkenntnis, dass vor allem für eine hohe Marktdurchdringung die existierenden Studien nicht ausreichen und die Datenlage teilweise intransparent ist, werden detaillierte eigene Szenario-Berechnungen zur Infrastrukturauslegung durchgeführt und techno-ökonomisch analysiert.

Ergebnisse

Die Analyse der Szenarien zeigt, dass die Investitionen in den Infrastrukturausbau für beide Technologiepfade bei geringen Fahrzeugbeständen bis hin zu einigen Hunderttausend nahezu gleich sind. In der Übergangsphase erfolgt die Umstellung der Wasserstoff-erzeugung auf die ausschließliche Nutzung von regenerativem Überschuss-Strom, welche

durch den Bau von saisonalen Wasserstoffspeichern zur Überbrückung von 60 Tagen flankiert wird. Das Konzept ermöglicht die Versorgung mit grünem Wasserstoff. In der Anfangsphase sind hierfür höhere Investitionen erforderlich als bei der Ladeinfrastruktur. Für das Laden der Batterie-Fahrzeuge ist in der Studie keine saisonale Stromspeicherung in der Stromversorgung berücksichtigt, die für eine sichere Versorgung mit 100 % erneuerbarem Strom notwendig wäre. Vergleicht man die kumulierten Investitionen beider Konzepte für eine hohe Marktdurchdringung von 20 Mio. Fahrzeugen, liegen die Investitionen für eine Ladeinfrastruktur mit rund 51 Mrd. € deutlich höher im Vergleich zur Wasserstoff-Infrastruktur mit rund 40 Mrd. € (siehe Abb. 82)

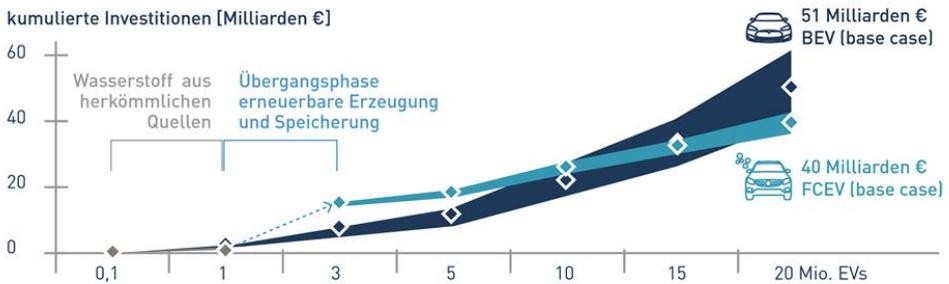


Abb. 82: Vergleich der kumulierten Investitionen für den notwendigen Infrastrukturaufbau.

Die resultierenden Kilometer-spezifischen Kosten sind bei hohen Marktdurchdringungen für beide Versorgungskonzepte annähernd gleich. Sie liegen im Durchschnitt bei 4,5 €/ct/km für das elektrische Laden und bei 4,6 €/ct/km für den Wasserstoff. Da die elektrische Erzeugung und Speicherung des Wasserstoffs die Nutzung von sonst nicht nutzbarem erneuerbarem Strom direkt vor Ort ermöglicht, wird die geringere energetische Effizienz des Wasserstoff-Pfades annähernd durch die niedrigeren Kosten des Überschuss-Strombezugs ausgeglichen.



Abb. 83: Vergleich der Kilometer abhängigen CO₂-Emissionen und Strombedarfe bei 20 Millionen Fahrzeugen.

Für das Szenario mit 20 Millionen Brennstoffzellen-Fahrzeugen werden 87 TWh Überschuss-Strom für die Elektrolyse und zusätzlich 6 TWh Strom aus dem Netz (Transport und Verteilung des Wasserstoffs) benötigt. Das Laden von 20 Millionen Batterie-Fahrzeugen erfordert 46 TWh Strombezug aus dem Verteilnetz. Die Effizienz der Ladeinfrastruktur und Fahrzeuge ist höher, aber die Flexibilität der Stromnachfrage ist auf kürzere Zeiträume begrenzt. Die Überschuss-Strommenge im unterstellten Energieversorgungsszenario mit hohen erneuerbaren Anteilen übersteigt den Bedarf zur Versorgung von 20 Millionen Fahrzeugen in beiden Infrastrukturfäden um den Faktor drei bis sechs.

Durch die Nutzung von erneuerbaren Stromüberschüssen und Netzstrom mit hohen Anteilen an erneuerbaren Energien sind die kilometerspezifischen CO₂ Emissionen für beide Versorgungsoptionen gering im Vergleich zur Nutzung von fossilen Kraftstoffen. Die Wasserstoff-Infrastruktur mit inhärenter saisonaler Speicherung kann höhere Anteile überschüssiger, erneuerbarer Energien integrieren und ist daher bei der CO₂-Reduktion im Vorteil (siehe Abb. 83). Jedoch kann eine auf die Verfügbarkeit von erneuerbarem Strom ausgerichtete Ladestrategie der Batterie-Fahrzeuge deren CO₂ Emissionen weiter mindern.

Schlussfolgerung

Für den Verkehrsbereich ist zu schließen, dass beide Infrastrukturen wichtige Bausteine sind, um klimaverträgliche, saubere und erneuerbare Verkehrskonzepte zu realisieren.

Eine intelligente und komplementäre Kombination aus beiden Infrastrukturen kann die Stärken der Wasserstoff-Infrastruktur mit den Stärken des elektrischen Ladens verbinden und weniger zukunftsfähige Einzellösungen mit geringerer Systemfähigkeit oder Effizienz vermeiden. Vorteilhaft im Sinne von Systemlösungen kann eine Fokussierung auf das leichter zu erreichende Ziel der Übernacht-Ladung von Batterie-Fahrzeuge für den Kurzstreckenverkehr sein und die Herausforderungen im Langstrecken- und Schwerlastverkehr mit Wasserstoff anzugehen. Insofern kann eine Hybridstrategie zum Aufbau beider Infrastrukturen eine deutliche Steigerung der Nutzung von erneuerbaren Energien und der Effizienz sowie eine signifikante Minderung der CO₂-Emissionen über möglichst viele Verkehrsbereiche und Einsatzzwecke hinweg ermöglichen. Die für die Realisierung notwendigen Investitionen sind für beide Infrastrukturen im Vergleich zu anderen Infrastrukturen (zum Beispiel Ausbau der erneuerbaren Stromerzeugung oder Erhalt und Ausbau von Verkehrswegen) gering.

Zwar besitzt die Ladeinfrastruktur eine höhere Energieeffizienz als der Wasserstoffpfad, allerdings wird eine Wasserstoff-Infrastruktur zukünftig als Schlüsselement zur erweiterten Nutzung von saisonalen Stromüberschüssen auch in anderen Energiesektoren z. B. Industrie gesehen. Aus Gesamtsystemsicht bietet Wasserstoff somit das Potenzial, auch sektorübergreifende Energieversorgungskonzepte (Sektorkopplung) zu realisieren.





5

Ausblick

Ausblick auf neue FuE-Vorhaben

- Festoxidzellen für verringerte Betriebstemperaturen von 400 bis 600 °C
- In-Situ-TEM Untersuchung von Elektrokatalysatoren
- Ansätze zur Entwicklung von Mitteltemperaturzellen und -systemen
- Versorgungssysteme für alternative Kraftstoffe
- Bewertende Forschung an nachhaltigen Energiesystemen

5.1 Festoxidzellen für verringerte Betriebstemperaturen von 400 bis 600°C

Brennstoffzellen können im Temperaturbereich von ca. 80°C bis ca. 900°C betrieben werden. Polymerelektrolytmembran-Brennstoffzellen (PEFC) decken hierbei den unteren Temperaturbereich und Festoxid-Brennstoffzellen (SOFC) den oberen ab. Beide Typen zeigen heutzutage hohe Leistungsdichten und marktreife Langzeitstabilität. Im dazwischen liegenden Temperaturbereich wurden in der Vergangenheit viele Versuche mit diversen BZ-Typen angestellt ähnliche Leistungsdichten und Langzeitstabilitäten zu erreichen. Jedoch gelang das mit keiner der Typen (HT-PEFC, PAFC, MCFC). Alle haben entweder zu geringe Leistungsdichten und/oder keine ausreichende Langzeitstabilität. Auf der Basis des lang-jährigen Know-hows des Forschungszentrums Jülich in der SOFC-Forschung in den Bereichen Materialentwicklung, Mikrostruktur- und Grenzflächendesign soll diese Lücke in den kommenden Jahren zunächst materialseitig geschlossen werden. SOCs auf der Basis von Sauerstoffionen- oder Protonenleitern bieten das grundsätzliche Potential für hohe Leistung und lange Lebensdauer, da sie auf der Vorentwicklung der HT-SOC aufbauen können.

Durch die mittleren Betriebstemperaturen entstehen neue erweiterte Anwendungsmöglichkeiten wie bspw. als Reichweitenverlängerer in straßen- oder schienenengebundenen Fahrzeugen und Schiffen, in Bereichen mit häufigen An/Aus Zyklen (schnellere Leistungsbereitstellung) und sie können im Elektrolysefall systemtechnisch einfacher an bestehende Industrieanlagen angekoppelt werden, bei welchen nutzbare Abwärme im mittleren Temperaturbereich anfällt. Durch die bessere Abwärmeeinkopplung kann das System effizienter betrieben werden. Die verringerte Betriebstemperatur hat auch keine große Einschränkung der SOFC-typischen Brennstoffflexibilität zur Folge, da lediglich die interne Reformierung direkt auf der Zelle unter ca. 650°C nicht mehr möglich ist.

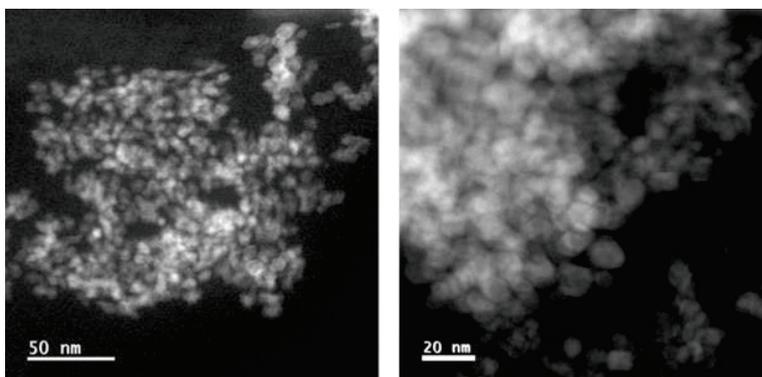
Der Wirkungsgrad als Elektrolyseur ist weitgehend unabhängig von der Betriebstemperatur, so dass auch hier keine Einbußen zu befürchten sind. Ein Elektrolysebetrieb mit Sauerstoffionenleitern ermöglicht zusätzlich die Ko-Elektrolyse von Wasserdampf und Kohlendioxid und eine Elektrolyse mittels protonenleitenden Elektrolyten ermöglicht einerseits die Produktion sehr reinen Wasserstoffs (ohne Wasserdampfanteile) und die Elektrolyse von z.B. Wasserdampf und Kohlendioxid in separaten Gasräumen (Anoden-/Kathodenseite). D.h. der Betrieb einer SOFC oder SOEC (bzw. PCFC, PCEC) bei mittleren Betriebstemperaturen würde sowohl das Anwendungsportfolio deutlich erweitern als auch die entstehenden nutzbaren Produktgase gezielt einstellen lassen.

In der ersten Entwicklungsstufe sind im Wesentlichen werkstofftechnische Fragestellungen zu klären. Neben einer Zelle (dünner CGO-Elektrolyt; variierte Brenngaselektrode; verbesserte Lufterlektroden; protonenleitende Zelle) sind parallel adaptierte Kontaktschichten, ein neuer Interkonnektorwerkstoff, ein alternatives Fügekonzept (Werkstofftyp) und adäquate Betriebsstrategien (Füge-/Reduktionsprozeduren, Thermo-/Redoxzyklen...) zu entwickeln.

5.2 In-Situ-TEM Untersuchung von Elektrokatalysatoren

Das Design neuer Materialien für stabile Elektrokatalysatoren erfordert das Verständnis dieser Materialien unter Betriebsbedingungen³⁰. In-Situ-Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) ist eine leistungsstarke Technik, die solche Untersuchungen ermöglicht. Die Verwendung von In-Situ-TEM ermöglicht Einblicke in die morphologische Entwicklung und Element-Verteilung in metallischen Nanostrukturen sowie ihre Wechselwirkung mit dem Trägermaterial während Reduktions- und Oxidations-Behandlungen auf der atomaren Ebene³¹.

Zusammen mit der Gruppe um Martial Duchamp von der Technischen Universität Nanyang in Singapur haben wir kürzlich die elektrochemische Flüssigzell-Technik in situ angewandt, um mithilfe von Raster-TEM (STEM) die strukturelle Entwicklung von individuellen Pt-Ni-Nanokatalysatoren in Echtzeit unter elektrochemischer Vorspannung in einer alkalischen Flüssigelektrolyt-Umgebung zu beobachten. Die hier erforschten Pt-Ni-Nanokatalysatoren könnten als potenzielle Elektrokatalysatoren für die alkalische Wasserelektrolyse eine größere Stabilität und Langlebigkeit aufweisen. Das oberste Ziel war die Aufrechterhaltung der Auflösung auf atomarer Ebene (0,1–0,2 nm) in einer Flüssigkeit – wie es auch in einer Vakuum-Umgebung möglich ist – und das Erreichen eines hohen Signal-Rausch-Verhältnisses bei elektrochemischen Tests mit hohen Strömen. So soll die Beobachtung von Details der Degradation der oktaederförmigen Pt-Ni-Nanostrukturen ermöglicht werden, während das angelegte Potenzial präzise gesteuert wird, sowie die quantitative Analyse des Verhältnisses zwischen dem Potenzial und dem Degradationsmodus gewährleistet werden. Unter Verwendung des TEM-Probenhalters sowie kommerziell erwerbbarer MEMS-Chips von Protochips wurde zunächst das Pt-Ni-Oktaeder ohne Fluss der alkalischen Lösung in der Zelle beobachtet, wie Abb. 84 zeigt.



³⁰ Zhu, G. Z.; Prabhudev, S.; Yang, J.; Gabardo, C. M.; Botton, G. A.; Soleymani, L. In Situ Liquid Cell TEM Study of Morphological Evolution and Degradation of Pt-Fe Nanocatalysts during Potential Cycling. *J. Phys. Chem. C* 2014, 118 (38), 22111–22119.

³¹ Shviro, M.; Gocyla, M.; Schierholz, R.; Tempel, H.; Kungl, H.; Eichel, R. A.; Dunin-Borkowski, R. E. Transformation of Carbon-Supported Pt-Ni Octahedral Electrocatalysts into Cubes: Toward Stable Electrocatalysis. *Nanoscale* 2018, 10 (45), 21353–21362.

Abb. 84: STEM-Dunkelfeld-Aufnahme von auf dem MEMS-Chip abgeschiedenen Pt-Ni-Oktaedern

Der nächste Schritt bestand darin, die Flüssigkeit in die Zelle hinein fließen zu lassen. Dabei zeigten die Echtzeit-Ergebnisse eine niedrigere Auflösung und unscharfe Aufnahmen, wie in Abb. 85 zu sehen.

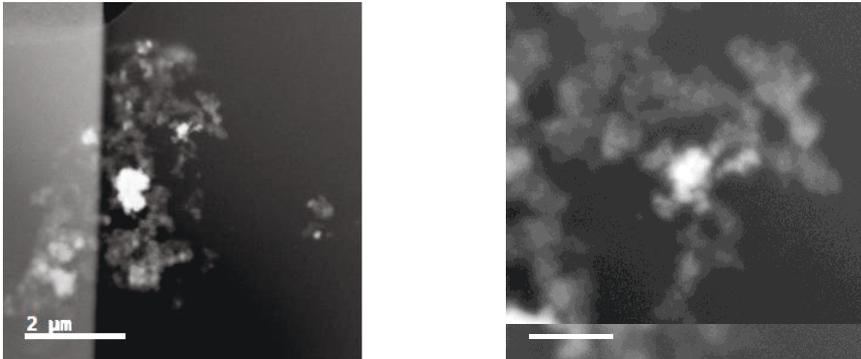


Abb. 85: STEM-Dunkelfeld-Aufnahme von auf dem MEMS-Chip abgeschiedenen Pt-Ni-Oktaedern bei fließender alkalischer Lösung

Während Spannung an das Pt-Ni-Oktaeder angelegt wurde, zeigten die Echtzeit-Aufnahmen wieder die gleiche niedrige Auflösung und unscharfen Bilder wie in Abb. 85. Jedoch zeigten die Ergebnisse der Zyklovoltammetrie, dass der Strom klein war und die Veränderungen in den Pt-Ni-Oktaeder-Nanostrukturen nicht klar gesehen werden konnten. Kommerziell erwerbbar MEMS-Chips können also nicht die gewünschte Auflösung erzielen und können daher nicht für den benötigten elektrochemischen Test verwendet werden. Zur Untersuchung dieser Materialien in der Flüssigzelle soll daher ein neuer MEMS-Chip entwickelt werden.

5.3 Ansätze zur Entwicklung von Mitteltemperaturzellen und -systemen

Für die zukünftige breite Anwendung von Elektrolyse zur Speicherung elektrischer Energie in Form von Wasserstoff wird eine hohe Effizienz der Umwandlung besonders wichtig sein. Besonders der Betrieb bei höheren Temperaturen bietet dabei die Möglichkeit die Effizienz im Vergleich zu den konventionellen Systemen deutlich zu verbessern. Attraktiv ist insbesondere der Bereich zwischen 100 und 250 °C. In diesem oft „Mitteltemperatur“ genannten Bereich ist die Kinetik im Vergleich zu Niedertemperatursystemen deutlich beschleunigt. Zudem wird höherwertige Abwärme erzeugt und die Temperaturkontrolle ist einfacher. Es können aber im Gegensatz zu Hochtemperaturelektrolyse noch kostengünstige, konventionelle Werkstoffe, wie zum Beispiel Polymere verwendet werden.

Mit sauren Elektrolyten ist dieser Temperaturbereich wegen der stärkeren Korrosion besonders herausfordernd. In Arbeiten zur alkalischen Mitteltemperaturelektrolyse an der DTU konnte aber bereits ein Rückgang der Überspannungen und eine verbesserte Effizienz beobachtet werden. (Allebrod2014)

Trotz deutlicher Fortschritte sind polymerbasierte, alkalische Elektrolytmembranen bisher nicht stabil genug für die Anwendung bei über 100 °C. Daher sind anorganische Hydroxidionenleiter wie layered double hydroxides die derzeit aussichtsreichsten Elektrolytmaterialien für die Mitteltemperaturelektrolyse. Mechanisch ausreichend stabile Membranen können durch die Verarbeitung zu Polymerkompositen erhalten werden. Die prinzipielle Eignung des Materials als Elektrolyseurmembran sowie die Herstellung dünner Membranen und die Leitfähigkeit bei erhöhten Temperaturen wurden bereits demonstriert (Zeng2012, He2018, Kim2010).

Der nächste Schritt ist nun die Entwicklung von Kompositmembranen für den Mitteltemperaturbereich. Auf der Basis der langjährigen Erfahrung in der Herstellung dünner Schichten am IEK-3 werden die Material- und Herstellungsparameter variiert um Membranen mit hoher Stabilität und Leitfähigkeit zu erhalten. Dabei ist auch das Verständnis der zu Grunde liegenden Prozesse essentiell für zielgerichtete Verbesserungen.

Bezüglich der Peripherie stellt ein alkalischer Mitteltemperaturelektrolyseur auf Grund des Mediums und des erhöhten Drucks und der Temperatur besondere Anforderungen. Zu einem gewissen Teil lassen sich hier vermutlich Erfahrungen mit HT-PEM-Brennstoffzellen übertragen. Die Stabilität der verwendeten Materialien muss aber unbedingt unter Anwendungsbedingungen untersucht werden. Daher wird ein neuer Teststand mit integrierter Analytik aufgebaut. Dieser wird operando-Untersuchungen der produzierten Gase wie auch des flüssigen Mediums erlauben. So kann die Materialstabilität und die Elektrolyseleistung in Abhängigkeit von der Betriebsführung beobachtet werden. Die Speisung der Zellen kann flüssig oder auch dampfförmig erfolgen. Letzteres ermöglicht den Betrieb bei geringeren Drücken und vermeidet die Zirkulation alkalischer Lösungen. Dies ist bezüglich der Sicherheit und des Korrosionsrisikos vorteilhaft. Die Reaktanden und Produkte bleiben dabei in der gleichen Phase, was die Strömung in den Elektroden vereinfacht, aber die Produktabtrennung erschwert.

Zunächst werden Tests im Einzelzellmaßstab durchgeführt. Die Verwendung etablierter Katalysatoren erlaubt dabei den Vergleich der Elektrolyseleistung mit herkömmlichen Systemen. In diesem Maßstab können auch weitere vielversprechende Katalysatoren aus der aktuellen Forschung zur alkalischen Niedertemperaturelektrolyse getestet werden. Darauf aufbauend werden dann Versuche im Short-Stack-Maßstab durchgeführt. Diese

erlauben ein besseres Verständnis des Gesamtsystems, unter anderem bezüglich der Wärmebilanz, sowie eine umfassende Analytik im laufenden Betrieb.

5.4 Versorgungssysteme für alternative Kraftstoffe

Der Bedarf an flüssigen Kraftstoffen wird nach den vorliegenden Prognosen in den nächsten Dekaden 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, Methan aus der Biomassefermentation (Bio-CH₄), sowie Wasserstoff und Methan aus Power-to-gas-Prozessen (PTG) zu nennen.

5.4.1 Kraftstoffbedarf

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. 86 fasst die wesentlichen Eigenschaften für beide Kraftstofftypen zusammen.

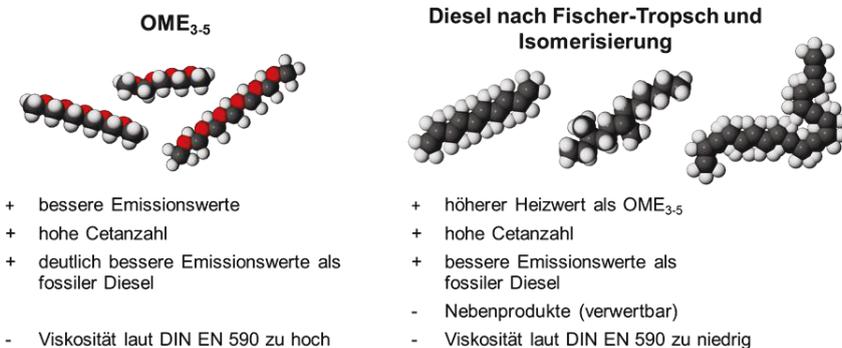


Abb. 86: Vergleich der Power-to-Fuel Routen OME-Synthese und Fischer-Tropsch.

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, da der übliche Trade-off zwischen Ruß- und Stickoxidbildung entfällt. 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.

Neben den technischen Aspekten umfasst die vergleichende Bewertung das ökonomische Potential und ökologische Einflüsse. Abb. 87 gibt dazu einen Überblick zum Forschungsansatz am IEK-3. Neben Ethern und Fischer-Tropsch-Produkten werden im durch das BmWi geförderten Projekt C³ Mobility im Wesentlichen Methanol-basierte Prozesse betrachtet. Auf Basis eines ersten Prozessdesigns erfolgt eine Optimierung der Prozesse zur Steigerung der Ausbeute und des Wirkungsgrades, z.B. durch Einbau zusätzlicher Wärmetauscher oder weiterer chemischer Reaktoren. Letztendlich folgt daraus die ökonomische Analyse mit der Bestimmung der Investitionskosten zum Aufbau der Kraftstoffsynthese und der Abschätzung der Betriebskosten.

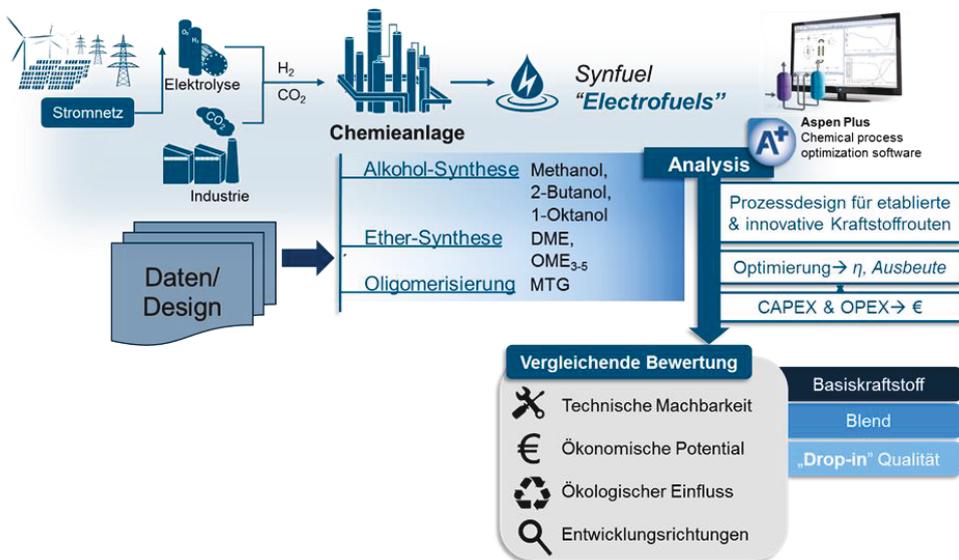


Abb. 87: Darstellung des Forschungsansatzes Power-to-Fuel für Methanol-basierte Prozesse

5.4.2 Thermodynamische Modellierung

Eine besondere Herausforderung für die Formaldehyd-Synthese (Route A der OME-Herstellung) ist die Beschreibung von Phasengleichgewichten. In Mischungen aus Wasser/Methanol und Formaldehyd kommt es zu Oligomerisierungsreaktionen, die zur Bildung von instabilen Zwischenprodukten wie Methylenglykole (MG_n) und Hemiformalen (HF_n) führen. Das nachfolgende Reaktionssystem in Abb. 88 veranschaulicht die Zusammenhänge in der

Gas- und Flüssigphase. Nur die kürzesten Oligomere (Kettenlänge 1) besitzen noch einen anzunehmenden Beitrag zum Dampfdruck. Längere Ketten werden in der Gasphase vernachlässigt und vorwiegend in der Flüssigphase gebildet.

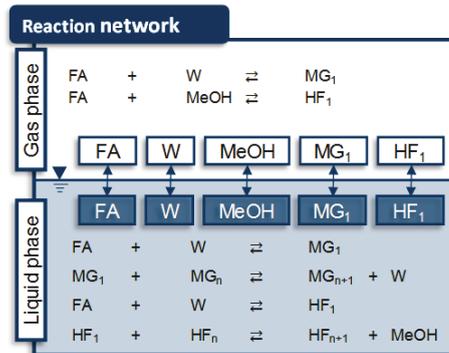


Abb. 88: Gleichgewichtsmodell für Mischungen aus Formaldehyd-Wasser-Methanol nach Maurer et al.³²

Die Implementierung in Aspen Plus® nutzt das bereits vorhandene UNIFAC Modell. Hier werden die einzelnen Spezies in funktionale Gruppen zerlegt umso die zu bestimmenden Größen abzuleiten. Eine Optimierung der Korrelationsparameter wurde auf Basis von experimentellen Daten durchgeführt. Optimierungsziel war die Minimierung der Fehlerquadrate zwischen den simulierten und den experimentellen Siede- und Taulinien der verschiedenen Gemische. Die Ergebnisse zeigen eine erfolgreiche Darstellung der Phasengleichgewichte über nahezu den gesamten Mischungs- und Temperaturbereich. Ein Beispiel für diese erfolgreiche Implementierung zeigt **Abb. 89**.

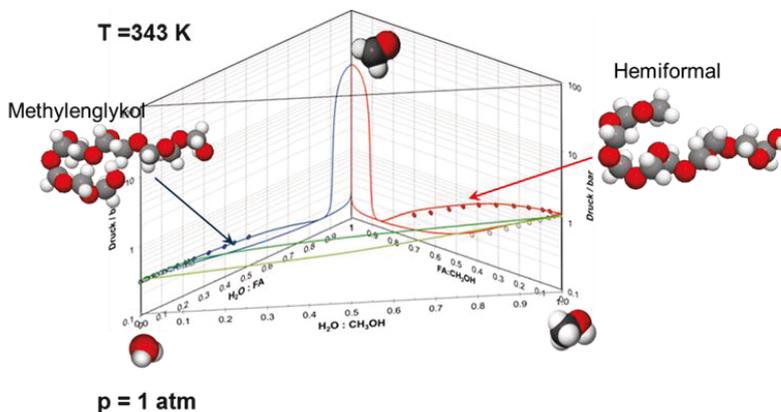


Abb. 89: Dreidimensionale Darstellung des Phasenverhaltens einer Formaldehyd-Methanol-Wasser Mischung zwischen Simulation mit Aspen Plus® und experimentellen Daten von Maurer et al.³⁰ für 343 K und 1 bar³⁰.

³² Maurer, G., Vapor-liquid equilibrium of formaldehyde-and water-containing multicomponent mixtures. AIChE Journal, 1986. 32(6): p. 932-948.

Die simulierten Siede- und Taulinien treffen die experimentell bestimmten Punkte sehr gut. Lediglich bei höheren Formaldehydanteilen ab ca. 80% hin zum Azeotrop der Mischung bei 90% fehlt die Anbindung an Experimente. Der steile Verlauf von Siede- und Taulinie vom Azeotrop hin zu reinem Formaldehyd beruht auf den hohen Siededrücker von Formaldehyd. Diese Bereiche sind allerdings für die folgenden Simulationen nicht von Bedeutung.

Die thermodynamischen Modelle werden in Aspen Plus® für die Kolonnenauslegung eingesetzt. Abb. 90 zeigt die verfahrenstechnische Auslegung der Destillationskolonnen bei der Methylalsynthese. Eine besondere Schwierigkeit stellen dabei die Phasengleichgewichte dar, die sich aus dem Auftreten von Formaldehyd ergeben, jede Stufe in der Destillationskolonne wird von einem anderen Reaktionsgleichgewicht von Methylenglykolen, Hemiformalen, Wasser und Methanol geprägt. Molekularer Formaldehyd taucht in solchen Mischungen nicht mehr auf. Die Kolonnenauslegungen wurden an Hand von Messdaten zum thermischen Trennverfahren verifiziert.

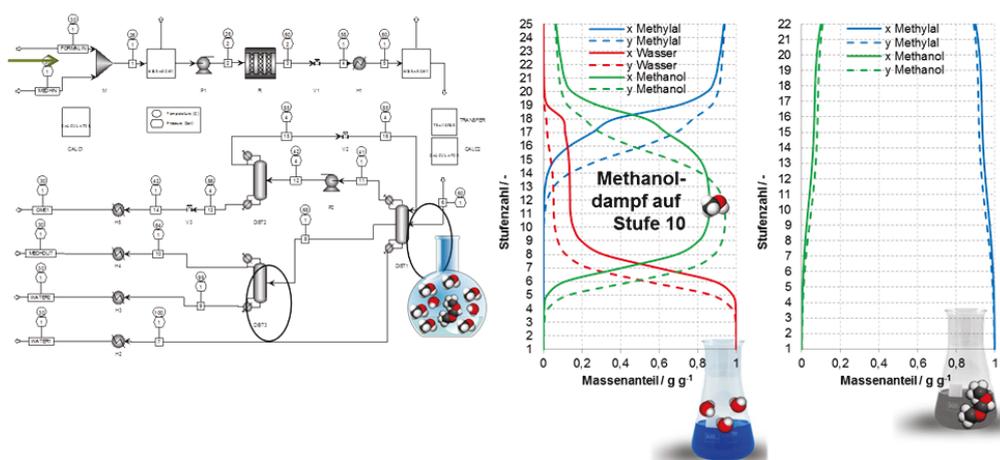


Abb. 90: Verfahrenstechnische Auslegung der Destillationskolonnen bei der Methylal-synthese

Die Kolonnenauslegungen wurden an Hand von Messdaten zum thermischen Trennverfahren für alle Zwischenprodukte der OME-Synthesen verifiziert. Trioxan ist ebenfalls ein wichtiges Zwischenprodukt für die Herstellung von OME₃₋₅. Trioxan wird für die Synthese von OME₃₋₅ nach den Routen B und C von Burger³³ verwendet. Im industriellen Maßstab wird Trioxan nach einer Extraktionsmethode von BASF hergestellt. Für die Entwicklung der Prozesssimulation diente allerdings der Prozessentwurf von Grützner et al.³⁴ als Orientierungsvorlage. Der von Grützner entwickelte Prozess verspricht eine höhere Energieeffizienz als der typische BASF Prozess. Grützner beschreibt in seiner Arbeit Konvergenzprobleme

³³ Burger, J. A novel process for the production of diesel fuel additives by hierarchical design. PhD, Kaiserslautern, Kaiserslautern, 2012.

³⁴ Grützner, T., et al., Development of a new industrial process for trioxane production. Chemical Engineering Science, 2007. **62**(18-20): p. 5613-5620.

bei der Simulation mit Aspen Plus®. Durch den gewählten, speziellen Modellierungsansatz (siehe oben) war es dennoch möglich den Trioxanprozess in Aspen Plus® in einen konvergierten Zustand zu überführen. Der gesamte Energieeinsatz der Kolonnen in dem gezeigten Trioxanprozess wurde von Grützner zu 65,2 – 65,5 MJ/kg Trioxan bestimmt. Mit der gezeigten Modellierung wird ein Wert von 65,3 MJ/kg Trioxan berechnet, was einer sehr guten Übereinstimmung entspricht. Als weitere Validierung kann die korrekte Vorhersage der Azeotropen interpretiert werden. Sowohl die Synthese von Trioxan als auch die Synthese von Formaldehyd sind zusätzlich noch wärmeintegriert, wodurch die benötigten Wärmemengen deutlich geringer ausfallen als die oben gezeigten Werte.

5.4.3 Ökonomische Analyse

Für die techno-ökonomische Analyse wurde auf die Methodik der Produktgestehungskosten zurückgegriffen. Hierfür müssen zunächst die Investitionskosten und die Betriebskosten für die jeweiligen Anlagen bestimmt werden. Die Betriebskosten werden durch die Bilanzgrößen der Prozesssimulationen und den entsprechenden Kostenfaktoren für die einzelnen Betriebsmittel bestimmt. Die Investitionskosten sind abhängig von den Komponentenkosten der Anlage. Die Komponentenkosten werden dabei individuell nach der Komponentenkostenmethode nach R. Turton³ mit einer Genauigkeit von +50 % bis -30 % berechnet. Die allgemeine Methodik zu dieser Analyse wird von Abb. 91 veranschaulicht.

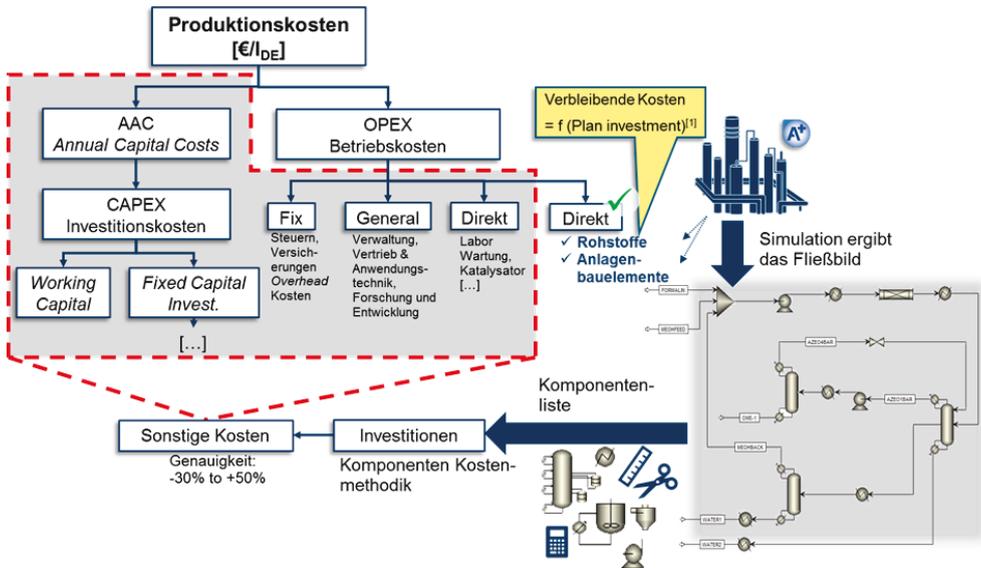


Abb. 91: Prinzipielles Vorgehen bei der ökonomischen Analyse nach Turton³⁵.

Zum gegenwärtigen Zeitpunkt sind bereits die Prozesse der Methanolsynthese, die zweistufige DME-Synthese und die Methylalsynthese auf die beschriebene Weise techno-ökonomisch analysiert. Für eine solche Analyse ist eine Sensitivitätsanalyse

³⁵ Turton, R., Analysis, synthesis, and design of chemical processes. 4th ed., int. ed. ed. 2013, Upper Saddle River, NJ: Pearson Education Int. XXXV

empfehlenswert. Die Anlagengröße wird im Folgenden konstant gehalten (300 MW_{th}). Die Bezugsgröße für die spezifischen Produktgestehungskosten ist der Energieinhalt von einem Liter Diesel (34,7 MJ), d.h. hier werden die Produktionskosten eines ausgewählten Kraftstoffs bestimmt, welcher in seiner Summe die gleiche Menge an Energie besitzt wie 1 Liter Diesel. Die Variationen der Einflussgrößen sind in der Tab. 3 zusammengefasst.

Mit den Basiswerten werden die Produktgestehungskosten von 1,99 €/l_{DE} für Methanol berechnet. In Übereinstimmung mit der Prozessanalyse ist die Bereitstellung des Wasserstoffs über die Elektrolyse der größte Einflussfaktor auf die Produktionskosten von Methanol. Variiert der Wasserstoffpreis zwischen 3 €/kg und 6 €/kg, schwanken die Methanolkosten zwischen 1,34 und 2,37 €/l_{DE}. Desweiteren zeigt sich ein starker Einfluss durch die mit der Bereitstellung von CO₂ verbundenen Kosten. Alle restlichen Größen sind nur von untergeordneter Bedeutung, d.h. vorwiegend die Investitions –und Betriebskosten der Anlagen.

Einflussgrößen	Einheit	Untere Grenze	Basiswert	Obere Grenze
H ₂ -Kosten	€/kg	3	4,6	6
CO ₂ -Kosten	€/kg	0,02	0,07	0,17
FCI (Investitionskosten)	%	-30	-	+50
Zinssatz	%	2	8	12
Dampf	€/t	16	32	48
Kühlwasser	€/t	0,01	0,1	1
Betriebsstrom	€.ct./kWh	4	9,76	14,7

Tab. 3: Übersicht über die wichtigsten Einflussgrößen zur ökonomischen Analyse von Elektrokraftstoffen

Mit den Basiswerten und eine Anlagengröße 200 MW_{th} können Produktgestehungskosten von ca. 1,85 €/l_{DE} für DME erzielt werden, d.h. die Kosten sind hier sogar leicht geringer als für Methanol. Im Allgemeinen stellt sich hier ein sehr ähnliches Bild im Vergleich zur Analyse von Methanol dar. Die Edukte besitzen den größten Einfluss auf die Kosten, gefolgt von Investitionskosten, Zinssatz und Elektrizität. Da auch der Prozess der DME-Synthese (wie auch die Methanolsynthese) als exotherm bestimmt wurde, fallen keine Kosten für Prozessdampf an. Das Kühlwasser hat nur einen verschwindend geringen Anteil in dieser Betrachtung.

Diese Analysen werden grundlegend verschieden für die Syntheserouten von OME₃₋₅ aussehen, da die folgenden Aspekten in den Vordergrund rücken:

- Es werden höhere Investitionskosten aufgrund höherer Anlagenkomplexität vorliegen, damit besteht auch ein größerer Einfluss des Kalkulationszinssatzes.
- Zusätzliche Kosten entstehen durch die Bereitstellung von Prozessdampf für den Betrieb von Trennkolonnen (vgl. Trioxanprozess).

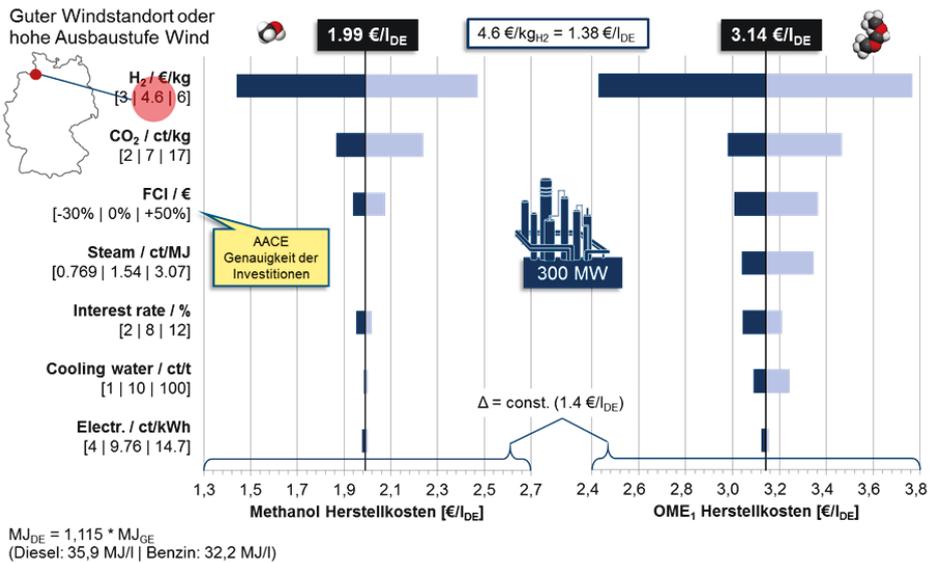


Abb. 92: Ökonomische Analyse der Methanol- und Methylalgestehungskosten auf Basis von Anlagengrößen 300 MW_{th}.

Abb. 92 zeigt, dass für den Fall der Produktion von OME₁ die Betriebskosten mit 3,14 €/l_{DE} schon deutlich über den Werten von Methanol liegen. Bei langkettigen OME-Verbindungen ist in Abhängigkeit der verwendeten Route die Bildung von Trioxan notwendig. Der Energiebedarf ist für die Trioxanherstellung besonders hoch. Daher sind Routen zu bevorzugen, die Trioxan als Zwischenprodukt vermeiden.

5.5 Bewertende Forschung an nachhaltigen Energiesystemen

5.5.1 Umsetzungsstrategien für einen treibhausgasfreien Verkehr bis 2050

Aktuelle politische Zielsetzungen, gesellschaftliche Trends sowie Fortschritte im Bereich der Verkehrstechnologien lassen einen deutlichen Wandel in der Art und Weise, wie Personen und Güter zukünftig transportiert werden, erwarten. Weiterhin sind signifikante Änderungen der Energieträgerbereitstellung für den Verkehr abzusehen, insbesondere durch einen veränderten Endenergieträgermix, der sich im Kontext der Sektorenkopplung in Richtung Ladestrom für Batteriefahrzeuge, Wasserstoff für Brennstoffzellenfahrzeuge sowie flüssiger synthetischer Kohlenwasserstoffe verschieben wird. Inwieweit sich einzelne Lösungsansätze tatsächlich durchsetzen und einer Zielerreichung dienlich sein werden, ist jedoch unsicher. Eine eingehende Analyse und Bewertung erfordert in besonderem Maße die Entwicklung geeigneter Modelle sowie die Definition von Szenarien, mit deren Hilfe das Spektrum an erwartbaren Änderungen im Verkehrssektor hinsichtlich Quantität und Struktur der Verkehrsleistungen im Personen- und Güterverkehr rechnerisch greifbar gemacht werden kann. Dazu gehört auch, Ereignisse mit disruptivem Charakter, beispielsweise dem Ausschluss einzelner Verkehrstechnologien, in geeigneter Weise abbilden zu können.

In diesem Kontext stehen neue Themen im Bereich Verkehr und Mobilität, die sich auf die möglichen Ausprägungen zukünftiger Verkehrsnachfragen einerseits sowie auf die Bewertung der im Zeitverlauf zur Verfügung stehenden technischen Optionen andererseits beziehen. Kernelemente der Vorgehensweise liegen in der Szenarien- und Modellentwicklung, in der Einbeziehung sozialwissenschaftlicher Analysen und Erkenntnisse sowie in der Verknüpfung des zu erstellenden Gesamtmodells mit einem vorhandenen, bezüglich der Systemebene übergeordneten Energiesystemmodell, das die Modellergebnisse des Verkehrssektors direkt für die Energiesystemoptimierung auf nationaler Ebene verwendet. Auf diese Weise können Auswirkungen, die in der Verknüpfung der Sektoren begründet liegen, beispielsweise durch veränderten Strombedarf im Verkehr, direkt untersucht und bewertet werden.

Ausgangspunkt der Szenarienentwicklung ist die Analyse zukünftiger Mobilitätsbedarfe und Transportnachfragen. Darauf aufbauend werden techno-ökonomische Modelle zur Beschreibung der Systemelemente entwickelt, wobei davon ausgegangen wird, dass Teilaufgabenstellungen mithilfe von dynamischen und statischen Modellen bearbeitet werden, sodass eine oder mehrere Modellumgebungen zur Anwendung kommen und in geeigneter Weise zu verknüpfen sind. Dazu gehören beispielsweise weiter entwickelte Analysen des Kraftstoffverbrauchs von Fahrzeugen in hoher zeitlicher Auflösung (mindestens Sekundenbereich für PKW) sowie Untersuchungen übergeordneter Infrastrukturen und Versorgungssysteme, die in räumlicher (mindestens NUTS 3 Ebene) und zeitlicher Auflösung (stündliche Auflösung) durchzuführen sind. Weiterhin sollen Möglichkeiten des Rückschlusses von Erkenntnissen für den Zielzeitraum 2050 auf die im Zeitverlauf notwendigen Maßnahmen zur Umsetzung (*Roadmapping*) implementiert werden.

5.5.2 Stationäre Energiesysteme

Ein Ziel der geplanten Arbeiten ist die Fortschreibung und Detaillierung der Energie- und Klimagasreduktionsszenarien des IEK-3. Hierzu wird erstmalig das am IEK-3 entwickelte

Gesamtenergiesystemmodell FINE-NESTOR eingesetzt, welches das nationale Energiesystem von der Primärenergiegewinnung bis hin zu den Endenergiesektoren abbildet. Gegenüber herkömmlichen Modellen besteht der große Vorteil darin, konsistente Szenarien generieren zu können. Ziel ist es, mit diesem myopischen Modell Transformationsstrategien für die Energiewende zu entwickeln. In diesem Rahmen soll ebenfalls ein Großteil der am IEK-3 vorhandenen Modelle eingesetzt werden. Die Ziele hierbei sind zum einen, einen belastbaren Dateninput (z.B. Windkraftzeitreihen) für das NESTOR Modell zu erarbeiten. Zum anderen sollen die aggregierten Ergebnisse mit den Detailmodellen (z.B. erforderliche H₂-Infrastrukturen) analysiert werden. Dies erfordert ein iteratives Vorgehen, das erstmalig getestet wird. Die Arbeiten werden einen Hinweis darauf geben, welche Modellkopplungen zukünftig auch als Hard-Linking realisiert werden können.

Die Realisierung verschiedener Ptx Möglichkeiten erfordert die Nutzung von CO₂. Unklar ist derzeit, welche CO₂-Mengen zur Verfügung stehen könnten. Darüber hinaus ist von großer Wichtigkeit, welche Mengen an welchen Orten anfallen. Diese lokal gebundenen Mengen sind in Übereinstimmung mit den ebenfalls lokal auftretenden Wasserstoffmengen zu bringen. Für die Beantwortung dieser Frage ist der Aufbau eines nationalen CO₂-Katasters geplant.

Im Bereich Energiestrategien für Gebäude- und Quartiere werden die am IEK-3 entwickelten Modelle FINE.Building (Optimierung von Gebäudeenergiesystemen) und FINE.District (Optimierung von Quartiersenergiesystemen) weiterentwickelt. Ein Schwerpunkt ist die Implementierung weiterer Energieumwandlungs- und Speichertechnologien (z.B. Kleinwindenergieanlagen, Brennstoffzellen-KWK-Geräte, Fassadenintegrierte PV, Wasserstoffspeichersysteme). Das FINE.District Modell wird für ein spezifisches Quartier erweitert, sodass ein Ortsnetztransformator mit allen angeschlossenen Ortsnetzen abgebildet wird. Weiterhin ist die Kopplung des FINE.District Modells mit einer nachgeschalteten Lastflussberechnung geplant.

Mit den Modellen werden verschiedene Fragestellungen in Bezug auf Transformationsstrategien für Gebäude und Quartiere untersucht. Auf Gebäudeebene bildet die techno-ökonomische Analyse und Bewertung von Brennstoffzellen-KWK-Anlagen in Kombination mit Batteriespeichersystemen einen der Schwerpunkte. Im Fokus stehen hier Fragen zur optimalen Systemauslegung und zum Anlagenbetrieb. Darüber hinaus wird die direkte Integration von Umwandlungs- und Speichertechnologien in die Gebäudefassade anhand einer Fallstudie untersucht. Auf Quartiersebene werden unterschiedliche Modernisierungsraten im Gebäudebestand betrachtet und darauf aufbauend verschiedene Sektorkopplungsoptionen untersucht sowie die Auswirkungen einer veränderten Versorgungsstruktur auf Netzbetriebsmittel (Ortsnetztransformator) bestimmt. Weiterhin soll untersucht werden, inwieweit ein autarkes Quartier mit einem Inselnetz eine Alternative zu einer konventionellen Ortsnetzstruktur mit Transformator darstellt.

5.5.3 Sektorkopplung und Infrastrukturen

Die Transformation des Energiesystems stellt alle Infrastrukturen zum Energietransport und Verteilung vor große Herausforderungen. Dies gilt sowohl für die Finanzierung, die Planung als auch Realisierung von Infrastrukturen in den Bereichen, Strom, Gase und Kraftstoffe. Mit Hilfe von räumlich und zeitlich aufgelösten Energiesystemmodellen gilt es daher die Fragestellung zu untersuchen, wie Energieinfrastrukturen mit langen Planungshorizonten an neue

und veränderliche Erzeugungs- und Bedarfsstrukturen effizient angepasst werden können. Die jeweiligen Energieinfrastrukturen sollen jeweils mit dem Blick auf Europa analysiert werden.

Mögliche Optionen zur Sektorenkopplung wie zum Beispiel Elektromobilität oder Power-to-Hydrogen bilden dabei zukünftig die Option die entsprechenden Infrastrukturen zu koppeln und mögliche Verlagerungen von Energietransporten zu ermöglichen. So kann z.B. das Stromübertragungsnetz durch eine gezielt gesteuerte Wasserstoffherzeugung bei Netzengpässen entlastet werden und der Energietransport und/ oder Speicherung durch eine Gasinfrastruktur übernommen werden. Daher kann eine Optimierung von Aufbaustrategien bezüglich Energietransport-Infrastrukturen für das Zieljahr 2050 nicht isoliert voneinander durchgeführt werden sondern erfordern eine multimodale, integrierte Modellierung. Die Flexibilität und Speicherkapazität von Energieinfrastrukturen muss dabei mit in den Blick genommen werden.

Es ist geplant den bereits entwickelten FINE-Modellgenerator zur Abbildung, Optimierung und Bewertung von Energiesystemen in Richtung multimodale Infrastrukturbetrachtung auszubauen. Um Strategien zum Neubau oder Umwidmung von Infrastrukturen analysieren zu können, ist ebenfalls eine Mehr-Periodenbetrachtung nach verschiedenen Ansätzen zu implementieren. Beide Erweiterungen ermöglichen eine integrierte Betrachtung von konsistenten Szenarien zum Infrastrukturausbau und darauf aufbauend Kostenbetrachtungen und entsprechenden Bewertungen.



Daten

Zahlen, Daten und Fakten

- Das Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3)
- Abteilungskompetenz im Überblick
- Publikationen, Technologietransfer und Ressourcen
- Preise und Auszeichnungen
- Gremienarbeiten
- Beiträge zu Messen und Ausstellungen
- Anfahrtsbeschreibung
- Abkürzungsverzeichnis

6.1 Das Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3)

Im zurückliegenden Berichtszeitraum 2017 und 2018 wurde intensiv daran gearbeitet, mit zielgerichteten Ergebnissen für die vom IEK-3 im neu formierten HGF-Programm „Speicher und vernetzte Infrastrukturen (SVI)“ besetzten Forschungs- und Entwicklungsschwerpunkte Brennstoffzellen, Elektrolyse und zukünftige Kraftstoffe plausible Antworten auf die wesentlichen Leitfragen der Energiewende zu geben. Der Themenschwerpunkt „Systeme für die Bordstromversorgung“ orientiert sich für die Bereitstellung einer Brennstoffzelle für ein wasserstoffreiches Brenngas aus der systemeigenen Brenngasversorgung auf Stacks kommerzieller Anbieter. Die Arbeiten zur Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen (HT-PEFC) werden in einer Übergangsphase abgeschlossen und das Know-how wird auf Aktivitäten des IEK-3, die auch auf Polymerelektrolytmembranen basieren, transferiert.

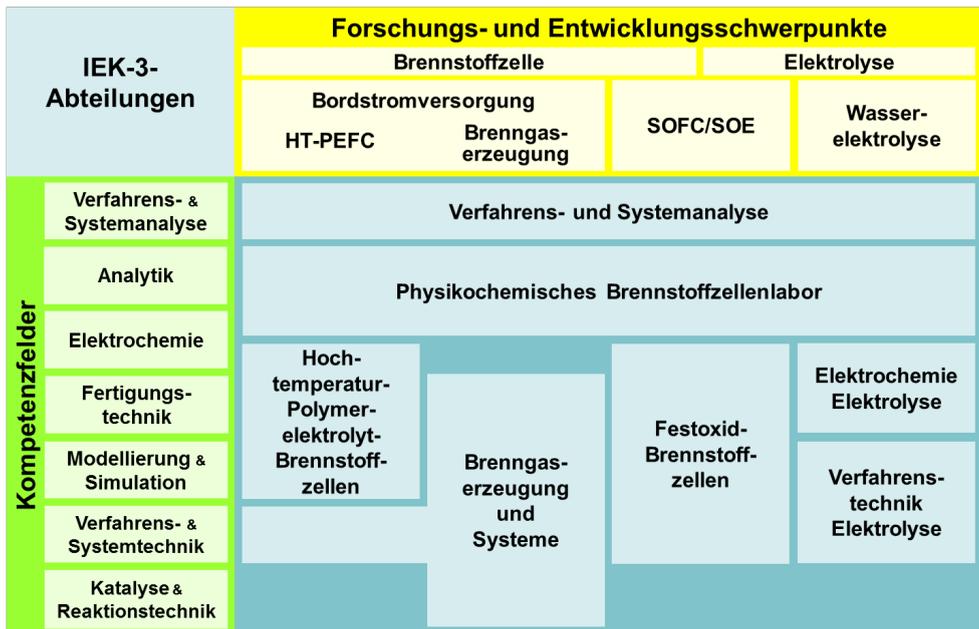


Abb. 93: Fachabteilungen im Kreuzungsbereich von Kompetenzfeldern und FuE-Schwerpunkten

Die keramische Hochtemperatur-Brennstoff- und Elektrolysezelle SOFC/SOE sowie die Niedertemperaturelektrolyse sind weitere Themen des IEK-3, die in Abb. 93 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 Systemanalyse, 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.

Das Kopernikus-Verbundvorhaben „Power-to-X“ konnte auch mit wissenschaftlichen Beiträgen des IEK-3 auf einen erfolgreichen Weg hin zum Abschluss der ersten und zum Übergang in die zweite Projektphase gebracht werden. Durch den fokussierten Ausbau und die inhaltliche Schärfung der Verfahrens- und Systemanalyse (VSA) des IEK-3 konnte deren Bedeutung und Sichtbarkeit für die integrierte Auslegung nachhaltiger Energieversorgungssysteme erheblich gestärkt werden. Dies konnte unter anderem für die Bewilligung eines umfassenden Fördervorhabens genutzt werden, für dessen Durchführung die VSA-Gruppe mit Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern des Jülicher IAS-JSC, der RWTH Aachen und der Universität Erlangen-Nürnberg zusammenarbeitet. Es behandelt die Entwicklung umfassender Methoden und Modelle zur Überwindung der Energiewende und zur Integration von Energiesystemen. Im Rahmen der HGF-Initiative Energie System 2050 wurde die Zusammenarbeit mit den HGF-Zentren GFZ, HZB und DLR auf dem Forschungsthema „Energie- und Rohstoffpfade mit Wasserstoff“ systematisch aufgebaut, intensiviert und zu ersten wissenschaftlichen Ergebnissen in Form von Abschlußarbeiten und Publikationen geführt. Darüber hinaus wurde das Engagement des IEK-3 im Zukunftsthema „Energiesystemintegration“ neben dem Arbeitspaket 1 „Multimodales Energiesystem 2050“ auf das Arbeitspaket 2 „Flexibilisierung grundlegender, industrieller Prozessketten“, ausgeweitet.



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

Jülich arbeitet seit über 25 Jahren in der institutionellen Forschung an Brennstoffzellen und Elektrolyseuren und stellt mit etwa 150 Mitarbeitern eine der größten und erfahrensten Forschungsmannschaften in Europa auf diesem Themenfeld. In der SOFC/SOE sind neben dem IEK-3 mit 12 Mitarbeitern für die elektrochemische Verfahrenstechnik 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 vorangetrieben. Die Verfahrens- und Systemanalyse ist infolge des Bedeutungsgewinns für die Energiewende deutlich auf insgesamt 15 vollbeschäftigte Mitarbeiter gewachsen. 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. Dazu werden Mitteldestillate – Kerosin, Diesel, Heizöl – und dieselähnliche Biokraftstoffen im Leistungsbereich zwischen 3 und 50 kW_{el} reformiert. Derzeit wird ein Bordstrom-Versorgungssystem mit einer elektrischen Leistung von 7,5 kW_{el} in Kombination mit einer kommerziellen HT-PEFC als kompaktes Modul aufgebaut. Die Einbindung von PEFC-Systemen soll in Kooperation mit Projektpartnern durchgeführt werden. Zukünftig werden die entwickelten Reaktoren und erarbeiteten Methoden in Komponenten und Systemen der Kraftstoffsynthese eingesetzt.

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
- Temporal Analysis of Products (TAP): Bestimmung des Reaktionsablaufs und der Kinetik an Katalysatormaterialien

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 H_2 -Erzeugung aus regenerativen Stromüberschüssen. Unterstützt von Projektpartnern aus Forschung und Industrie werden Membran-Elektroden-Einheiten (MEAs) entwickelt, die mit weniger Platingruppenmetallen 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 m^3 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.

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.

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 Ionentauschermaterialien 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 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 and Integration Systems) einer Python- und Datenbank-basierten am IEK-3 entwickelten Modellumgebung
- Potenzialanalysen von bspw. erneuerbaren Energien im EU-Gesamtsystem
- Dynamische Simulationen (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 (größer 9,0) konnten die Wissenschaftler des IEK-3 in 2017 und 2018 drei Artikel veröffentlichen (siehe Tab. 4).

Journal	Impact-Faktor	2017	2018
Journal of the American Chemical Society	14,357	1	0
Renewable and Sustainable Energy Reviews	9,184	0	2
Applied Energy	7,900	2	9
Journal of Power Sources*	6,945	9	5
Journal of Membrane Science	6,578	1	0
Energy Conversion and Management	6,377	2	0
Journal of CO2 Utilization	5,503	0	1
Electrochimica Acta	5,116	4	2
Energy	4,968	1	1
Fuel	4,908	1	0
Renewable Energy	4,900	1	0
Electrochemistry Communications	4,660	2	1
International Journal of Hydrogen Energy*	4,229	18	10
APL Materials	4,127	0	1
Physical Chemistry, Chemical Physics	3,906	2	1
Journal of the Electrochemical Society*	3,662	5	8
Journal of Electroanalytical Chemistry	3,235	2	1
The Journal of Chemical Physics	2,843	0	1
Energies	2,676	5	3
Control Engineering Practice	2,616	1	0
Transport in Porous Media	2,211	0	1
Fuel Cells	2,149	1	1
International Journal of Adhesion and Adhesives	2,065	0	1
Applied Sciences	1,689	0	1
Journal of Coatings Technology and Research	1,619	0	1
Journal of Electrochemical Energy Conversion and Storage	1,429	0	2
Review of Scientific Instruments	1,428	0	1
Coatings	1,298	0	1
Materials and Corrosion	1,259	1	0
Bulgarian Chemical Communications	0,242	1	0
Journal of Energy Storage	Keine Angabe	0	2
Sustainable Energy & Fuels	Keine Angabe	0	1

Tab. 4: 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 5 bis 18 Artikel pro Journal und Jahr lagen. Die jährliche Gesamtpublikationsleistung des IEK-3 in referierten Journalen betrug 60 Artikel in 2017 und 58 Artikel in 2018.

Insgesamt beteiligten sich die Wissenschaftler des IEK-3 in 2017 mit 44/10 und 2016 mit 61/19 Vorträgen/Postern an nationalen und internationalen Konferenzen. Die wichtigsten Konferenzen mit IEK-3-Beteiligungen waren 2017 das 6th European PEFC & Electrolyser Forum in Luzern/Schweiz mit 4 Vorträgen, das 232nd ECS Meeting (The Electrochemical Society) in National Harbor/USA mit 3 Vorträgen, das SOFC-XV - 15th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells in Hollywood/USA mit 3 Vorträgen sowie die MODVAL 2017 – 14th Symposium on Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation in Karlsruhe mit 3 Vorträgen. 2018 beteiligte sich das IEK-3 mit 10 Beiträgen an der WHEC 2018 - 22nd World Hydrogen Energy Conference in Rio de Janeiro, Brasilien, an der 14th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies in Melbourne/Australien mit 3 Vorträgen, am 69th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry in Bologna/Italien mit 4 Vorträgen und am 13th European SOFC & SOE Forum 2018 in Luzern/Schweiz, mit 4 Vorträgen. 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 2017 und 2018 11 Doktorarbeiten (siehe Tab. 5) in den FuE-Schwerpunkten SOFC (1), HT-PEFC (4), BGS (1) und PEM-EL (4) sowie eine Dissertation zur Bewertung von zukunftsweisenden Energiesystemen fertiggestellt. Darüber hinaus prüfte Professor Stolten 2015 vier weitere Promotionsvorhaben externer Doktoranden erfolgreich.

Jahr		2017	2018
Publikationen	Referierte Journale ¹⁾	60	58
	Bücher und Journale	12	14
	Aufsatz in einem Buch	4	8
	Dissertationen ²⁾	3	8
Technologie- transfer	Laufende Drittmittelprojekte	40	37
	HGF-Initiativen & Fonds	3	3
	Patentanmeldungen	1	2
	Patenterteilungen	5	7
Ressourcen³⁾	Personal (PoF ⁴⁾ /Drittmittel)	120 (96/24)	123 (98/25)
Erläuterungen	¹⁾ nach ISI-Zitationsindex ²⁾ Interne Doktoranden ³⁾ Angaben in PJ/a ⁴⁾ PoF: Programmorientierte Förderung		

Tab. 5: Kerndaten des IEK-3 für 2017 und 2018

Zur Gewährleistung eines substanziellen Wissens- und Technologieaustauschs beteiligt sich das IEK-3 an zahlreichen nationalen und internationalen FuE-Projekten (2017: 40; 2018: 37, siehe Tab. 5), die von der Europäischen Kommission (EC; 2017: 5; 2018: 5), den Bundesministerien für Wirtschaft (BMWi; 2017: 12; 2018: 13), für Bildung und Forschung (BMBF; 2017: 3; 2018: 4), für Verkehr und digitale Infrastruktur (BMVI; 2017: 1; 2018: 1) und verschiedenen Ministerien der Länder Nordrhein-Westfalen und Bayern (2017: 4; 2018: 3) sowie der JARA Exzellenzinitiative (JARA; 2017: 2; 2018: 0) finanziell gefördert oder von der Wirtschaft (2017: 13; 2018: 11) finanziert wurden. Dabei übernahm das IEK-3 in einigen Projekten auch die Leitung und Koordination.

Mit der Entsperrung der HGF-Ausbauinvestitionen Ende 2017 konnte das IEK-3 mit den Arbeiten für das zentrenübergreifende Vorhaben EnergyLab 2.0 beginnen. Dies betraf die Detailplanung der Technikumshalle für zukünftige Wasserstoffexperimente und die Spezifikation und Auftragsvergabe einer MW-Elektrolyseanlage als ein Jülicher Baustein für zukünftige Power-to-Gas-Prozesse im Energy Lab 2.0. Dem gegenüber konnte die von acht HGF-Zentren getragene HGF-Initiative „Energie Systems 2050“ ihre ersten Arbeitsergebnisse im Frühjahr 2018 der ersten energiewirtschaftlichen Begutachtung unterbreiten. Darüber hinaus konnte das IEK-3 zur finanziellen Unterfütterung erfolgversprechender Innovationen mit Kommerzialisierungsaussichten zusätzliche Mittel für die Promotion eines Wissenschaftlers aus dem Jülicher Technologietransfer-Fonds erhalten. Weitere Bausteine zum geordneten Technologietransfer sind die zahlreichen Patentanmeldungen (2017: 1, 2018: 2) und Patenterteilungen (2017: 5, 2018: 7) im Berichtszeitraum (siehe Tab. 5).

Das IEK-3 beschäftigte im Berichtszeitraum zwischen 120 (2017) und 123 (2018) Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter (siehe Tab. 5), die zum einen aus Mitteln der Programmorientierten Förderung (PoF) der Helmholtz Gemeinschaft (HGF) und zum anderen aus Drittmitteln finanziert wurden. Für den zugrundeliegenden Berichtszeitraum war neben den Teilzeitbeschäftigten ein nennenswerter Teil des IEK-3-Personals weniger als ein Jahr angestellt, so dass sich die effektive Personalkapazität in 2017 auf 99 PJ/a und in 2018 auf 106 PJ/a belief.

6.4 Preise und Auszeichnungen

Für herausragende Leistungen bei der Bearbeitung eines wissenschaftlich-technischen Themas haben Wissenschaftler des IEK-3 im Berichtszeitraum eine Reihe interessanter Preise und Auszeichnungen erhalten.

2017

Borchersplakette der RWTH Aachen

Dissertation „Reduktion von Edelmetallen in der Wasserstoffelektrode bei der Polymerelektrolyt-Wasserelektrolyse“

Paul Paciok

Forschungspreis Wasserstoff.NRW 2017

Dissertation „Strom- und Gasmarktdesign zur Versorgung des deutschen Straßenverkehrs mit Wasserstoff“

Dr. Martin Robinus

Forschungspreis Wasserstoff.NRW 2017

Masterarbeit „Pfadanalyse zur großtechnischen Wasserstoff-Speicherung mit zentraler Rückverstromung“

Natalie Jessica Ebersbach

Forschungspreis Wasserstoff.NRW 2017

Masterarbeit „Techno-economical potential of reversible Solid Oxide Cells for autarkic Buildings and Districts“

Fritz Thomas Carl Röben

Best Paper Award 12th Conference of Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems – SDEWES

„Spatio-Temporal Optimization of a Future Energy System for Power-to-Hydrogen Applications in Germany“

Lara Welder

2. Preis Best Paper Award European Fuel Cell Conference & Exhibition in Neapel

„Optimized Electrolyzer Operation: Employing Forecasts of Wind Energy Availability, Hydrogen Demand, and Electricity Prices“

Fabian Grüger

2018

Borchersplakette der RWTH Aachen

Dissertation „Future Grid Load of the Residential Building Sector“

Dr. Leander Kotzur

Borchersplakette der RWTH Aachen

Dissertation „Quantitative Analyse der Trocknungsverläufe von Katalysatordispersionen“

Dr. Fabian Scheepers

Ehrenplakette der Fachhochschule Aachen

Bachelorabschluss mit herausragendem Ergebnis

Jennifer Groß

Ehrenplakette der Fachhochschule Aachen

Bachelorabschluss mit herausragendem Ergebnis

Joshua Stremme

6.5 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, Jürgen Mergel (März 2017 ausgeschieden)

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“

seit April 2017, Dr. M. Carmo

Operating Agent Annex 30 „Electrolysis“

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

seit 2015, Dr. P. Stenzel

Persönliches 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

TRENDS2017 - Transition to Renewable Energy Devices, Aachen

2017, Prof. D. Stolten

Konferenzleiter und Leiter des Organisationskomitees

2017, 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

GEE Gesellschaft für Energiewissenschaft und Energiepolitik

seit 2017, Dr. M. Robinius

Mitglied

VDI - Fachgesellschaft Fahrzeug- und Verkehrstechnik/Lenkungsgremium zum Thema "Antrieb und Energiemanagement"

seit 2017, Prof. D. Stolten

Mitglied

Kopernikusprojekt "ENavi"

seit 2017, Dr. T. Grube

Mitglied des Kompetenzteams Mobilität

6th International Conference on Advances in Energy Research, India

2017, Prof. D. Stolten

Mitglied International Advisory Committee

European Fuel Cell Conference & Exhibition - Piero Lunghi Conference EFC 2017, Italy

2017, Prof. D. Stolten

Mitglied Organizing Committee

Gutachtergremium für die Begutachtung des ZBT, Zentrum für Brennstoffzellen Technik in Duisburg

2018, Prof. D. Stolten

Mitglied der Arbeitsgruppe "Evaluation JRF (Johannes-Rau-Stiftung)"

6.6 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 2017 wirkte das IEK-3 an fünf Messen und Ausstellungen in Düsseldorf, Hannover, München und Stuttgart mit. Die Einzelheiten können der folgenden Auflistung entnommen werden:

2017

11 IRES 2017

14. – 16.03.2017, Düsseldorf

Nachhaltige Energie- und Rohstoffpfade

Hannover Messe 2017

24. - 28.04.2017, Hannover

Brennstoffzellen- und Elektroyseforschung

Intersolar 2017

31.05. – 2.06.2017, München

MW-Elektrolyseanlage als Systembeitrag für das Energy Lab 2.0

ECS30

9. - 11.10.2017, Stuttgart

Systemforschung für die Elektromobilität

SHELL Energie-Dialog H₂

11.12.2017, Düsseldorf

H₂ – Baustein der Sektorkopplung und Elektrokraftstoff

Alljährlicher Höhepunkt der Messtätigkeiten des IEK-3 ist der Gemeinschaftsstand Wasserstoff + Brennstoffzellen + Batterien anlässlich der Technologiemesse in Hannover (siehe Abb. 94). 2017 präsentierte das IEK-3 die neuesten Technologieentwicklungen auf den Gebieten der Brennstoffzellen- und Elektrolyseforschung. Mit serienreifen Reaktoren für die autotherme Reformierung, Wasser/Gas-Shift und katalytische Verbrennung der Entwicklungsstand bei der Brenngaserzeugung aus Diesel oder Kerosin gezeigt. Die neuesten HT-PEFC-Komponenten wurden von einer Bildschirmdarstellung über die dazugehörige Multiskalenmodellierung und –simulation begleitet. Daneben demonstrierten Zell- und Stack-Komponenten Aufbau und Funktion eines Systems mit keramischer Zelle, das je nach Bedarf als Brennstoffzelle oder als Elektrolyseur betrieben werden kann. Ein neuartiges Modell lieferte Einblicke in den Aufbau der funktionalen Schichten einer PEM-Elektrolysezelle. Eingebunden in die Landkarte der zukünftigen Energieversorgung auf der Rückwand des Messestands, zeigte die Verfahrens- und Systemanalyse des IEK-3 spezifische Analyseergebnisse für die Sektoren Verkehr, Industrie und Haushalt. Im Rahmen des sogenannten Technical Forum berichtete Professor Blum unter dem Titel „rSOC plant: efficient design and operation behavior“ von den neuesten Auslegungs- und Betriebsergebnissen einer Anlage mit einem Stack aus reversibel betreibbaren Festoxidzellen. Im parallel laufenden Public Forum stellte sich Herr Markus Reus den Fragen des Moderators zum Thema „Linking the power and transport sectors – A sector coupling scenario for Germany“.



Abb. 94: Hannover Messe 2017 - Jülicher Messestand und Betreuersteam

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

2018

Hannover Messe 2018

23. - 27.04.2018, Hannover

Brennstoffzellen- und Elektroyseforschung

Forschen:Gesellschaft:Zukunft

14.06.2018, Jülich

H2 – ein wichtiger Baustein der Sektorkopplung

22th World Hydrogen Energy Conference 2016

17. – 22.06.2018, Rio de Janeiro, Brasilien

Forschung für die effiziente Erzeugung und Nutzung von Wasserstoff

13th European SOFC & SOE Forum

3. - 6.07.2018, Luzern/Schweiz

Forschung für Energiewandler mit keramischem Elektrolyt

f-cell 2018

18. – 19.09.2018, Stuttgart

Energieforschung für die Elektromobilität

Unter dem Motto „Technologies & Systems Design for the Energy Transition“ präsentierte sich das IEK-3 auf der Hannover Messe 2018 (siehe Abb. 95). Das Spektrum der Exponate reichte von Zellkomponenten, Zellen und Stacks zur PEM-Elektrolyse, rSOC und PEFC bis hin zu einer Strömungszelle für die PEM-Elektrolyse im Quadratmetermaßstab sowie einem Strahlschlauchreaktor für die Synthese flüssiger Kraftstoffe. Auf den zeitgleich den Messebesuchern angebotenen Foren präsentierte Herr Dr. Grube die Ergebnisse einer Auftragsstudie unter dem Titel „Batteries and hydrogen – a comparative analysis of infrastructure costs“. Auf

dem Public Forum berichtete Herr Dr. Martin Müller von PEM-Elektrolyseuren aus Jülich - Komponenten zum Stack und vollständigen Systemen im großen kW-Maßstab.



Abb. 95: Hannover Messe 2018 - Jülicher Messestand und Betreuer team

6.7 Anfahrtsbeschreibung

6.7.1 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. 96 Anfahrplan 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.

6.7.2 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"

6.7.3 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. 97: Lageplan Forschungszentrum Jülich

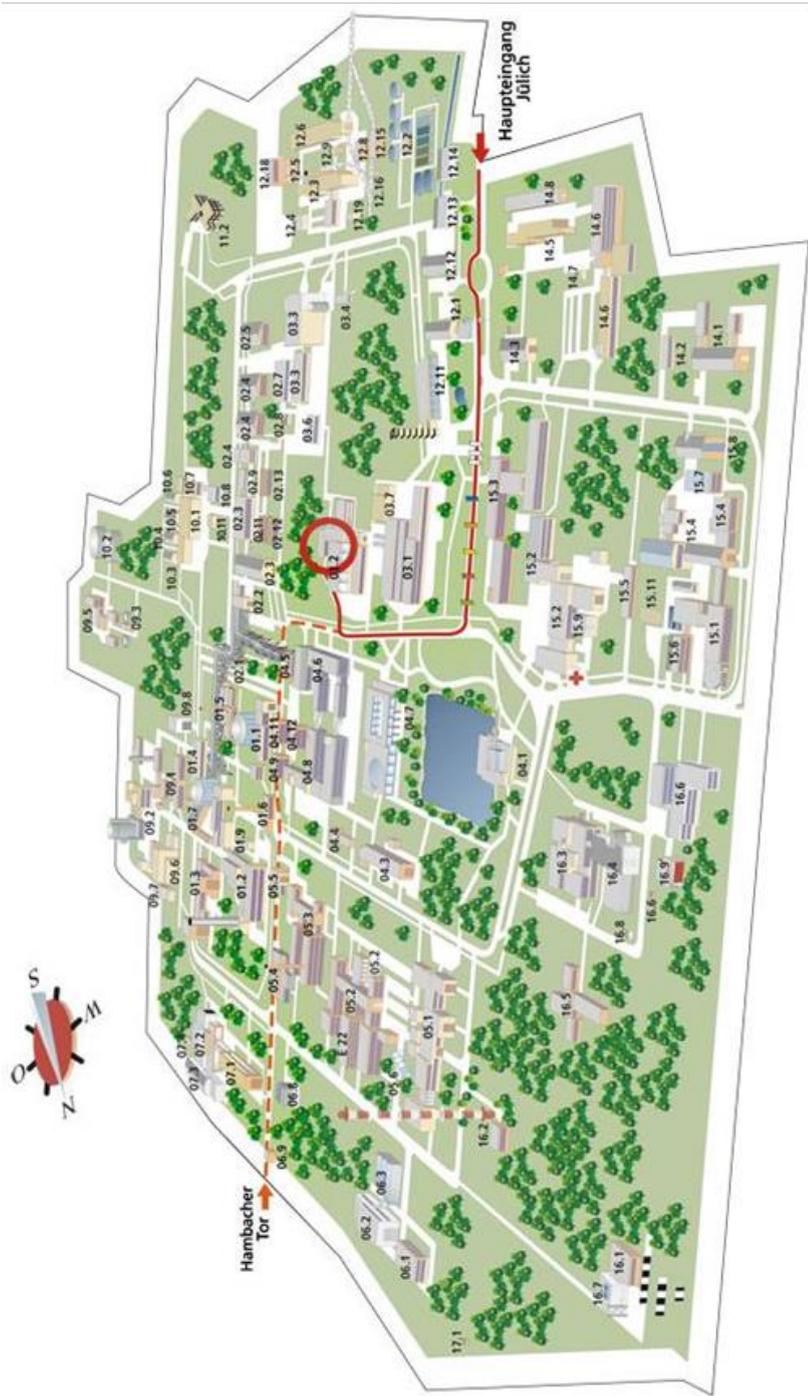


Abb 98: Lageplan Institut für Energie- und Klimaforschung, IEK-3: Elektrochemische Verfahrenstechnik, Helmholtz-Ring H8, Geb. 03.2

6.8 Abkürzungsverzeichnis

AAe	Alfa Aesar
acatech	Deutsche Akademie der Technikwissenschaften e.V.
AFM	Rasterkraftmikroskopie
AGEF	Arbeitsgemeinschaft Elektrochemischer Forschungsinstitutionen
APU	Bordstromversorgungseinheit (engl.: Auxiliary Power Unit)
AP-XPS	Analysemethode zur Charakterisierung von Materialien und physikochemischen Prozessen unter Umgebungsbedingungen (engl.: Appearance Potential X-ray Photoemission Spectroscopy)
ASC	Anodengetragene Zelle (engl.: Anode-Supported Cell)
ASME	Amerikanische Gesellschaft der Maschinenbau-Ingenieure (engl.: American Society of Mechanical Engineers)
ASR	Flächen spezifischer Widerstand (engl.: Area Specific Resistance)
ATR	Autotherme Reformierung
BASF	Badische Anilin- & Soda-Fabrik: Deutscher Chemiekonzern mit Sitz in Ludwigshafen
BET	Analyseverfahren zur Größenbestimmung von Oberflächen (Brunauer-Emmett-Teller)
BGS	Abteilung Brenngaserzeugung und Systeme
Bio-CH	Biologisch erzeugtes Methan
BMBF	Bundesministerien für für Bildung und Forschung
BMVI	Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur
BMWi	Bundesministerien für Wirtschaft
BPP	Bipolarplatte (engl.: Bipolar Plates)
BREZEL	Expertenkommittee Brennstoffzelle des Vereins Deutscher Ingenieure (VDI)
BTL	Biomasse zu Flüssigkraftstoff (engl.: Bio-To-Liquid)
BZ	Brennstoffzelle
CAB	Katalytbrenner (engl.: Catalytic Burner)
CAN	Centrum für Angewandte Nanotechnologie
CAPM	Preismodell für Kapitalgüter (engl.: capital asset pricing model)
CC-MEA	Catalyst coated – membrane electrode assembly
CCM	Katalysatorbeschichtete Membran (engl.: Catalyst Coated Membrane)
CFD	Rechnergestützte Fluidodynamik (engl.: Computational Fluid Dynamics)
CFD	Rechnergestützte Fluidodynamik (engl.: Computational Fluid Dynamics)
CGO	Cerium-Gadoliniumoxid: Ce _{0.8} Gd _{0.2} O _{2-δ}
CP	Credit Points
CPLEX	Programmsystem zur Modellierung & Lösung von Optimierungsproblemen
CS	Cassetten-Substrat-Konzept
CV	Cyclovoltametrie
DBG	Deutsche Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie
DC	Gleichstrom (engl.: Direct Current)
DC/DC-Netzen	Gleichstrom/Gleichstrom
DECHEMA	Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.
DLR	Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt
DME	Dimethylether
DMFC	Direkthethanol-Brennstoffzellen (engl.: Direct Methanol Fuel Cell)
DOSY	Abtrennung des Spektrums nach Diffusionskoeffizienten (engl.: Diffusion)

	Ordered Spectroscopy)
DPG	Deutsche Physikalische Gesellschaft e. V.
DRT	Verteilungsfunktion der Relaxationszeiten (engl.: Distribution of Relaxation Times)
DSC	Differenzthermoanalysator (engl.: Differential Scanning Calorimeter)
DTU	Dänemarks Technische Universität
DWV	Deutscher Wasserstoff- und Brennstoffzellen-Verband
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
EFC	European Fuel Cell Conference & Exhibition
EIS	Elektrochemische Impedanzspektroskopie
ELKE	Projekt zur Entwicklung leistungsoptimierter und kostengünstiger Elektrodenstrukturen für die alkalische Elektrolyse
EU	Europäische Union
FEM	Finite Elemente Methode
FH Aachen	Fachhochschule Aachen
FINE	Framework for Integrated Energy System Assessment
FOB	Festoxid-Brennstoffzelle
FTIR	Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometrie (engl.: Fourier-transform infrared spectroscopy)
FuE	Forschung und Entwicklung
FVEE	Forschungsverbund Erneuerbare Energie
FZJ	Forschungszentrum Jülich GmbH
GC	Gaschromatograph
GC/MS	Gaschromatograph gekoppeltes Massenspektrometer
GDAL	Bibliothek für geobasierte Daten (engl.: Geospatial Data Abstraction Library)
GDch	Gesellschaft Deutscher Chemiker
GDL	Gasdiffusionsanlage
GEE	Gesellschaft für Energiewissenschaft und Energiepolitik
GFZ	Deutsches GeoForschungsZentrum
GLAES	Geospatial Land Availability for Energy Systems
GW	Gigawatt
HAADF	Bildgebende Analysemethode (engl.: High-Angle Annual Dark Field)
HT-PEFC	Hochtemperatur-Polymerolektrolyt-Brennstoffzellen
HT-SOC	Hochtemperatur-Festoxidzelle (engl.: High-temperature Solid Oxide Cell)
HC Kerosin	Kohlenwasserstoff-Kerosin
HGF	Helmholtz-Zentrum Berlin
HIFIPEFC	BMW-gefördertes Verbundvorhaben zur Charakterisierung ionischer Flüssigkeiten für den Einsatz als Elektrolyt in Brennstoffzellen mit Polymermembran
HiKAB	Hierarchische Kompositnanopartikelsysteme zur Anwendung in Brennstoffzellen
HPC	Hochleistungsrechner (engl.: High Performance Computer)
H-REM	Hochauflösendes Rasterelektronenmikroskop

HT-PEM	Hochtemperatur-Polymerelektrolytmembran
HTS	Hochtemperatur-Shiftstufen
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)
IAS-JSC	Institute for Advanced Simulation am Jülich Supercomputing Center
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-3	Institut für Energie- und Klimaforschung - Elektrochemische Verfahrenstechnik
IEK-9	Institut für Energie- und Klimaforschung - Grundlagen der Elektrochemie
IL	Ionische Flüssigkeit (engl.: Ionic Liquid)
IMechE	Institution für Maschinenbau-Ingenieure (engl.: Institution of Mechanical Engineers)
IQ-BZ	Initiative Qualifizierung Brennstoffzelle
ISE	Internationale Gesellschaft für Elektrochemie (engl.: International Society of Electrochemistry)
JARA	Jülich Aachen Forschungsallianz (engl.: Jülich Aachen Research Alliance)
JSC	Jülicher Großrechnerzentrum (engl.: Jülich Supercomputing Centre)
JuLab	Jülicher Schülerlabor
JURECA	Jülicher Großrechnerforschung für Exascale-Cluster (engl.: Jülich Research on Exascale Cluster Architectures)
KIT / IMVT	Karlsruher Institut für Technologie / Institut für Mikroverfahrenstechnik
KOH	Kaliumhydroxid
KWK	Kraft-Wärme-Kopplung
LHV	Heizwert (engl.: Lower Heating Value)
LNMO	Spinellartiges Kathodenmaterial $\text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_4$
LOHC	Flüssige organische Wasserstoffträger (engl.: Liquid Organic Hydrogen Carriers)
LP	Linear Programming
LSCF	Lanthanum-Strontium-Eisen-Kobalit
LT-PEFC	Niedertemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle (engl.: Low-temperature Polymer Electrolyte Fuel Cell)
LTS	Niedertemperatur-Shiftstufen
MCFC	Schmelzkarbonat-Brennstoffzelle (engl.: Molten Carbonat Fuel Cell)
MEA	Membran-Elektroden-Einheiten (engl.: Membrane Electrode Assembly)
MEMS	Mikroelektromechanisches System (engl.: Micro-Electro-Mechanical)
METIS	Modelle für die Energietransformation und Systemintegration (engl.: Models for Energy Transformation and Integration Systems)
MODEX-NET	Modellvergleich von Stromnetzmodellen im europäischen Kontext
N.ERGHY	Gesellschaft der Forschungseinrichtungen in der europäischen Wasserstoff und Brennstoffzellen Initiative
n-CT	Röntgentomographie
NDIR	Nichtdispersiver Infrarotanalysator (engl.: Nondispersive Infrared Adsorption Analyser)
NESTOR	National Energy System model with integrated Sector coupling

NOW	Nationale Organisation Wasserstoff- und Brennstoffzellentechnologie GmbH
NRW	Nordrhein-Westfalen
NT-PEFC	Niedertemperatur Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle
NTS	Niedertemperatur-Shiftstufe
NUTS	Nomenclature des unités territoriales statistiques
OCV	Offene Zellspannung
ODD	obere durchschnittliche Druckabfallwert
OER	Sauerstoff-Entwicklungsreaktion
OME	Oxymethylenether
OpenFOAM	Freies Simulationssoftwarepaket für kontinuumsmechanische Probleme (eng.: Open Source Field Operation and Manipulation)
ORR	Sauerstoffreduktionsreaktion (engl.: Oxygen Reduction Reaction)
P2X	Power-to-X
PAFC	Phosphorsäure-Brennstoffzelle (engl.: Phosphor Acid Fuel Cell)
PBI	Polybenzimidazol
PCEC	protonenleitenden Elektrolysezelle
PCFC	Protonleitende Brennstoffzelle
PCL	Physikalisch-Chemisches Labor
PEFC	Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen (engl.: Polymer Electrolyte Fuel Cell)
PEM	Polymerelektrolytmembran
PEM-EL	Polymerelektrolytmembran-Elektrolyse
PET	Positronen-Emissionstomographie
PIL	Protonenleitende, ionische Flüssigkeiten (engl.: Proton Conducting Ionic Liquids)
PKW	Personenkraftwagen
PoF	Programmierorientierten Förderung der HGF
ProMINat	Studierendenakademie
PSI	Paul Scherrer Institut
PTF	Power-to-Fuel-Prozessen
PTFE	Polytetrafluoroethylen
PtG	Strom zu Gas (engl.: Power-to-Gas)
PTX	Power-to-X
PV	Photovoltaik
PV-BESS	Photovoltaik-Batteriespeichersystemen
Raman/IR	Raman/Infrarot-Spektroskopie
RDE	rotierende Platinscheibenelektrode (engl.: Rotating Disk Electrode)
REM	Rasterelektronenmikroskop
REM/EDX	Rasterelektronenmikroskop mit Energiedispersive Röntgenspektroskopie
rSOC	Reversible Festoxid-Brennstoffzelle (engl.: Reversible Solid Oxide Cell)
RWTH	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen
RWÜ	Rohrbündel-Wärmeübertrager
SCT	Segmentierte Zellentechnologie (engl.: Segmented Cell Technology)
SDEWES	Conference of Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems
SEI	Festelektrolyt-Grenzschicht (engl.: Solid Electrolyte Interface)
SFC	SFC Energy: Börsennotierter Hersteller von Brennstoffzellen mit Sitz in Brunnthal bei München
SGL	SGL Carbon SE: Internationaler Hersteller von Produkten aus Kohlenstoff mit Sitz in Wiesbaden

SOC	Festoxidzelle (engl.: Solid Oxide Cell)
SOE	Festoxidelektrolyse (engl.: Solid Oxide Electrolysis)
SOFC	Festoxid-Elektrolysezelle (engl.: Solid Oxide Electrolysis Cell)
sPEEK	sulfonierte Polyetheretherketone
SRMS	Ortsaufgelöste Massenspektrometrie (engl.: Spatial Resolution Mass Spectroscopy)
SS	Sommersemester
SSI-21	Internationale Konferenz für Festkörper-Ionen-transport (engl.: International Conference of Solid State Ionics)
STEM	Rastertransmissionselektronenmikroskopie
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)
SWS	Sommer-/Wintersemester
TAP	Zeitaufgelöste Analyse von Reaktionsprodukten (engl.: Temporal Analysis of Products)
TEM	Transmissionselektronenmikroskop
TESYS	Projekthaus Technikbasierte Energiesystemanalyse
TG	Thermogravimetrische Analyse
TGA	Thermogravimetrie-Analysator
TMFB	Maßgeschneiderte Kraftstoffe aus Biomasse (engl.: Taylor Made Fuels from Biomass)
TRENDS	Konferenz für den Übergang zu erneuerbaren Energieeinrichtungen und -systemen (engl.: Transition to Renewable Energy Devices and Systems)
TSA	Technoökonomische Energiesystemanalyse
TU Berlin	Technische Universität Berlin
UDD	untere durchschnittliche Druckabfallwert
UNIFAC	Verfahren zur Abschätzung von Aktivitätskoeffizienten (engl.: Universal Quasichemical Functional Group Activity Coefficients)
US DOE	Department of Energy, Ministerium für Energie der U.S.A.
USV	unterbrechungsfreien Stromversorgungen
VDE	Verband der Elektrotechnik Elektronik Informationstechnik e. V.
VDI	Verein Deutscher Ingenieure
VDI-GVC	Verein Deutsche Ingenieure – Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen
VEL	Verfahrenstechnik Elektrolyse
VOF	Verfahren der numerischen Strömungsmechanik (engl.: Volume-of-Fluid)
VSA	Abteilung Verfahrens- und Systemanalyse
WACC	Methode zur Unternehmensbewertung auf der Grundlage gewichteter durchschnittlicher Kapitalkosten (engl.: Weighted Average Cost of Capital)
WGS	Wasser-Gas Shift Reaktion
WILEY-VCH	WILEY-Verlag Chemie
WPS	Nasspulverspritzen (engl.: Wet Powder Spraying)
WS	Wintersemester
WTW	Well to Wheel
XRD	Röntgenbeugung (engl.: X-Ray Diffraction)
XRR	Reflektometrie
ZEA-3	Zentralinstitut für Engineering, Elektronik und Analytik- Analytik

Band / Volume 452

**Quantitative Analyse der Trocknungsverläufe von
Katalysatordispersionen**

F. Scheepers (2019), VIII, 191 pp

ISBN: 978-3-95806-384-6

Band / Volume 453

**Neue Optionen für einen wirtschaftlichen Betrieb von Wasserstoffzügen
durch Nutzung der LOHC-Technologie?**

P. Wasserscheid, T. Grube, D. Sternfeld, M. Essl, M. Robinius, D. Stolten
(2019), II, 88 pp

ISBN: 978-3-95806-386-0

Band / Volume 454

**Reformierung von BtL-Kraftstoffen für die HT-PEFC
in luftfahrttechnischen Systemen**

C. Wilbrand (2019), IV, 312 pp

ISBN: 978-3-95806-387-7

Band / Volume 455

**Entwicklung von thermischen Spritzprozessen für
fortschrittliche Schutz- und Funktionsschichten**

G. Mauer (2019), vi, 57 pp

ISBN: 978-3-95806-388-4

Band / Volume 456

**Columnar Structured Thermal Barrier Coatings Deposited
by Axial Suspension Plasma Spraying**

D. Zhou (2019), VI, 126 pp

ISBN: 978-3-95806-391-4

Band / Volume 457

**Modellierung zeitlich aufgelöster Ladeenergienachfragen von
batterie-elektrischen Fahrzeugen und deren Abbildung in einem
Energiesystemmodell**

J. F. Linßen (2019), VIII, 189 pp

ISBN: 978-3-95806-395-2

Band / Volume 458

**Synthesis and Analysis of Spinel Cathode Materials for
High Voltage Solid-State Lithium Batteries**

A. Windmüller (2019), iv, 142 pp

ISBN: 978-3-95806-396-9

Band / Volume 459

**Monazite-type ceramics as nuclear waste form:
Crystal structure, microstructure and properties**

Y. Arinicheva (2019), 194 pp

ISBN: 978-3-95806-397-6

Band / Volume 460

**Coupling a Solid Oxide Fuel Cell with a Biomass Gasifier:
Degradation Mechanisms and Alternative Anode Materials**

H. Jeong (2019), II, 112 pp

ISBN: 978-3-95806-398-3

Band / Volume 461

Model-based Source Partitioning of Eddy Covariance Flux Measurements

A. Klosterhalfen (2019), XVI, 132 pp

ISBN: 978-3-95806-401-0

Band / Volume 462

**Entwicklung von großflächigen PECVD-Prozessen zur kontrollierten,
homogenen Abscheidung dünner Siliziumschichten für die Photovoltaik**

B. O. Grootoink (2019), 154 pp

ISBN: 978-3-95806-402-7

Band / Volume 463

**Simulation of Transport Processes through an Asymmetric Gas
Separation Membrane**

U. V. Unije (2019), xiv, 101 pp

ISBN: 978-3-95806-403-4

Band / Volume 464

**Development, calibration and deployment of an airborne chemical
ionization mass spectrometer for trace gas measurements**

T. Khattatov (2019), 14, 125 pp

ISBN: 978-3-95806-404-1

Band / Volume 465

IEK-3 Report 2019

Maßgeschneiderte Energieumwandlung für nachhaltige Kraftstoffe

D. Stolten, B. Emonts (Eds.) (2019), 171 pp

ISBN: 978-3-95806-410-2

Weitere *Schriften des Verlags im Forschungszentrum Jülich* unter
<http://www.zb1.fz-juelich.de/verlagextern1/index.asp>

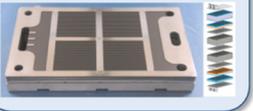
Der Transportsektor hat einen erheblichen Minderungsbedarf bei dem aus der Verbrennung fossiler Kraftstoffe entstehenden Kohlendioxid. Mit der auf die Wasserelektrolyse fokussierten Technologieforschung sowie durch die technoökonomische Bewertung zukünftiger Verkehrslösungen hat das IEK-3 im Berichtszeitraum den technologischen Reifegrad der fortschrittlichen Wasserelektrolyse verbessert sowie bahnbrechende Erkenntnisse in der Prozesstechnik für die Erzeugung von synthetischen Kraftstoffen aus H_2 und CO_2 erarbeitet sowie eine detaillierte Analyse zum Infrastrukturvergleich der batterie- und brennstoffzellenbasierten Mobilität erstellt.

Niedertemperatur-Elektrolyse



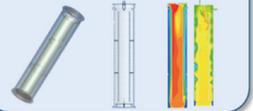
Die Wasserelektrolyse bei Temperaturen von etwa 70 °C erlaubt einen hochdynamischen Betrieb mit schnellen An- und Abfahrprozeduren. Der Reifegrad bei Elektrolyseuren mit Polymerelektrolytmembran oder Kalilauge ermöglicht den Aufbau großer Anlagen im MW-Maßstab. Derzeitige und zukünftige FuE-Arbeiten konzentrieren sich auf die Verbesserung der Leistungsfähigkeit, die Erhöhung der Lebensdauer und die Reduzierung der Investitions- und Betriebskosten. Durch das Ausrollen großer Anlagen zur elektrochemischen H_2 -Erzeugung wird die Integration in das Energiesystem erprobt.

Hochtemperatur-Elektrolyse



Die Dampfelektrolyse bei Temperaturen bis etwa 800 °C ermöglicht die Nutzung überschüssiger Hochtemperaturwärme häufig aus Industrieprozessen. Der Reifegrad bei Elektrolyseuren mit Festoxidzellen orientiert sich an dem entsprechender Brennstoffzellen und ermöglicht den Anlagenaufbau im kW-Maßstab. Derzeitige und zukünftige FuE-Arbeiten konzentrieren sich auf die Auflösung leistungs- und lebensdauerreduzierender Materialveränderungen, die Ausgestaltung eines reversiblen Systems für Elektrolyse- und Brennstoffzellenbetrieb sowie die Erreichung anwendungsrelevanter Kostenziele.

Power-to-Fuel-Prozesse



Die gezielte Verarbeitung von Wasserstoff aus erneuerbaren Quellen und Kohlendioxid aus klimaneutralen Quellen liefert einen synthetischen, flüssigen Kraftstoff, der in seiner idealen Form heutiges Kerosin oder Diesel substituiert und gleichzeitig ohne schädliche Reststoffe verbrennt. Mit den Auslegungswerkzeugen und -methoden für die Gestaltung eines autothermen Reformers, WGS-Reaktors und Katalytbrenners soll ein Synthesereaktor konzipiert werden, der die beiden Ausgangsgase H_2 und CO_2 mit hoher Selektivität und geringen Umwandlungsverlusten zu einem Synfuel synthetisiert.

Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 465

ISBN 978-3-95806-410-2