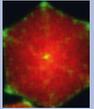
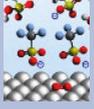
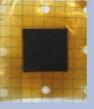
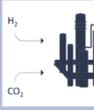
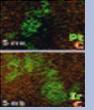
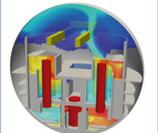
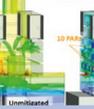


FuE-Themen	Aktivitäten						Anwendungen
Wasserelektrolyse 	Elektrokat  Projekte: Nest-PEL	GDL  Projekte: NextH2	CCM/MEA  Projekte: HyInnoCells	BPP Stack  Projekte: LLEC	System  Projekte: PEP.IN	Regelung  Projekte: HyInnoLyse	Verkehr  Industrie Haushalt 
PEM-Brennstoffzelle 	Elektrolyte  Projekte: HIFI-PEFC	Membran  Projekte: QM-GDL	Einzelzellen  Projekte: Cobip	GDL  Projekte: HT-PEMFCwLaE	BBP 	Stack Strömungsmesszelle 	FZ-Antrieb  Quelle: Daimler
Power-to-Fuel 	Prozessanalyse  Projekte: HyInnoSOFC	Synkat  Projekte: HyInnoChem	Reaktorauslegung & -test  Projekte: PtBioJetFuel				Verkehr 
Wasserstoffsicherheit 	Sicherheitsexperimente  Projekte: LLEC	Strömungssimulation  Projekte: STACY	Sicherheitskonzepte  Projekte: HyValue				Verkehr  Industrie Haushalt 

IEK-14 Report 2022

Forschung für die Energiewende und den Wandel im Rheinischen Revier

Bernd Emonts (Hrsg.)

Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 588

ISBN 978-3-95806-652-6

Forschungszentrum Jülich GmbH
Institut für Energie- und Klimaforschung
Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-14)

IEK-14 Report 2022

Forschung für die Energiewende und den Wandel im Rheinischen Revier

Bernd Emonts (Hrsg.)

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

Band / Volume 588

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-652-6

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

Herausgeber
und Vertrieb: Forschungszentrum Jülich GmbH
 Zentralbibliothek, Verlag
 52425 Jülich
 Tel.: +49 2461 61-5368
 Fax: +49 2461 61-6103
 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 2022

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band / Volume 588

ISSN 1866-1793
ISBN 978-3-95806-652-6

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



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

Vorwort	2
1 Aus- und Weiterbildung	4
1.1 Ausbildung an Hochschulen	6
1.2 Beiträge für die Information, Weiterbildung und Qualifizierung	9
2 Wissenschaftlich-technische Berichte	12
2.1 FuE-Ergebnisse aus dem Arbeitsbereich Wasserelektrolyse	14
2.2 FuE-Ergebnisse aus dem Arbeitsbereich Wasserstoffnutzung	26
3 Besondere Ergebnisse	36
3.1 Techno-ökonomische Bewertung von Verfahren zur Herstellung von Kraftstoffen aus H ₂ und CO ₂	38
3.2 Machine Learning bei der Modellierung der Dynamik von Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen	39
3.3 Eine experimentelle Untersuchung des Ethanol-Upgradings zu Iso-Butanol auf NiPt/C-Katalysatoren in einem Autoklavenreaktor	45
4 Ausblick auf neue FuE-Vorhaben	46
4.1 Hochtemperatur-PEM-Brennstoffzellen mit in Polymermembranen immobilisierten protischen ionischen Flüssigkeiten als Elektrolyt	48
4.2 HyInnolyse: Dynamik, gekoppelte Systeme und Wasserstoffspeicher und HyInnoCells: Produktion elektrochemischer Zellen	49
4.3 PEP.IN: Industrialisierung der PEM-Elektrolyseproduktion – Produktionsauslegung	50
4.4 QM-GDL: GDL-Qualitätssicherung für den Markthochlauf	51
4.5 Ermittlung von räumlich aufgelösten Konzentrationsprofilen für die Edukte und Produkte im Reaktor für den MtG-Prozess im Projekt Decartrans	52
4.6 HYINNOCHEM: Methanolsynthese aus grünem Wasserstoff	53
4.7 HYINNOSOFC: Hochtemperatur-Brennstoffzellen mit flexibler Brennstoffnutzung für eine unabhängige Energieversorgung	54
4.8 Demonstrationsprojekt „NRW-Revier-Power-to-BioJetFuel“	55
4.9 Projekt STACY: Towards Safe Storage and Transportation of Cryogenic Hydrogen	57
5 Zahlen, Daten und Fakten	58
5.1 Das Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-14)	60
5.2 Abteilungskompetenz im Überblick	63
5.3 Publikationen, Technologietransfer und Ressourcen	67
5.4 Preise und Auszeichnungen	70
5.5 Gremienarbeiten	71
5.6 Anfahrtsplan	75
5.6 Abkürzungsverzeichnis	78

Vorwort

Liebe Leser,

die Corona-bedingten Einschränkungen haben auch den Forschungsbetrieb des IEK-14 im Berichtszeitraum 2020/2021 erheblich beeinträchtigt. So wurden zahlreiche Projektabschlüsse nur mit erheblichen Verzögerungen erreicht, die Teilnahme als Referent:in an Präsenzveranstaltungen wurde zeitweise bzw. ortsorientiert eingestellt und die Arbeiten in Labor- und Büroräumen mussten einem strengen Anwesenheitsplan unterzogen werden. Dem gegenüber sind die digitalbasierten Arbeitswerkzeuge mehr und mehr in den Fokus gerückt und haben zu einem ergänzenden Arbeitsansatz geführt, der uns z.B. mit den Optionen des Homeoffice und der internetbasierten Konferenzen auch über Corona hinaus weiter sehr effektiv begleiten wird.

Ereignisse, die sich im Berichtszeitraum auf die Struktur des IEK-14 ausgewirkt haben, sind die Teilung des ehemaligen IEK-3 und die Versetzung von Fachabteilungen in andere Institutsbereiche. Die Aufteilung des ehemaligen IEK-3 in zwei neue Institutsbereiche resultiert in die Weiterführung des neuen IEK-3 unter der Leitung von Prof. Stolten mit der Ausrichtung auf Technoökonomische Systemanalyse und in die Neugründung des IEK-14 unter der kommissarischen Leitung von Prof. Peters mit der Ausrichtung auf Elektrochemische Verfahrenstechnik. Darüber hinaus wurden die Abteilung Festoxid-Wandler vom IEK-14 ins IEK-9 sowie die Abteilung Sicherheitsforschung vom IEK-6 ins IEK-14 versetzt. Als Folge der strukturellen Veränderungen hat sich das IEK-14 nun auf den beiden Arbeitsbereichen Wasserelektrolyse mit Elektrolyse- und Brennstoffzellenforschung sowie Wasserstoffnutzung mit Kraftstoffsynthese und Wasserstoffsicherheit neu aufgestellt.

Die Elektrolyseforschung des IEK-14 verfolgt drei unterschiedliche Technologien der elektrochemischen Wasserspaltung. Bei der alkalischen Elektrolyse soll durch eine erhöhte Betriebstemperatur der Wirkungsgrad weiter gesteigert werden. Die Polymerelektrolytmembran (PEM) Elektrolyse wird durch gezielte Forschungs- und Entwicklungsansätze zur Katalysatorreduzierung und Alterungsminderung sowie zum Zelldesign und zur MEA-Fertigung für den großtechnischen Einsatz weiter ertüchtigt werden. Ein dritter vielversprechender Elektrolysetyp ist die Anionenaustauschmembran (AEM) Technologie, die ohne kostspielige Edelmetallkatalysatoren und Korrosionsschutz der Bipolarplatten auskommt. Anfang 2021 konnte nach Übergabe des H₂-Technikums ein vielseitig nutzbarer Teststand für PEM-Elektrolysestacks der MW-Klasse in Betrieb genommen werden. Diese Einrichtung zur großtechnischen H₂-Erzeugung stellt die Kernkomponente für die wasserstoffbasierte Energieforschung des Living Lab Energy Campus (LLEC) dar und ist der Ausgangspunkt für zukünftige Systemverbindungen zum H₂-Transport z.B. mittels Pipeline sowie zur H₂-Speicherung z.B. mittels flüssiger, organischer H₂-Träger (LOHC), deren Einsatz untersucht und optimiert werden soll.

Die Kraftstoffsynthese konnte auf den Ergebnissen der entsprechenden Verfahrensanalysen und den Ressourcen der Abteilung Brenngaserzeugung aufgebaut und mit ersten vielversprechenden Ansätzen und Forschungsergebnissen weiterentwickelt werden. Ressourcen- und energiesparende Umwandlungspfade für e-Fuels stehen weiter im Fokus der FuE-Bemühungen. Die Wasserstoffsicherheit ist eine logische Ergänzung des am IEK-14 vorhandenen FuE-Portfolios und entwickelt sich hin zur Bereitstellung von Sicherheitskonzepten und –einrichtungen für beliebige H₂-Anwendungen. Eine erste nichtnukleare Projektaktivität beschäftigt sich mit dem sicheren Transport von flüssigem H₂ durch Küstenschiffe.

Durch die Zielsetzungen sowohl des HGF-Programms „Materialien und Technologien für die Energiewende, MTET“ als auch der auf Energiewende und Wandel im rheinischen Revier ausgerichteten Förderprogramme, an denen sich das IEK-14 substantiell beteiligt hat, konnte das IEK-14 seine Technologieforschung und –entwicklung auf Wasserstoff orientieren und damit auf eine klimaneutrale Energiebereitstellung fokussieren.

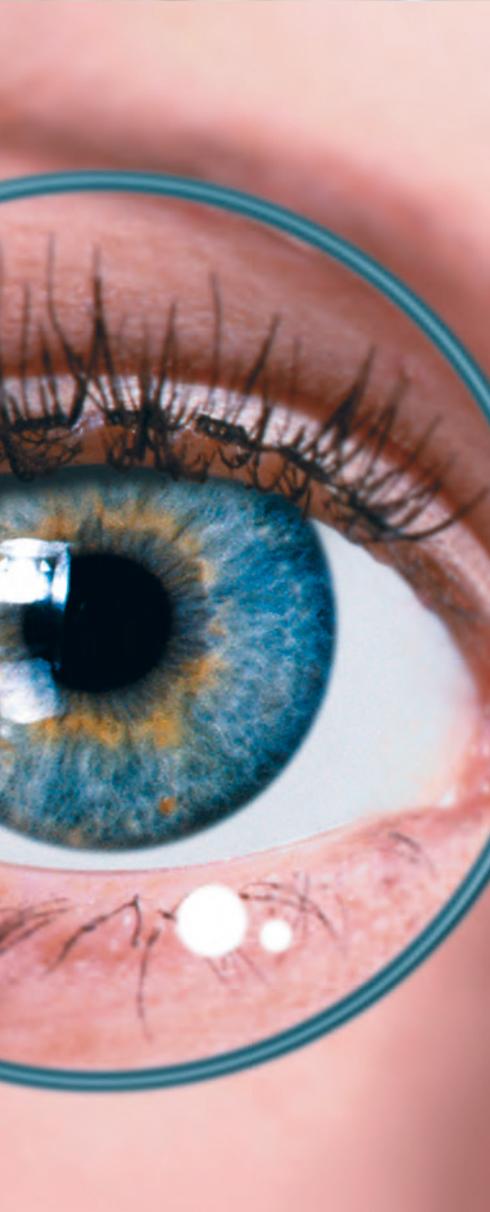


Jülich, im November 2022

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'R. Peters'.

Prof. Dr.-Ing. Ralf Peters





1

Bildung

Aus- und Weiterbildung

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

1.1 Ausbildung an Hochschulen

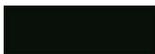
Die Lehre an Hochschulen ist im IEK-14 ein fundamentaler, zusätzlicher Bestandteil der Tätigkeiten ausgewählter, wissenschaftlicher Mitarbeiter neben der Forschungs- und Entwicklungsarbeit. Im Rahmen des Jülicher Modells verfügt das IEK-14 über eine gemeinsame W2-Berufung mit der RWTH Aachen, die durch Prof. Dr. rer. nat. Werner Lehnert an der Fakultät für Maschinenwesen wahrgenommen wird. Dr. Uwe Reimer unterstützt Professor Lehnert bei der Durchführung von vorlesungsbegleitenden Übungen. Darüber hinaus wird von Dr. Korte eine Lehrverpflichtung als Privatdozent an der Fakultät für Naturwissenschaften der RWTH Aachen wahrgenommen. Einen weiteren Lehrauftrag erfüllt Dr.-Ing. Martin Müller an der Ruhr-Universität Bochum.



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



<https://www.ruhr-uni-bochum.de/>



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

FH AACHEN
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Abb. 1: Hochschulen mit Lehrbeiträgen von IEK-14-Wissenschaftlern

Eine weitere W2-Berufung mit der Fachhochschule Aachen Standort Jülich wird von Prof. Dr.-Ing. Ralf Peters ausgeübt. Dr. Fabian Scheepers nimmt an der FH Aachen in Jülich einen Lehrauftrag wahr. Abbildung 1 liefert die Kontaktdaten zu den drei Hochschulen, an denen Wissenschaftler des IEK-14 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 bis zu 30 Studierende. Zusätzlich leisten die Wissenschaftler des IEK-14 einen nennenswerten Beitrag zur Betreuung von Studien-, Bachelor-, Master- und Doktorarbeiten. Bezogen auf den Berichtszeitraum 2020 und 2021 wurden 2 bzw. 3 Bachelor-, 24 bzw. 31 Master- und 9 bzw. 7 Doktorarbeiten erfolgreich abgeschlossen.

1.1.1 Lehrveranstaltungen von Privatdozenten und Hochschullehrern mit Berufung

Der folgenden Tabelle 1 können die wichtigsten Koordinaten der von Hochschullehrern des IEK-14 ausgerichteten Lehrveranstaltungen entnommen werden.

Tab. 1: Lehrveranstaltungen von Privatdozenten und Hochschullehrern mit Berufung

Name	Thema	Art/Umfang Semester		Hochschule
Prof. Dr. W. Lehnert	Modellierung in der Elektrochemischen Verfahrenstechnik	V/2 Ü/2	WS	RWTH 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
PD Dr. C. Korte	Physikalische Chemie I für Chemie (Lehramt) (V), Quantenmechanik	V/2 (Ü/1)	WS	RWTH Aachen

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. Für die im Wintersemester angebotene Lehrveranstaltung waren zwischen 26 Studenten (2020) und 20 Studenten (2021) angemeldet.

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 seit 2019 ein Wahlfach.

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 waren zwischen 28 Studenten (2020) und 24 Studenten (2021) angemeldet.

1.1.2 Lehrveranstaltungen von Lehrbeauftragten an Hochschulen

Der folgenden Tabelle 2 können die wichtigsten Koordinaten der von Lehrbeauftragten des IEK-14 ausgerichteten Lehrveranstaltungen entnommen werden.

Tab. 2: Lehrveranstaltungen von Lehrbeauftragten an Hochschulen

Name	Thema	Art/Umfang Semester		Hochschule
Dr. M. Müller	Elektrochemische Energiewandler	V/2	WS	Ruhr-Univ. Bochum
Dr. F. Scheepers	Grundlagen der Elektrotechnik (Labor)	P/4	WS	FH Aachen Standort Jülich

Elektrochemische Energiewandler

Die Lehrveranstaltung vermittelt grundlegende Inhalte über Aufbau, Funktion und Stand elektrochemischer Energiewandler wie Brennstoffzelle und Elektrolysezelle. Hierzu werden zunächst die thermodynamischen Grundlagen dieser Wandler erklärt. Darauf aufbauend werden unterschiedliche Zell- und Zellstapelaufbauten vorgestellt und diskutiert. Es wird insbesondere auf die komplexen Wechselwirkungen innerhalb solcher Systeme eingegangen, diese sind geprägt von diffusiven Transportvorgängen in porösen Schichten, den elektrischen Eigenschaften der Komponenten (Kontaktierung und Leitung), der elektrochemischen Umsetzung an Katalysatorschichten und des ionischen Transportes im Elektrolyten. Anhand technisch realer Systeme werden die alkalische Elektrolyse (AE), Polymerelektrolyt (PEM) Elektrolyse und Hochtemperatur-Elektrolyse (SOE) sowie Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen (PEFC, DMFC, HT PEFC), Phosphorsaure-Brennstoffzellen (PAFC), Schmelzkarbonat-Brennstoffzellen (MCFC) und Oxidkeramische-Brennstoffzellen (SOFC) behandelt. Neben den elektrochemischen Zellen wird auf den Aufbau und die Verschaltung der notwendigen

peripheren Systemkomponenten eingegangen. Die Fertigung der Zell- und Stackkomponenten wird grob umrissen, während die Vorgänge während des Wandlerbetriebs einen weiteren Schwerpunkt darstellt. Die begleitende Übung vertieft den Lehrstoff durch Rechenbeispiele. Für die im Wintersemester angebotene Lehrveranstaltung waren zwischen 28 Studenten (2020) und 24 Studenten (2021) angemeldet.

Grundlagen der Elektrotechnik (Labor)

In der Lehrveranstaltung führen Studenten grundlegende physikalische Experimente mit Bezug auf Elektrotechnik durch. Das Angebot ist an Studenten des ersten Semesters gerichtet und vermittelt die Grundregeln guter wissenschaftlicher Praxis. Die Studenten lernen hierbei die gewissenhafte Planung und Durchführung von Experimenten sowie die kritische Auseinandersetzung mit Ergebnissen und ihren Interpretationen. Im Verlauf des Semesters müssen mindestens vier Experimente schriftlich dokumentiert werden. Für die im Wintersemester angebotene Lehrveranstaltung wurden 10 Studenten (2021) von Dr. Fabian Scheepers betreut.

1.2 Beiträge für die Information, Weiterbildung und Qualifizierung

Auf der Grundlage der multidisziplinären Kompetenzen und aufbauend auf den Erfahrungen der vergangenen Jahre führt das IEK-14 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.

1.2.1 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. Als Folge der COVID-19-bedingten Betriebseinschränkungen wurde im Berichtszeitraum auf die Durchführung von Präsenzveranstaltungen für die Informationsweitergabe und Fortbildung verzichtet.

1.2.2 Mitwirkung an externen Veranstaltungen

Mit Übersichtsvorträgen und ausgesuchten Fachbeiträgen zu den Themengebieten „Erneuerbare Energien“, „Wasserstoff“ und „Brennstoffzellen“ beteiligten sich zahlreiche Wissenschaftler:innen des IEK-14 an einer Vielzahl externer Fortbildungs-, Workshop- und Schulungsveranstaltungen als eingeladene Fachreferenten, Experten und Koordinatoren.

1.2.3 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

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

- 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 Abbildung 2 sind das siegreiche Schülerteam der Finalrunde 2020 nach der Ehrung gemeinsam mit Vertretern der organisierenden Einrichtungen und der Arbeitsgegenstand „Gewächshaus“ der Finalrunde 2021 zu sehen.

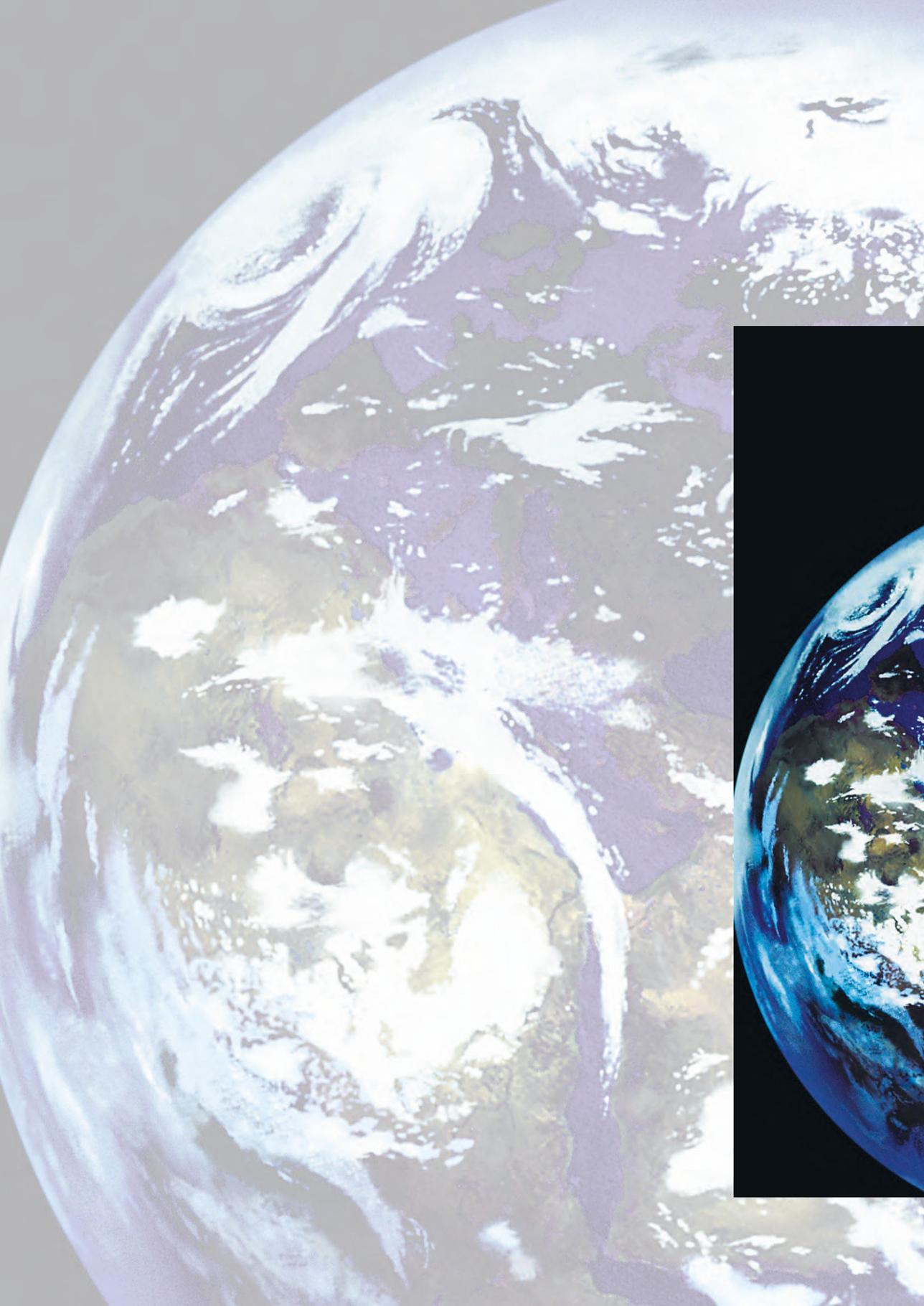


Abb. 2: Gruppenbild des siegreichen Schülerteams des Wettbewerbs 2020 (Berufskolleg Rheine, links) und Arbeitsgegenstand des Wettbewerbs 2021 (Gewächshaus, rechts)

- 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. 2021 wurde der Wettbewerb als Online-Veranstaltung durchgeführt.



Abb. 3: Teilnehmer des „Jugend forscht“ Regionalwettbewerbs 2020





2

Berichte

Wissenschaftlich- technische Berichte

- FuE-Ergebnisse aus dem Arbeitsbereich Wasserelektrolyse
- FuE-Ergebnisse aus dem Arbeitsbereich Wasserstoffnutzung

2.1 FuE-Ergebnisse aus dem Arbeitsbereich Wasserelektrolyse

2.1.1 AEM-Elektrolyse – Ni-basierter Sauerstoffentwicklungskatalysatoren

Die Anionenaustauschmembran(AEM)-Elektrolyse bietet das Potential, hohe Stromdichten wie in der PEM-Elektrolyse mit günstigen, leicht verfügbaren Materialien der alkalischen Elektrolyse zu vereinen. Neben stabilen, leistungsfähigen AEMs sind dafür insbesondere günstige und leistungsfähige Katalysatoren notwendig. Schicht-Doppelhydroxide auf Basis von Nickel und Eisen (NiFe-LDH) sind hier vielversprechende Kandidaten.

Wir haben solche Schicht-Doppelhydroxide mit verschiedenen Zusammensetzungen erfolgreich hergestellt und Ihre Struktur und ihre Performance als Katalysator charakterisiert.¹ Mit rotierenden Scheibenelektroden konnten wir beobachten, dass das Doppelhydroxid mit der Zusammensetzung Ni₃Fe die kleinste Überspannung für die Sauerstoffentwicklung aufweist und daher leistungsfähiger als Ni₃Fe₂-LDH und NiFe₃-LDH ist (siehe Abbildung 4). Dies ist insbesondere auf die Schichtstruktur mit einer besonders hohen aktiven Oberfläche zurückzuführen.

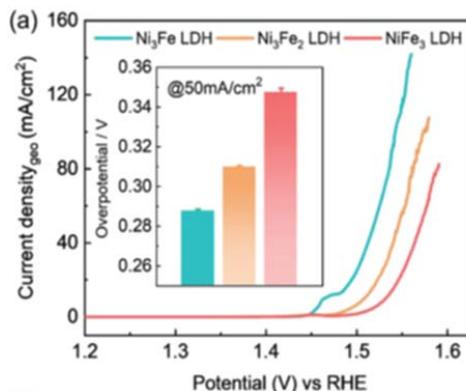


Abb. 4: Untersuchung der Sauerstoffentwicklung von LDH mittels rotierender Scheibenelektroden. Die Zusammensetzung Ni₃Fe zeigt die beste Leistung (Glaskohlenstoffelektrode, 1M KOH, Beladung 0,2 mg/cm²)

Im Anschluss wurde eine Tinte aus Ni₃Fe-LDH und einem Ionomer hergestellt und die Zusammensetzung optimiert. Mit dieser Tinte wurde dann mit Ultraschallsprühen ein Nickelvlies beschichtet, um eine Elektrode für die Charakterisierung in einer Elektrolysezelle zu erhalten. Die Spannung und Stromdichte der Elektrolysezelle sind in Abbildung 5 dargestellt. Die Elektrode mit dem neuen Katalysator zeigt eine höhere Stromdichte und ist somit effizienter als die Iridium-Benchmark-Elektrode. Ein Langzeittest bei 1 A/cm² über 400 h zeigt eine sehr gute Stabilität der Zelle.

¹ W. Jiang, et al., Adv. Funct. Mater. 2022, 32, DOI 10.1002/adfm.2203520.

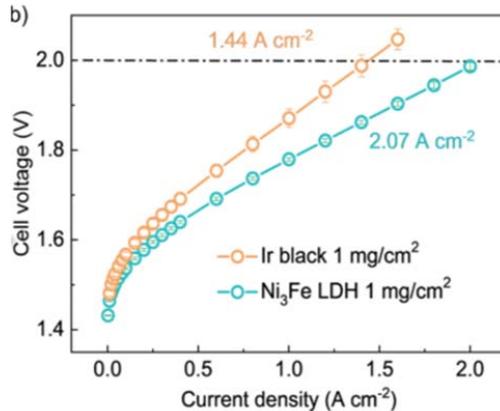


Abb. 5: Die Elektrolysezelle mit dem neuen Ni₃Fe-LDH Katalysator zeigt eine bessere Leistung als die mit Iridium als Benchmarkmaterial. (1M KOH, Kathode Pt/C @ carbon paper, 55 °C)

Die Elektrode wird nun weiter optimiert und gemeinsam mit Kooperationspartnern mit einem ebenfalls edelmetallfreien Katalysator für die Kathode und neuen AEMs kombiniert und zunächst in Einzelzellen und letztlich auch in einem anwendungsnahen Stack ausführlich getestet.

2.1.2 PEFC-Betrieb bei 100 – 120 °C - Nichtwässrige, protonenleitende Elektrolyte

Der Betrieb einer PEM-Brennstoffzelle oberhalb von 100 °C beschleunigt nicht nur die Elektroden- und Transportprozesse, sondern vereinfacht auch wesentlich die Systemtechnik (effektivere Kühlung, keine Befeuchtung der Gase, keine Wasserrezyklierung). Dies erfordert aber neue, nichtwässrige, protonenleitende Elektrolyte.

Ziel ist es, PEM-Brennstoffzellen auf Basis protischer, ionischer Flüssigkeiten (PIL) zu entwickeln, die für den Betrieb bei 100 - 120°C geeignet sind. Um die PIL hinsichtlich ihrer Grenzflächen- und Bulkeigenschaften zu optimieren, werden die grundlegenden Mechanismen der elektrochemischen Reaktionen und des Ionentransports in PIL untersucht. Vielversprechende Kandidaten werden in einem ionogenen Matrixpolymer immobilisiert und damit Einzelzellen (MEAs) entwickelt und getestet.

Mit stark aziden PIL (z.B. 2-Sulfoethylammoniumtriflat, [2-SEMA][TfO]) lassen sich im Vergleich mit wenig aziden Verbindungen (Diethylmethylammoniumtriflat, [DEMA][TfO] und 1-Ethylimidazoliumtriflat, [1-Elm][TfO]) hohe Sauerstoffreduktions(ORR)-Raten an Platinelektroden erzielen (siehe Abbildung 6, links).^{2, 3, 4}

² K. Wippermann, Y. Suo, C. Korte, J. Phys. Chem. C 125(8), 8 (2021).

³ K. Wippermann, Y. Suo, C. Korte, J. Electrochem. Soc. 167, 046511 (2020).

⁴ C. Rodenbücher, Y. Chen, K. Wippermann, P. M. Kowalski, M. Giesen, D. Mayer, F. Hausen, C. Korte, Int. J. Mol. Sci. 22, 12653 (2021)

Im Rahmen des BMWi-Projekts „HiFi-PEFC“ wurde gezeigt, dass sich mit der stark aziden PIL Diethylsulfo-propylammoniumtriflat ([DESPA][TfO]) im Vergleich zum herkömmlichen Elektrolyten Phosphorsäure die kinetische ORR-Stromdichte sowie die Löslichkeit und Diffusion von Sauerstoff um jeweils einen Faktor 8, 25 und 3 erhöhen lässt. Mit Mischungen aus wenig und stark aziden PIL (z.B. [DEMA][TfO] und [2-SEMA][TfO]) lassen sich vorteilhafte Bulkeigenschaften und eine schnelle ORR-Kinetik kombinieren (Abbildung 6, rechts).⁵ Die Immobilisierung von [DESPA][TfO] in sulfoniertem Polyetheretherketon (sPEEK)^{6, 7} ergab für 50 mol-% PIL eine Leitfähigkeit im mS/cm-Bereich. Aus [DESPA][TfO]-sPEEK-Membranen mit kommerziellen GDEs präparierte MEAs ergaben bei Zellspannungen von 0,7 - 0,8 V Stromdichten bis zu 10 mA/cm².

Bei den Membranen werden in einem nächsten Optimierungsschritt PIL-Mischungen verwendet. Bei der Zellpräparation gilt es, den Kontakt Elektrode-Elektrolyt, das Verpressen und die Beladung mit PIL bzw. mit PIL-Mischungen weiter zu verbessern.

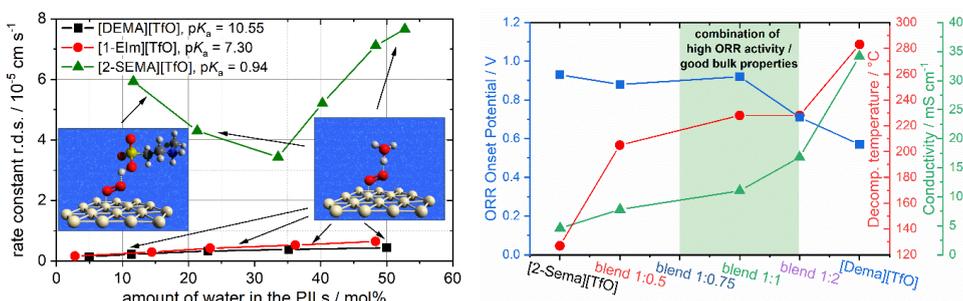


Abb. 6: ORR-Rate von [2-SEMA][TfO], [DEMA][TfO] und [1-Elm][TfO] vs. Wassergehalt (links), Onset-Potential der ORR, Leitfähigkeit und thermische Stabilität von Mischungen [2-SEMA][TfO]-[DEMA][TfO] (rechts)

2.1.3 PEM-Elektrolyse – Ein Fertigungsansatz zur Minimierung von H₂-Übergang

Die Permeation vom kathodenseitig entstehendem Wasserstoff hin zur Anode stellt in der PEM Elektrolyse ein erhöhtes Sicherheitsrisiko dar, da bereits mit 4% H₂ in O₂ die untere Explosionsgrenze (UEG) erreicht ist. Die Entstehung von explosionsfähigen Konzentrationen gilt es zu vermeiden, daher wird ein PEM Elektrolysesystem bei Erreichen von 50% der UEG in einen sicheren Zustand heruntergefahren.

Um den Wirkungsgrad von PEM Elektrolyseuren zu steigern ist die Verwendung von dünnen Membranen erforderlich. Der Einsatz dünner Membranen führt jedoch zu einer erhöhten Permeation. Diese kann beispielsweise durch die Implementierung von Rekombinationskatalysatoren in die Membran-Elektroden-Einheit (MEA) oder die Verwendung von Gasrekombinierereinheiten am Anodenausgang abgebildert werden. Die Permeation an sich kann damit

⁵ Y. Suo, H. Hou, J. Lin, Y. Chen, C. Liu, C. Wang, P. S. Schulz, K. Wippermann, C. Korte, J. Phys. Chem. C 125(39), 21588 (2021).

⁶ J. Lin und C. Korte, Fuel Cells 20(4), 461-468 (2020).

⁷ H. Hou, A. Mariani, Y. Suo, X. Gao, J. Giffin, C. Rodenbücher, S. Passerini, C. Korte, submitted to Chem. Mater 2021.

nicht verhindert werden, deren sicherheitstechnischen Folgen werden allerdings wirksam reduziert.

Aus der Literatur ist bekannt, dass die Implementierung von Rekombinationskatalysator in die Membranphase einer MEA in einem Labormaßstab eine effektive Reduktion der H_2 in O_2 Konzentration zulässt, allerdings ist die Fertigungsmethode für eine großtechnische Anwendung nicht skalierbar.⁸ Am IEK-14 wurde auf Basis dessen eine skalierbare Herstellung von Rekombinationskatalysator-enthaltenden MEAs entwickelt. Mit Hilfe des entwickelten Verfahrens konnten MEAs im Testzellmaßstab bis hin zum Pilotanlagenmaßstab erfolgreich hergestellt werden. Es wurde anstelle einer 3-lagigen MEA eine 5-lagige MEA gefertigt. Unter Zuhilfenahme einer Breitschlitzdüse wurde die Anode in drei aufeinanderfolgenden Beschichtungsschritten hergestellt.

Zunächst wurde die Iridiumhaltige Anodendispersion auf eine Decalfolie beschichtet und getrocknet, dann mit einer isolierenden Membranphase überzogen, welche ebenfalls getrocknet wurde. In einem abschließenden Beschichtungsschritt wurde die platinkatalysatortenthaltende Rekombinationsschicht aufgetragen und ebenfalls getrocknet. Die 5-lagige MEA konnte somit durch das üblicherweise gängige Decalverfahren hergestellt werden, indem die 3-lagige Anode sowie eine 1-lagige Kathode auf eine kommerzielle Membran in einem Heißpressprozess übertragen wurde.

Die Wirksamkeit der Rekombination konnte für MEAs mit Membrandicken von 20-125 μm gezeigt werden. Im Rahmen der Untersuchungen am IEK-14 konnte das Verfahren auch erfolgreich in den Pilotanlagenmaßstab übertragen werden und diente der Fertigung von 80 MEAs mit einer aktiven Fläche von 1.056 cm^2 , welche zum Aufbau eines 400 kW Stacks benötigt wurden. Weitere Untersuchungen sind am IEK-14 geplant, um die Langzeitstabilität und Wirksamkeit der 5-lagigen MEA zu analysieren, darüber hinaus soll die Edelmetallmenge innerhalb der Rekombinationsschicht weiter reduziert werden.

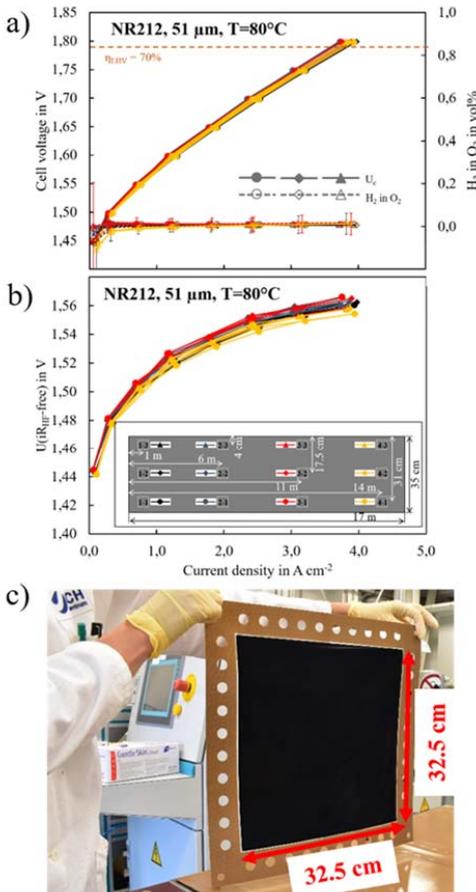


Abb. 7: a) Polarisationskurven und H_2 -Permeation auf der Anodenseite von 5-lagigen Referenz-MEAs mit NR212-Membran (50 μm); b) IR-korrigierte Polarisationskurven von 12 Referenz-MEAs aus der Pilotanlagenfertigung. Die Ergebnisse schwanken nur um 15 mV, was eine gute Reproduzierbarkeit der Elektroden über die gesamte Fläche zeigt; c) MEA mit einer aktiven Fläche von 1.056 cm^2 .

⁸ C. Klose, P. Trinke, T. Bohm, B. Bensmann, S. Vierrath, R. Hanke-Rauschenbach, and S. Thiele, "Membrane interlayer with Pt recombination particles for reduction of the anodic hydrogen content in PEM water electrolysis." J. Electrochem. Soc., 165, F1271 (2018).

2.1.4 Experimentelle Validierung der GDL-Permeabilität

Gasdiffusionsschichten (gas diffusion layer, GDL) sind poröse Materialien, die in Brennstoffzellen und Elektrolyseuren einerseits elektrischen Strom leiten, andererseits flüssige und gasförmige Stoffe verteilen müssen. Eine wichtige Eigenschaft dieser Materialien ist die Permeabilität, die sowohl experimentell bestimmt als auch aus Transportsimulationen ermittelt werden kann. Beides ist mit hohem Aufwand verbunden. Auf dem Jülicher HPC-Cluster JURECA wurde mittels der Lattice-Boltzmann-Methode der Gastransport durch die Mikrostruktur einer GDL in drei Raumrichtungen simuliert und unter Verwendung des Darcy-Gesetzes die Permeabilität berechnet. Die Mikrostrukturen wurde durch stochastisch äquivalente Realisierungen eines an der Universität Ulm entwickelten Strukturmodells definiert. Die Validierung der Jülicher Transportsimulationen erfolgte an der Universität Prag durch Messungen der Permeabilität in der realen Mikrostruktur von Vliesmaterial des Herstellers Freudenberg.

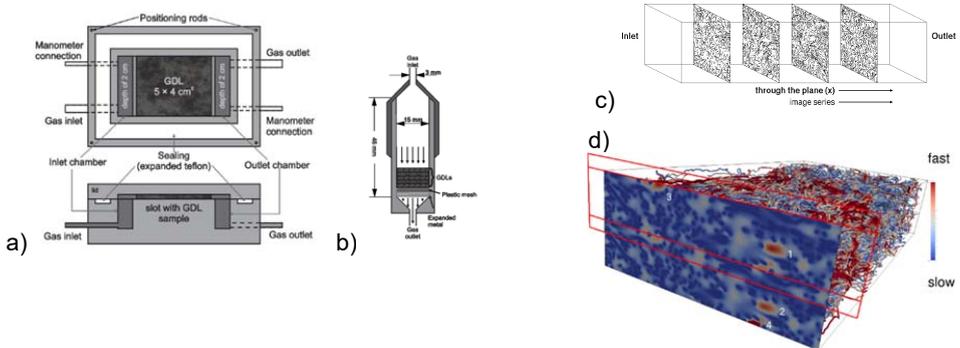


Abb. 8: Experimenteller Aufbau der Universität Prag für a) in-plane und b) through-plane Messungen der Permeabilität; c) Bildserie zur Darstellung der Mikrostruktur einer GDL; d) Auf JURECA simulierte Geschwindigkeitsverteilung des in-plane Gastransport durch eine GDL. Die Mikrostruktur wurde nicht visualisiert. Quelle aller Abbildungen.⁹

Die Transportsimulationen in GDLs werden in einer künftigen Kooperation mit der Universität Prag Teil einer Multiskalensimulation einer Brennstoffzelle und experimenteller Validierung. Zu dem Zweck werden die Jülicher Simulationen mit einer Zellsimulation der Universität Prag gekoppelt.

2.1.5 Machine Learning für die Vorhersage von Materialeigenschaften einer GDL-Mikrostruktur

Die Permeabilität gehört zu den Eigenschaften poröser Materialien, deren Bestimmung aufwändige Experimente oder hohen Rechenaufwand erfordern. Die Permeabilität eines

⁹ Dieter Froning, Monika Drakselová, Anna Tocháčková, Roman Kodým, Uwe Reimer, Werner Lehnert, Karel Bouzek, Anisotropic properties of gas transport in non-woven gas diffusion layers of polymer electrolyte fuel cells, J. Power Sources 452 (2020) 227828

Materials, dessen Mikrostruktur bekannt ist, kann mittels High Performance Computing (HPC) aus Transportsimulationen ermittelt werden (Abbildung 9a). Für Gasdiffusionsschichten (gas diffusion layer, GDL) liegen 100 Mikrostrukturen als Realisierungen eines stochastischen Strukturmodells vor, deren Permeabilitäten mittels Lattice-Boltzmann-Simulationen auf JURECA berechnet wurden.¹⁰ Mit dieser vergleichsweise geringen Datenmenge konnte ein Neuronales Netz erstellt werden, das die Permeabilität einer durch eine Bildserie gegebenen Mikrostruktur mit einer Genauigkeit von unter 5% vorhersagt. Das ist weniger als die Streuung, die sich aus den stochastisch äquivalenten Realisierungen des zu Grunde liegenden Geometriemodells ergibt.¹¹ Das Neuronale Netz wurde mit Hilfe der Open-Source-Software Tensorflow entwickelt. Das Training erfordert umfangreiche Ressourcen, in diesen Fall GPU-Hardware auf dem CLAIX-System der RWTH Aachen, die über JARA zur Verfügung steht. Die Vorhersage der Permeabilität einer Mikrostruktur durch das Neuronale Netz kann dagegen auf einem Standard-Computer erfolgen.

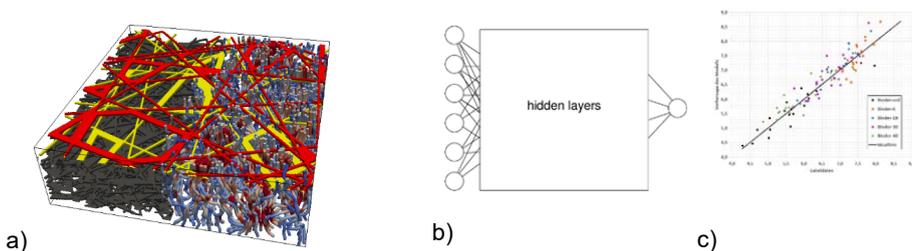


Abb. 9: a) Transportsimulation des Gasflusses; b) Neuronales Netz; c) Permeabilität mit zwei Methoden, Quelle.¹¹

Die Datenbasis wurde durch Einbindung von komprimierten Strukturdaten vergrößert, und das Neuronale Netz erweitert. Die Genauigkeit der Vorhersage wurde gegenüber Abbildung 9c weiter verbessert.

2.1.6 Steigerung des Systemwirkungsgrads durch Temperaturoptimierung bei der PEM-Elektrolyse

Mit steigender Betriebstemperatur verbessert sich die elektrochemische Katalysatoraktivität, während sowohl der Ohm'sche Widerstand als auch die reversible Zellspannung sinken. Diesen wirkungsgradsteigernden Effekten wirkt eine steigende Gaspermeation und höhere Wärmeverluste entgegen.

Aufgrund der gegenläufigen Einflüsse auf den Wirkungsgrad von Elektrolyseuren ist die Bestimmung einer optimalen Temperatur zur Maximierung des Wirkungsgrads möglich, jedoch nicht intuitiv bestimmbar. Zur Beantwortung der Forschungsfrage wurde daher ein Gesamtsystemmodell eines Elektrolyseurs entwickelt.

¹⁰ Dieter Froning, Jan Brinkmann, Uwe Reimer, Volker Schmidt, Werner Lehnert, Detlef Stolten, 3D analysis, modeling and simulation of transport processes in compressed fibrous microstructures, using the Lattice Boltzmann method, *Electrochimica Acta* 110 (2013) 325-334

¹¹ Jannik Wirtz, Untersuchung von neuronalen Architekturen für ein prediktives Modell der Eigenschaften von faserbasierten Gasdiffusionsschichten, Bachelorarbeit, FH Aachen, 2021

Das Modell berücksichtigt die auftretenden Verlustmechanismen auf Stack- und Systemebene. In der Simulation wurden dabei jene Temperatur und jener Produktgasdruck im Stack bestimmt, welche den höchstmöglichen Gesamtwirkungsgrad ermöglicht.

Es zeigt sich, dass sowohl der optimale Wasserstoffdruck als auch die optimale Betriebstemperatur des Elektrolyseurs eine Funktion der Zellspannung ist. Bezüglich der Betriebstemperatur legt das Ergebnis nahe, dass keine weiteren systemspezifischen Abhängigkeiten existieren, die Berechnung allgemein gültig und analytisch lösbar ist. Zugleich verringern die vorgeschlagenen Bedingungen die Gaspermeation durch die Membran soweit, dass keine Wasserstoff-Sauerstoff-Verhältnisse innerhalb der Explosionsgrenzen auftreten.

Die Erkenntnisse der Studie helfen, den Wirkungsgrad von Elektrolyseuren zu verbessern und so die Wasserstoffgestehungskosten zu senken.¹²

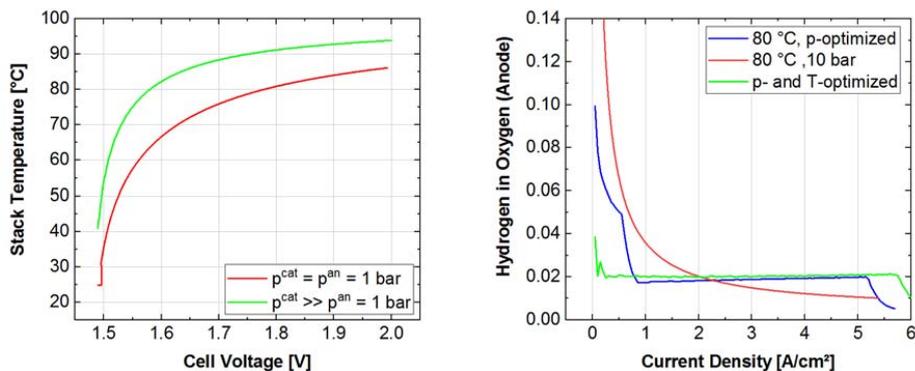


Abb. 10: Optimale Betriebstemperatur als Funktion der Zellspannung für den atmosphärischen Betrieb und für hohen Differenzdruck (links). Wasserstoffvolumenanteil in Sauerstoff auf der Anode als Funktion der Stromdichte unter verschiedenen Betriebsbedingungen (rechts, Nafion 212).

2.1.7 Stromkollektoren aus kostengünstigem Edelstahl für die PEM-Wasserelektrolyse

Der poröse Stromkollektor gewährleistet die Verteilung des Wassers und den Abtransport des Produktgases ebenso wie die elektrische Anbindung der Membran-Elektroden-Einheit über die gesamte Zellfläche. Er ist ein wichtiger Kostenfaktor in PEM-Wasserelektrolyse Stacks, da er aktuell aus relativ teurem Titan gefertigt wird, um den korrosiven Bedingungen auf der Anode standhalten zu können. Im Rahmen dieser Arbeiten wurde die Verwendung kostengünstigerer Materialien auf Edelstahlbasis erforscht, um die Materialkosten zu senken.

Dabei wurde ein feinporiger Ti-Sinterkörper mit einem gröberen Ti-Streckmetall Gitter oder Edelstahl 316L-Streckmetall kombiniert. Beide Komponenten wurden auch durch FAST-SPS Schweißen verbunden. Die Herstellung der Proben fand im Partnerinstitut IEK-1 statt.

¹² Fabian Scheepers, Markus Stähler, Andrea Stähler, Edward Rauls, Martin Müller, Marcelo Carmo, Werner Lehnert, Temperature optimization for improving polymer electrolyte membrane-water electrolysis system efficiency, Applied Energy 283 (2021) 116270

Die Komponenten wurden als anodischer Stromkollektor in PEM-Elektrolysezellen verbaut und im Hinblick auf ihre Leistungsfähigkeit und Langzeitstabilität über 1.500 Stunden (1.000 h bei 2 A/cm² und 500 h bei 3,8 A/cm²) untersucht. In Abbildung 11, links ist zu erkennen, dass die Kennlinien aller Kombinationen sehr ähnlich und besser als die mit dem (nicht langzeitstabilen) Referenzmaterial Kohlenstoffpapier sind. Beim Betrieb über 1.000 Stunden findet in den ersten ca. 300 Stunden noch eine Verbesserung statt, danach steigt die Zellspannung langsam an. In Abbildung 12, links ist zu erkennen, dass beide Streckmetalle im Betrieb leicht anlaufen. Da sich aber die Impedanzspektren nur wenig verändern, insbesondere der Wert, bei dem links die x-Achse erreicht wird, sich nicht erhöht, führt dies offenbar nicht zu einer Erhöhung des Übergangswiderstandes. Alle Materialien sind also hinreichend stabil.

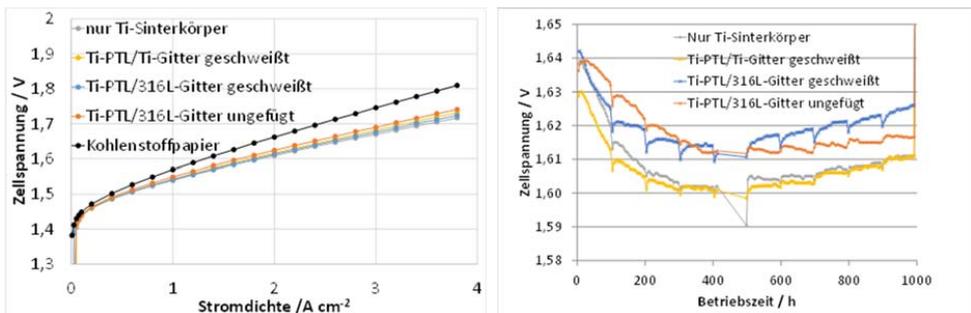


Abb. 11: Kennlinien von PEM-Elektrolysezellen mit unterschiedlichen Stromkollektoren auf der Anode (links) und Entwicklung der Zellspannung bei 2 A/cm² innerhalb von 1.000 Betriebsstunden (rechts)

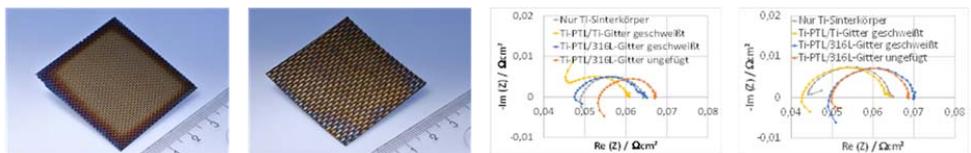


Abb. 12: Ti-Streckmetall (links) und 316L-Streckmetall (2. von links) nach dem Dauerbetrieb, Impedanzspektren vor (2. von rechts) und nach (rechts) Dauerbetrieb

Die Ergebnisse wurden im Rahmen des BMWK-geförderten Projektes »Neuartige kostengünstige Stromkollektoren für die PEM-Elektrolyse zur Herstellung von Wasserstoff aus regenerativen Energien« erzielt und werden im Clusters4Future Netzwerk „Hydrogen“ weiter verfolgt um eine Kommerzialisierung solcher Komponenten zu ermöglichen.

2.1.8 Experimentelle und simulationsbasierte Untersuchungen des dynamischen Betriebs von PEM-Wasserelektrolyseuren

Dynamisch betriebene Wasserelektrolyseure können als flexible regelbare Energiewandler zentrale Aufgaben zur Gewährleistung von Versorgungssicherheit und -stabilität in auf erneuerbaren Energiequellen basierenden Energiesystemen der Zukunft erfüllen.

Deshalb müssen die Auswirkungen des dynamischen Betriebs unter Berücksichtigung der Stromquellen und der installierten Leistungsklasse des Elektrolyseurs untersucht werden. Dadurch sollen anhand quantitativer Größen wie Wirkungsgraden zudem Empfehlungen für die Auslegung und den Betrieb von Wasserelektrolyseuren abgeleitet werden.

Zu diesem Zweck wurde ein dynamisches Simulationsmodell für PEM-Elektrolysesysteme in MATLAB/Simulink entwickelt. Das Modell wurde durch Experimente an einem 100 kW_{el}-Teststand des IEK-14 anhand charakteristischer Stromprofile parametrisiert und validiert.

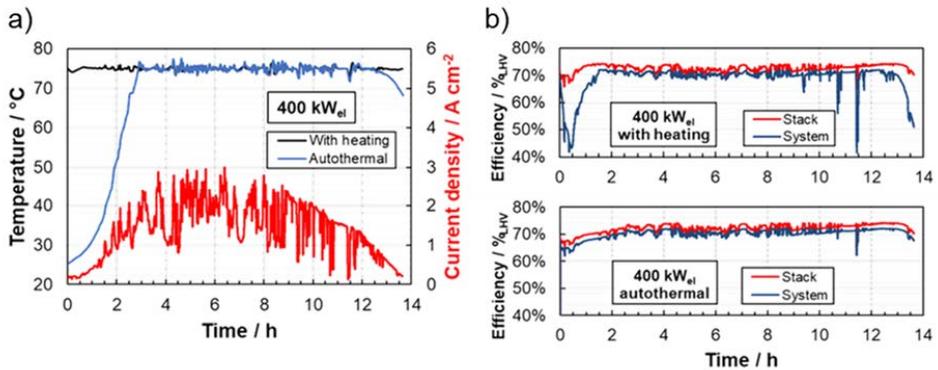


Abb. 13: Simulative Untersuchung des thermischen Verhaltens eines 400 kW_{el}-PEM-Wasserelektrolyseurs bei Kopplung an eine Photovoltaikanlage. a) Temperaturverlauf bei Verwendung einer elektrischen Zusatzbeheizung (schwarz) und im autothermen Betrieb (blau); b) Wirkungsgrade der Zellen (rot) und des gesamten Systems (blau).

Im dynamischen Betrieb ist es vorteilhaft, Elektrolysesystem autotherm – also ohne zusätzliche elektrische Heizungen – zu betreiben. Wie Abbildung 13 a) verdeutlicht, ergeben sich für den autothermen Fall insbesondere während des Anfahrvorgangs des Elektrolyseurs niedrigere Temperaturen als für den beheizten Fall. Die Wirkungsgradverläufe aus Abbildung 13 b) ergeben jedoch selbst in diesem Fall höhere Systemeffizienzen, da sich geringfügige Verbesserungen des Zellwirkungsgrades bei niedrigen Leistungsdichten durch die aufbrachte Heizleistung nicht auszahlen. Der mittlere Systemwirkungsgrad beträgt im autothermen Betrieb 70,2%_{LHV} und im beheizten Betrieb lediglich 68,7%_{LHV}.

Das entwickelte Simulationsmodell sowie die erarbeiteten Methoden und Ergebnisse lassen sich in zukünftigen Forschungsprojekten für technische Systemanalysen verwenden. Zudem kann das Modell durch weitere Experimente verbessert und ausgeweitet werden.

2.1.9 400-kW-PEM-Elektrolyseteststand als Teil des EnergyLab 2.0 und des LLEC

Mit dem genannten Teststand steht am IEK-14 nun eine einzigartige Versuchsplattform zur Verfügung, mit der Elektrolyse-Stacks im technisch relevanten Maßstab charakterisiert werden könne. Das hebt das Forschungszentrum Jülich unter anderen Forschungsinstitutionen heraus, da mit dieser Versuchsplattform nun Daten gesammelt werden, die verlässliche Informationen zu den Wechselwirkungen von Stack und System liefern. Erst in einer solchen

Größenordnung lassen sich zuverlässig die Wärme- und Massenströme bilanzieren, was bei Aufbauten im Labor häufig mit nicht zu vernachlässigenden Messfehlern verbunden ist.

Auf der Seite des Leistungseingangs können mit der 400-kW-Testplattform unterschiedlichste Stromprofile abgebildet werden, mit denen verschiedenste hoch dynamische Wasserstoffherzeugungspfade validiert werden können. Der erzeugte Wasserstoff wird in Zukunft dann im Rahmen des Living Lab Energy Campus (LLEC) unterschiedlichen Nutzungspfaden zugeführt. Dazu wird zurzeit noch ein geeignetes System für das Wasserstoffprocessing ausgearbeitet, das in Zukunft die Anbindung an unterschiedliche Nutzungspfade erlaubt.

PEM electrolyzer test rig (greenlight)



Power	kW_{el}	400
H ₂ -production	$\text{m}^3_{\text{N}}/\text{min}$	2
O ₂ -production	$\text{m}^3_{\text{N}}/\text{min}$	1
Pressure	bar_g	2-50
Temperature	$^{\circ}\text{C}$	≤ 95

Abb. 13: Elektrolyseteststand mit einer elektrischen Leistung von 400 kW

IGBT based AC/DC converter (aixcon)



Voltage	V_{DC}	125 (max.)
Current	A_{DC}	4000 @ 100 V_{DC}

Abb. 14: Leistungselektronik zur Versorgung von Stacks bis 4000 A

Die Testplattform kann zur Charakterisierung eigener und kommerzieller Stacks genutzt werden. Dabei können die Effizienz und die Haltbarkeit der Stacks bewertet werden. Auf der anderen Seite kann das gesamte Testsystem in die Übergeordnete Systemsteuerung des vom IEK-10 betreuten LLEC-Campussystem eingepflegt werden. Damit ist die Elektrolyse ein Werkzeug für die aktive Kooperation mit anderen Instituten auf dem Campus. Insbesondere im Hinblick auf die Wasserstoffspeicherung mit flüssigen Wasserstoffträgern besteht ein weiterer intensiver Austausch mit dem IEK-11.

2.1.10 Adaptive, modellbasierte Temperaturvorregelung eines 100-kW-PEM-Elektrolyseurs

Polymer-Elektrolyte-Membran (PEM) Elektrolyseure spielen gerade bei zukünftigen Power-To-Gas Anlagen eine enorme Rolle. Durch die Folge von immer größeren Leistungsanforderungen im Megawatt Maßstab und zusätzlich hochdynamischen Lastprofilen von Windkraft- und Photovoltaik-Anlagen entsteht ein bedeutender Einfluss auf die Stabilität der Elektrolyseure. Das stellt vor allem an die Betriebsführung neu Herausforderungen, um auch

weiterhin die geforderten Stabilitätskriterien zu gewährleisten. In diesem Kontext stellte sich hier vor allem die Temperaturregelung als kritisch heraus, da hochdynamische Lastprofile durch ihre zusätzliche Wärmezufuhr eine Störgröße auf die Stacktemperatur darstellen.

Im Rahmen einer Veröffentlichung wurde in diesem Zusammenhang eine adaptive Temperaturregelung mit Vorsteuerung entwickelt. Die vorhandene Vorsteuerung beruht dabei auf einem Modell, das durch die Abhängigkeit der Betriebsparameter Stromdichte, Betriebsdruck und Stacktemperatur erstellt wurde. In Praxisversuchen an einem 100 kW PEM-Elektrolyseur am IEK-14 konnte gezeigt werden, dass die adaptive Temperaturregelung mit Vorsteuerung gerade im Vergleich zur vorhandenen PID Regelung unter hochdynamischen Betriebsbedingungen bei Photovoltaik und Windkraftanlagen einen eminenten Vorteil hinsichtlich der Tracking-Performance und der Stabilität aufweist.

Abbildung 15, links oben zeigt das Lastprofil einer PV-Anlage und Abbildung 15, links unten das Lastprofil einer Windkraftanlage. Abbildungen 15, rechts zeigen dabei den Verlauf des Temperatursollwerts, die Temperatur der herkömmlichen PID-Regelung und der adaptiven Temperaturregelung. Der konventionelle PID-Algorithmus erzeugt Abweichung in der Stacktemperatur von bis zu 10 °C und ist zu keinem Zeitpunkt stabil. Wobei der neue Regelalgorithmus der Stacktemperatur lediglich eine Abweichung von +/- 2 °C aufweist und die Stacktemperatur adäquat einregelt.

Die entworfene adaptive Regelung stellt sich somit als zielführend gegenüber PID-Regelung heraus, da nur mit ihr die geforderte Stabilität einhalten wird und somit eine optimale Betriebsführung zukünftigen Power-To-Gas Anlagen gewährleistet werden kann.

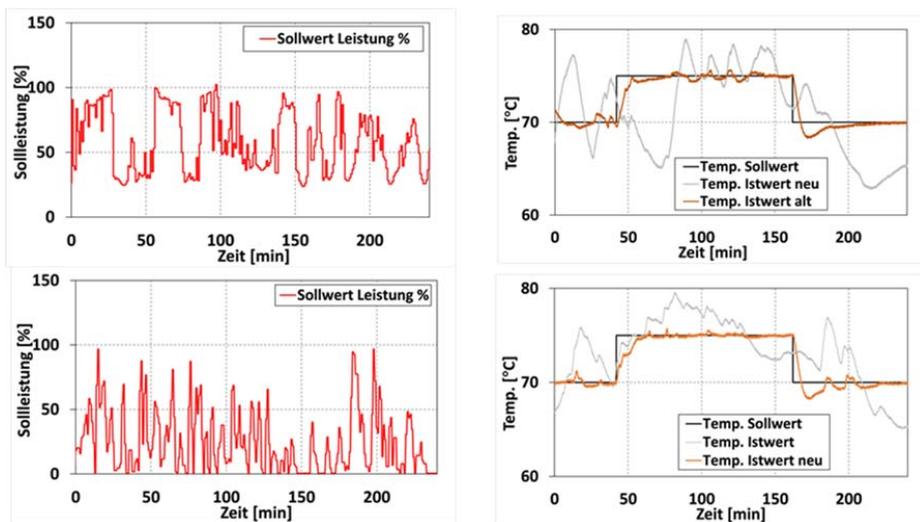


Abb. 15: PV-Profil Validierung Temperaturregelung

2.1.10 PEM-Wasserelektrolyse – Von innovativen Komponenten zu großskaligen Systemen

In Summe lassen sich die Arbeitsansätze, die in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellt wurden unter der hier genannten Überschrift – von der innovativen Komponente zu großskaligen Systemen - zusammenfassen. Der am IEK-14 verfolgte skalenübergreifende Ansatz in der Forschung und Systementwicklung ist entscheidend, um die drängenden Forschungsfragen herauszuarbeiten und schließlich in innovative Projekte zu überführen, deren Bearbeitung und Ergebnisse einen deutlichen Mehrwert für Wissenschaft und Industrie bedeuten.

Beispielhaft für den erfolgreichen Abschluss des übergreifenden Forschungsansatzes, wird hier die Entwicklung eines 400 kW Stacks dargestellt. Hier wurde in Zusammenarbeit mit dem Zentralinstitut für Engineering, Elektronik und Analytik (ZEA) der Einsatz fortschrittlicher Fertigungstechniken für die Herstellung von neuartigen Bipolareinheiten erprobt und weiterentwickelt. Außerdem konnten neuartige mit Katalysator beschichtete Membranen (CCMs), die zunächst erfolgreich in Laborzellen qualifiziert wurden, wie in Kapitel 2.1.3 dargestellt aus dem Laborstatus in die technisch relevante Größenordnung, ein Stack mit einer aktiven Fläche von 1.056 cm² je Zelle, überführt werden.

Die Messwerte der an diesem Stack durchgeführten Charakterisierung zeigen, dass nach zahlreichen vorab durchgeführten Iterationen, mit Rückkopplung auf die Stackkonstruktion, die Beschichtungsentwicklung und die Montage der CCMs, die im Labor erzielten Leistungskennlinien auch im Maßstab eines Stacks darstellbar sind (siehe [Abb. 16](#)). Es bleibt immer noch ein kleiner Verlust in den spezifischen Kenngrößen, der die noch tiefergehende Untersuchung solcher Skalierungsfragen begründet und Antrieb für die am IEK-14 durchgeführten Arbeiten ist.

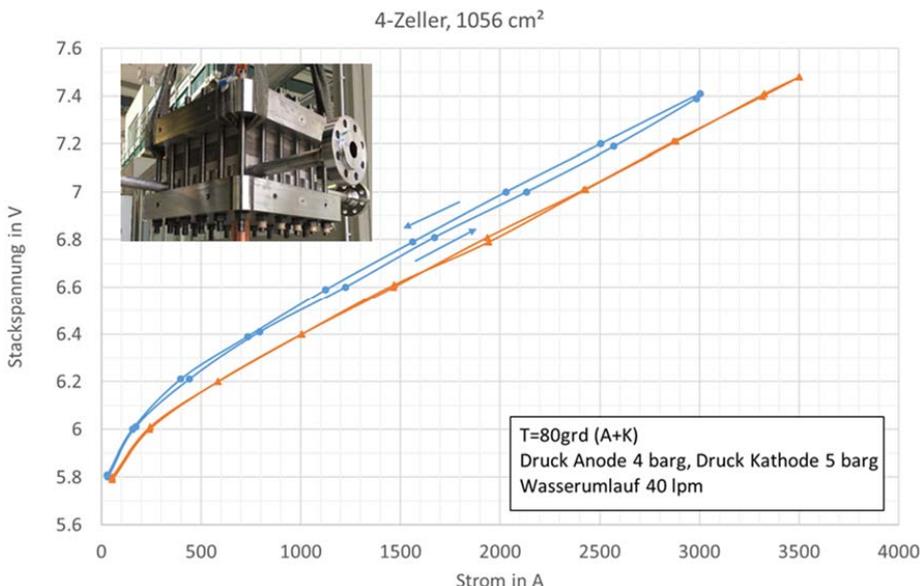


Abb. 16: Kennlinien eines Short-Stacks bei unterschiedlichen Betriebsbedingungen während des Einfahrprozesses

2.2 FuE-Ergebnisse aus dem Arbeitsbereich Wasserstoffnutzung

2.2.1 Autotherme Reformierung von Oxymethylenether (OME) aus dem Power-to-Fuel-Prozess¹³

OME kann als vielversprechende Alternative zu herkömmlichem Dieseldieselkraftstoff angesehen werden, da in experimentellen Studien festgestellt wurde, dass die Emissionen an Ruß, unverbrannten Kohlenwasserstoffen, CO und Formaldehyd in Verbrennungsmotoren (ICE) reduziert wird, wenn OME mit herkömmlichem Dieseldieselkraftstoff gemischt oder in reiner Form verwendet wird. Darüber hinaus wurde festgestellt, dass OME in Dieseldieselkraftstoff vollständig löslich, nicht toxisch und mit den in herkömmlichen ICEs verwendeten Materialien interoperabel ist. Blends aus OME-Molekülen mit drei, vier oder fünf Formaldehydeinheiten besitzen vergleichbare physikalisch-chemische und brenntechnische Eigenschaften wie herkömmlicher Dieseldieselkraftstoff. Dazu gehören z. B. Dichte, Schmelzpunkt, Flammpunkt und Selbstentzündungspunkt sowie Schmierfähigkeit, kinematische Viskosität und Oberflächenspannung. Vor diesem Hintergrund, stellt sich die Frage, ob OME vergleichbare Vorteile bei der Anwendung in der autothermen Reformierung (ATR) im Kontext der Brennstoffzellentechnologie bietet.

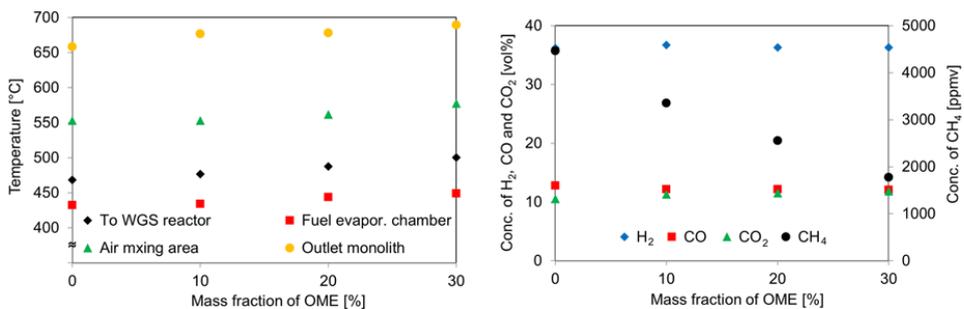


Abb. 17: Temperaturen (links) und Konzentrationen (rechts) bei Betrieb mit OME

Die Abbildung auf der linken Seite veranschaulicht die Temperaturen innerhalb des ATR, wenn der Massenanteil an OME in einer Diesel/OME-Mischung zwischen 0% und 30% variiert wurde. Es wird deutlich, dass alle vier charakteristischen Temperaturen innerhalb des ATR einen leicht steigenden Trend aufwiesen. Beispielsweise stiegen die Temperaturen in der Kraftstoffverdampfungskammer von 432 °C auf 449 °C, während sie sich im Reformatstrom am Ausgang des Katalysators von 659 °C auf 690 °C erhöhten. Es ist denkbar, dass O-Atome oder O-enthaltende Fragmente, die aus reagierenden und sich zersetzenden OME-Molekülen freigesetzt wurden, die exotherme partielle Oxidation der Kohlenwasserstoffmoleküle begünstigten. Dieser Effekt war natürlich umso stärker, je höher der Massenanteil an OME in der OME-/Diesel-Mischung war. Die Abbildung auf der rechten Seite zeigt die Konzentrationen an H₂, CO, CO₂ und CH₄ im Produktgas des ATR. Die Konzentrationen an H₂ lagen recht konstant zwischen 36,3 Vol.-% und 36,7 Vol.-%. Die von CO und CH₄ zeigten jedoch sinkende

¹³ J. Pasel, D. Schmitt, R.C. Samsun, A. Tschaufer, R. Peters, Intern. J. Hydrogen Energy, 46, (2021), 31984

Tendenzen. Somit erwies sich eine Erhöhung des Massenanteils von OME im OME/Diesel-Gemisch als sehr vorteilhaft für die Konzentrationen der Hauptprodukte der autothermen Reformierung und damit für den Betrieb des ATR.

2.2.2 Die Aldol-Kondensation von Acetaldehyd auf Dy_2O_3/C , Eu_2O_3/C und Er_2O_3/C – Experimente mittels der transienten Temporal Analysis of Products-Methode

Die Methodik der Temporal Analysis of Products (TAP) wurde eingesetzt, um die Homo-Aldol-Kondensation von zwei Mol Acetaldehyd im Reaktionsschema der Synthese von 1-Butanol zu untersuchen. Dazu wurden die auf Aktivkohle geträgerten Lanthanoidoxide Dy_2O_3 , Eu_2O_3 und Er_2O_3 aufgrund ihrer schwach sauren und stark basischen Eigenschaften als Katalysatoren ausgewählt.

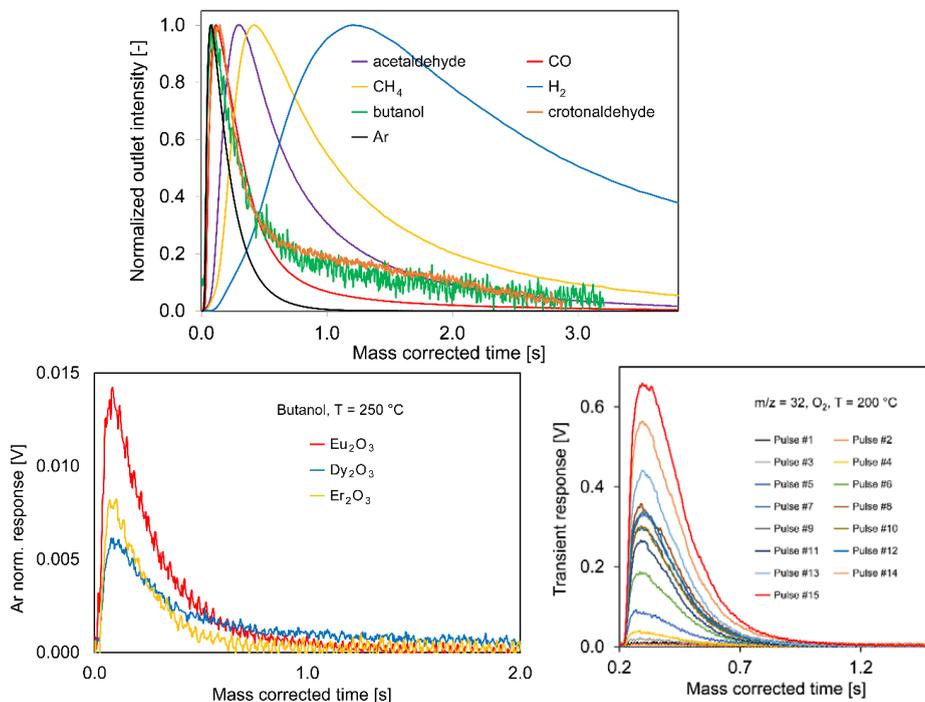


Abb. 18: Verweilzeitverteilung der Produkte nach dem Pulsen von Acetaldehyd auf Dy_2O_3/C bei 250 °C (oben), Butanol-Antwortpuls auf unterschiedlichen Katalysatoren (unten links) und Molenströme von O_2 als Antwort auf eine Kaskade von O_2 -Pulsen auf die gealterte Oberfläche von Dy_2O_3/C (unten rechts)

Die Abbildung zeigt im oberen Teil die Verweilzeitverteilung aller relevanten Substanzen im Auslass des TAP-Mikroreaktors als Antwort auf Pulse aus Acetaldehyd auf die katalytische Oberfläche von Dy_2O_3/C bei einer Temperatur von 250 °C. Es wird deutlich, dass nicht nur die gewünschten Produkte Crotonaldehyd und Butanol gebildet wurden, sondern auch die Acetaldehyd-Zersetzungsprodukte CO, CH₄ und H₂. Aus der Abbildung unten links kann geschlossen werden, dass Eu_2O_3/C die höchste Aktivität für die Bildung von 1-Butanol

aufwies. Die Abbildung unten rechts zeigt den Verbrauch an O_2 , während eine Mischung aus O_2 in Ar auf eine möglicherweise durch kohlenstoffhaltige Ablagerungen gealterte Katalysatoroberfläche gepulst wurde. Anfänglich war der Antwortpuls für O_2 kaum messbar, baute sich dann immer mehr auf mit einem Maximum für den 15. und letzten Puls. Zwei Schlussfolgerungen können daraus gezogen werden. Zum einen lagen tatsächlich kohlenstoffhaltige Verbindungen auf der Katalysatoroberfläche vor und zum anderen war es möglich, diese wieder abzubrennen.

2.2.3 CFD-Modellierung: Membranreaktoren für Reverse-Wassergas-Shift und trockene Reformierung von Methan

Bei einigen Power-to-Fuel-Prozessen wie dem Fischer-Tropsch-Verfahren können CO_2 und H_2 nicht direkt als Edukt verwendet werden, sondern müssen zunächst in Synthesegas umgewandelt werden. Die umgekehrte Wassergas-Shiftreaktion ist eine wichtige Zwischenreaktion bei Power-to-Fuel-Verfahren, bei der CO_2 und H_2 in Synthesegas umgewandelt werden. Die trockene Reformierung von Biogas ist ebenfalls ein alternativer grüner Weg zur Erzeugung von Synthesegas für Power-to-Fuel-Verfahren. Ziel der Forschungsarbeiten ist die Entwicklung neuartiger Membranreaktorkonzepte zur Intensivierung der Erzeugung von Synthesegas im Rahmen von Power-to-Fuel-Prozessen. Die Entwicklung dieser Membranreaktorkonzepte erfolgt durch einen hybriden Ansatz, bestehend aus Prozessanalyse, theoretischer Berechnung und strömungsdynamischer Analyse (engl. *Computational Fluid Dynamics, CFD*). Die Prozessanalyse liefert die Randbedingungen für CFD-Simulationen und die theoretische Berechnung dient der Quantifizierung des Membranreaktor-Potenzials im Hinblick auf die Umwandlung und Produktivitätssteigerung.

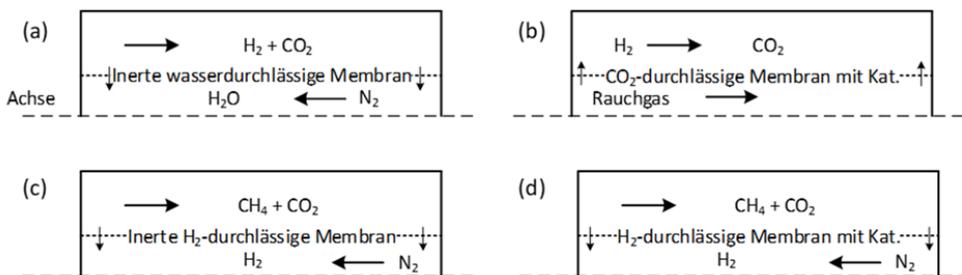


Abb. 19: Überblick der modellierten Membranreaktorkonzepte

Es wurden insgesamt vier Membranreaktorkonzepte entwickelt (siehe Abbildung 19). Ein Zeolithmembran-Konzept wurde für die umgekehrte Wassergas-Shiftreaktion entwickelt, um Wasser zu entfernen und den Umsatz zu steigern. Ein Keramik-Karbonat-Zweiphasen-Membranreaktor wurde ebenfalls für diese Reaktion zur integrierten Kohlendioxidabscheidung und -umwandlung entwickelt. Für den wasserdurchlässigen Zeolith-Membranreaktor liegt der CO_2 -Umsatz unter den simulierten Bedingungen von 200 – 250 °C und 30 bar zwischen 5,5

und 15%, und die entsprechende Umsatzsteigerung beträgt 3,2 - 103,1%. Die CO-Produktivität liegt zwischen 1,39 und 5,04 mol/(m³s), mit einer Steigerung zwischen 3,2 und 103,0%. Die Betriebstemperatur des Keramik-Karbonat-Doppelphasenmembranreaktors beträgt 800 – 900 °C. Der Umsatz von CO₂ ist sehr hoch und erreicht 95,9 - 96,8%, was auf die hohe Betriebstemperatur und die überschüssige Menge an H₂ zurückzuführen ist. Die CO-Produktivität beträgt jedoch nur 1,87 - 2,20 mol/(m³s) und ist damit viel niedriger als die der Zeolithmembran, die dem Permeationsfluss von CO₂ unterliegt.

Für die trockene Reformierung von Biogas wurden zwei Membranreaktor Konzepte entwickelt, bei denen eine Palladiummembran verwendet wird, aber Membran und Katalysator unterschiedlich gekoppelt sind: bei dem einen handelt es sich um den segregierten Modus, bei dem der Katalysator im Reaktorbett verpackt ist, bei dem anderen um den gekoppelten Modus, bei dem der Katalysator auf der Membranoberfläche beschichtet ist. Die beiden Membranreaktoren weisen unterschiedliche Reaktions- und Stofftransportmechanismen auf. Die Simulationsbedingungen sind 450 – 500 °C und 20 bar unter Berücksichtigung der Betriebstemperatur der Palladiummembran. Die Ergebnisse zeigen, dass der Membranreaktor mit dem segregierten Modus gegenüber dem gekoppelten Modus in Bezug auf den Umsatz und die Produktivitätssteigerung vorteilhaft ist. Der gekoppelte Modus hat jedoch den einzigartigen Vorteil eines hohen H₂/CO-Produktverhältnisses, was für die nachgeschalteten Synthesereaktionen von Vorteil ist. Bei allen entwickelten Membranreaktor Konzeptionen ist das Phänomen der Konzentrationspolarisation in radialer Richtung nachteilig für die Membranpermeation und muss minimiert werden, um das Membranpotenzial unter den gegebenen Bedingungen voll auszuschöpfen. Die Vergrößerung des Verhältnisses von Membranfläche zu Reaktorvolumen ist ein einfacher und effektiver Ansatz zur Intensivierung des Stofftransports im Reaktor und kann daher den Reaktionsumsatz und die Produktivität erhöhen, da die Membranreaktoren kompakter konstruiert sind.

2.2.4 Techno-ökonomische Analyse von Verfahren zur Herstellung von Power-to-Liquid-(PtL)-Kerosin

Die Energie- und Verkehrswende erfordert eine strukturelle Transformation aller Sektoren und Branchen und somit ist auch die Luftfahrt in diesen Wandel eingeschlossen. Als einzige realistische Option für die Einführung von erneuerbaren Energien in die Luftfahrt gelten nachhaltige, flüssige Kraftstoffe. Die geleisteten Forschungsarbeiten haben das Ziel verschiedene Verfahren für die Herstellung von PtL-Kerosin technisch und wirtschaftlich miteinander zu vergleichen, um anschließend ein Verfahren für die Implementierung in Bestandsanlage in NRW genauer zu untersuchen. Mit dieser Arbeit wurde ein Beitrag zur Transformation des rheinischen Reviers geleistet. Die technische Analyse der Verfahrensrouten erfolgte durch detaillierte Prozesssimulationen mit ASPEN Plus®. Für die Wirtschaftlichkeitsanalyse wurden die Ergebnisse der Prozesssimulation durch die Komponentenkostenmethode nach R. Turton¹⁴ verwertet.

¹⁴ Turton, R.; Bailie, R.C.; Whiting, W.B.; Shaeiwitz, J.A. Analysis, synthesis, and design of chemical processes; Pearson Education International: Upper Saddle River, 2013; Volume XXXV.

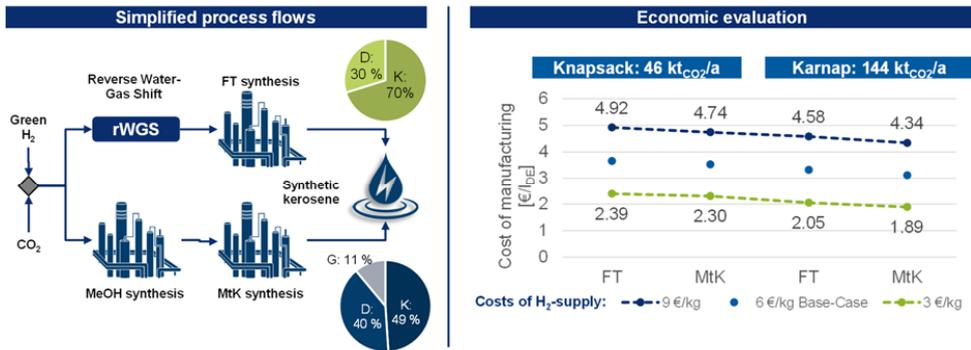


Abb. 20: Wesentliche Ergebnisse der techno-ökonomischen Analyse zur Herstellung von PtL-Kerosin

Auf der linken Seite in Abbildung 20 sind die beiden untersuchten Hauptverfahren dargestellt. Die chemische Umwandlung von grünem H₂ und CO₂ beginnt im Fischer-Tropsch (FT) Verfahren mit einer rWGS-Stufe zur Herstellung von Synthesegas. Mit diesem Synthesegas erfolgt die Fischer-Tropsch Synthese mit Produktaufbereitung und Hydrotreatment, sodass am Ende der Prozesskette eine Produktausbeute von ca. 70% PtL-Kerosin erzielt werden kann. Diesem Verfahren steht das Methanol-to-Kerosene (MtK) Verfahren gegenüber. In diesem Verfahren wird initial Methanol aus H₂ und CO₂ gebildet und nachfolgend im MtK-Verfahren über eine Olefinsynthese, Oligomerisierung und einer Hydrierung ebenfalls zu PtL-Kerosin umgewandelt. Das MtK-Verfahren erzielt in dieser Konfiguration eine Ausbeute an PtL-Kerosin von ca. 49%, 40% PtL-Diesel und 11% PtL-Benzin. Werden die Herstellungskosten auf die produzierte Menge der PtL-Kraftstoffe umgelegt, so erhält man die auf der rechten Seite in Abbildung 20 dargestellten Zusammenhänge. Die beiden PtL-Verfahren wurden dabei für zwei unterschiedliche Standorte skaliert und eine Variation der H₂-Bereitstellungskosten führt zu dem dargestellten Ergebnisbereich der spezifischen Herstellungskosten. Realistische Abschätzungen mit mittleren H₂-Bereitstellungskosten von 6 €/kg führen zu PtL-Kraftstoffkosten von unter 4 €/l und zeigen somit das Potenzial fossile Kraftstoffe zu substituieren und dabei die Kosten für Verbraucher nur in einem akzeptablen Maße zu steigern.

Dieser Beitrag wurde im Rahmen des „NRW-Revier-Power-to-BioJetFuel“-Projekts erarbeitet und durch das MWIDE gefördert. Die Konzeptstudie bildet die Grundlage für eine weitere Projektentwicklung, welche das Ziel hat, eine Demonstrationsanlage in NRW bis 2026 zu aufzubauen und in Betrieb zu nehmen.

2.2.5 Geschlossener Kohlenstoffkreislauf durch Kraftstoffalternativen für Verbrennungsmotoren auf Basis von erneuerbarem Methanol

Die Transformation des Straßenverkehrs wird vornehmlich durch die Elektrifizierung mittels Batteriefahrzeugen (BEV) vorangetrieben. Dennoch werden in bestimmten Bereichen wie z.B. dem Schwerlastverkehr oder Regionen ohne Netzanbindung oder Zugang zu erneuerbaren

Energien Anwendungsfelder für nachhaltige, synthetische Kraftstoffe gesehen. Im C³-Mobility Projekt wurden diverse Kraftstoffalternativen in ihrer Herstellung und Anwendung in Verbrennungsmotoren vom Konsortium detailliert untersucht. Das IEK-14 hat dabei die techno-ökonomische Analyse der Herstellungspfade übernommen und mit detaillierten Prozesssimulationen die Herstellung von höheren Alkoholen, Ethern und synthetischen Benzin analysiert. Alle Herstellungsverfahren der Kraftstoffalternativen wurden dabei auf Basis von erneuerbarem Methanol ausgelegt, sodass erneuerbares Methanol als Fixpunkt in dieser Analyse angesehen werden kann. An die technischen Analysen schließen sich in dieser Forschungsarbeit weitere ökonomische Analysen an.

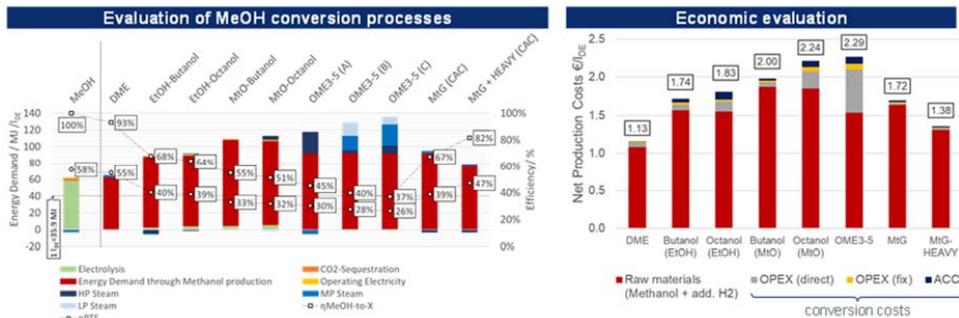


Abb. 21: Technische Bewertung von Kraftstoffsynthesen auf Basis von erneuerbarem Methanol mit zugehöriger Wirtschaftlichkeitsbetrachtung

Auf der linken Seite der Abbildung 21 ist der technische Vergleich aller analysierten Verfahrensrouten zu sehen. Ausgehend von erneuerbarem Methanol wurden die Energiebedarfe der Verfahren zusammengetragen und durch den Power-to-Fuel und den Methanol-to-Fuel Wirkungsgrad bewertet. Es ist zu erkennen, dass DME und MtG-Benzin in diesem Vergleich besonders hohe Power-to-Fuel Wirkungsgrade von bis zu 55% erreichen. Diese Kraftstoffalternativen stehen den langkettigen Ethern wie OME₃₋₅ gegenüber, welche besonders hohe energetische Aufwendungen in der Herstellung erfordern. Die Alkohole wie Butanol und Oktanol liegen im energetischen Vergleich zwischen diesen beiden Extremen und wurden sowohl über die Ethanolroute als auch die Methanol-to-Olefin (MtO) Route betrachtet. Die ökonomische Analyse der Produktionskosten zeigt den maßgeblichen Einfluss der Bereitstellung von erneuerbarem Methanol auf die gesamte Produktionskette von höherwertigen Kraftstoffalternativen. Dieses Ergebnis macht deutlich, dass sobald es möglich ist, die Rohstoffe für Power-to-Liquid Anwendungen kostengünstig zur Verfügung zu stellen, die Produktionskosten von hochwertigen Kraftstoffalternativen ebenfalls deutlich sinken. Aus diesem Grund wurde der Import von erneuerbarem Methanol aus Vorzugsregionen in die Analyse aufgenommen und es zeigte sich, dass der Import von Methanol unter bestimmten Randbedingungen sogar günstiger sein kann als der Import von grünem H₂.

Dieser Beitrag wurde im Rahmen des „C³-Mobility“-Projekts erarbeitet und durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz (ehemals BMWi) gefördert. Der Import von erneuerbarem Methanol aus Vorzugsregionen wurde als zentrales Element in Folgeprojektanträge überführt.

2.2.6 Wasserstoff-Sicherheitsforschung für Fukushima-Daiichi

Die sichere Stilllegung und Dekontaminierung der radioaktiven Abfälle, die durch den Atomunfall in Fukushima Daiichi entstanden sind, ist ein gewaltiges Projekt für das nächste Jahrzehnt. Aktuell ist die Entwicklung von Behältern für die sichere Langzeitlegerung zu einer dringenden Aufgabe geworden.

Da der zu lagernde Atommüll einen großen Anteil an Meerwasser enthält, stellt die radiolytische Freisetzung von Wasserstoff und Sauerstoff in beträchtlichen Mengen im Inneren der Behälter eine sicherheitstechnische Herausforderung dar. Daher wird die mögliche Anwendung katalytischer Rekombinatoren innerhalb der Lagerbehälter untersucht, in denen ein Katalysator auf der Grundlage des sog. „intelligenten Automobilkatalysators“ zum Einsatz kommen soll.

Erste Labortests haben die grundsätzliche Eignung des monolithischen Katalysators experimentell bestätigt. Um weitergehende Erkenntnisse für die Auslegung des Rekombinatorsystems zu gewinnen, wurden im Rahmen einer Testreihe in der Versuchsanlage REKO-4 (Abbildung 22, rechts) des Forschungszentrums grundlegende Betriebseigenschaften in Abhängigkeit von der Zelldichte, der Katalysatordicke und der Kaminhöhe untersucht.



Abb. 22: Versuchsanlage REKO-4 (rechts); verschiedene Rekombinatoren (links)

Unter Zwangsdurchströmung beginnt der Katalysator mit der Wasserstoffumwandlung bereits unterhalb des Gefrierpunkts. Die Effizienz der Wasserstoffumwandlung nimmt mit steigender Zelldichte zu. Bei natürlicher Konvektion hingegen können die Rekombinationsraten durch Designoptimierung von 900 cpsi auf 30 cpsi aufgrund der Verringerung des Strömungswiderstands erheblich verbessert werden. Der Durchsatz nimmt aufgrund gesteigerter Kaminwirkung mit der installierten Kaminhöhe zu, während zwischen der Katalysatordicke und der Rekombinationsrate nur ein geringer Zusammenhang besteht.

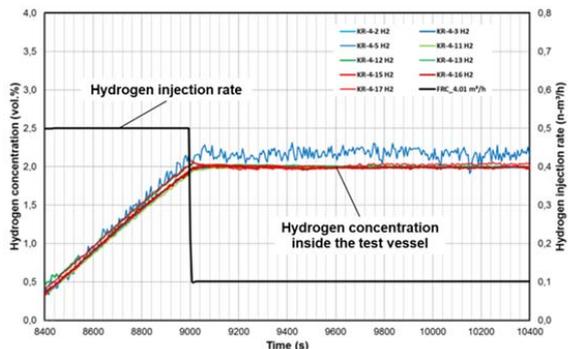


Abb. 23: Ermittlung der stationären Rekombinationsrate

Im Rahmen des Versuchsprogramms wurden somit die relevanten Parameter geklärt, die für die Auslegung des Rekombinator-Systems zur Anwendung in den Lagerbehältern für die radioaktiven Abfälle in Fukushima Daiichi erforderlich sind.

2.2.7 containmentFOAM – CFD-Modellierung von Druckaufbau, Aerosol-Transport und H₂/CO-Gegenmaßnahmen im Sicherheitseinschluss

Seit 2017 wird mit 'containmentFOAM' ein maßgeschneidertes CFD-Paket zur Simulation der Strömungs- und Transportprozesse im Sicherheitseinschluss während eines schweren Störfalls in einem Kernkraftwerk entwickelt (in der Abbildung beispielhaft mittels der Dampfverteilung während der Druckentlastung dargestellt). Künftig kann dieser Ansatz aber auch zur Beantwortung von Sicherheitsfragen im Kontext einer energiewirtschaftlichen Nutzung von Wasserstoff weiterentwickelt bzw. angewendet werden, was bereits im Living Lab Energy Campus (LLEC: PtG++) erprobt wird.

Neben der Modellierung einer Vielzahl einzelner physikalischer Phänomene (z.B. turbulente Auftriebsströmungen, Kondensation, Wärmestrahlung, Aerosoltransport) müssen ebenfalls Betriebscharakteristika technischer Sicherheitssysteme (z.B. Berstscheiben, Wärmetauscher, Rekombinatoren) abgebildet werden, um eine repräsentative Simulation zu ermöglichen. Die wesentliche Herausforderung für die Entwicklung des Gesamtmodells stellt die Gewährleistung einer ausgewogenen Modelltiefe sowie die robuste Kopplung der Einzelmodelle dar. Im Zuge der Entwicklung erfolgte eine systematische Verifizierung der Einzelmodelle, sowie darauf aufbauend eine anwendungsorientierte Validierung anhand in internationalen Projekten durchgeführter integraler Großversuche, z.B. OECD/NEA HYMERES-2, PANDA oder THAI.

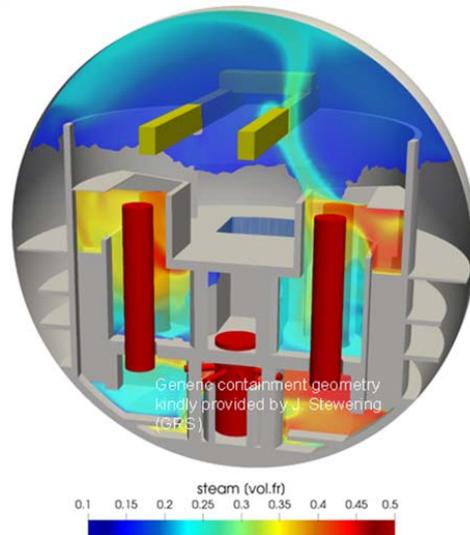


Abb. 24: Strömungs- und Transportprozesse in einem Reaktor-Containment

Im Jahr 2021 wurde ein erster vollständiger Prototyp des containmentFOAM-Pakets der Community quell-offen zur Verfügung gestellt (<https://go.fzj.de/containmentFOAM>).¹⁵ Es dient somit der praxisnahen Verbreitung der F&E Arbeiten der Abteilung Sicherheitsforschung und wird derzeit im durch das BMUV geförderten Projekt CF2REF in das nationale CFD-Referenzpaket für die nukleare Sicherheitsforschung integriert bzw. zum Kompetenzerhalt in Deutschland genutzt. Auf internationaler Ebene erfolgten sichtbare Beiträge zur IAEA ONCORE-Initiative (Open-Source Codes for Nuclear Reactor Analysis) bzw. dem OECD/NEA

¹⁵ Kelm, S. et al. "The Tailored CFD Package 'containmentFOAM' for Analysis of Containment Atmosphere Mixing, H₂/CO Mitigation and Aerosol Transport" Fluids 6/3 (2021) 100, <https://doi.org/10.3390/fluids6030100>

NEST-Netzwerk (Nuclear Education Skills and Training). Im Rahmen des EU-Projekts AMHYCO wird containmentFOAM künftig genutzt, um das Verbrennungsrisiko in einer späten Störfallphase näher zu untersuchen und dabei die Berechnungen mit etablierten Systemcodes zu untermauern. Es trägt somit auch zur Überarbeitung der Notfallschutzmaßnahmen bei.

2.2.8 Modellierung der Wandkondensation in Anwesenheit nicht kondensierbarer Gase

Die Kondensation von Wasserdampf an kalten Strukturen des Sicherheitsbehälters ist von wesentlicher sicherheitstechnischer Relevanz für die Untersuchung eines potenziellen Kühlmittelverluststörfalls in einem Kernkraftwerk. Kondensation begrenzt den Druckaufbau, kann jedoch lokal zur De-inertisierung des H₂-Dampf-Luft Gemischs führen. Im Weiteren ergeben sich Wechselwirkungen mit anderen wichtigen Phänomenen wie z.B. dem Aerosoltransport. Eine belastbare Modellierung ist daher in einer 3D-CFD Simulation unerlässlich, wobei im Sinne einer ausgewogenen Modellierung eine zweiphasige Abbildung nicht realisierbar ist.

Aufgrund der Anwesenheit nicht-kondensierbarer Gase (Luft, H₂, CO, CO₂) im Sicherheitseinschluss, ist eine einphasige Berechnung der Kondensationsrate über das Stefan'sche Problem der einseitigen Diffusion möglich (Abbildung links) und bereits in vergleichbaren CFD-Ansätzen implementiert. Der freie Quelltextzugriff ermöglichte jedoch zwei verschiedene Strategien zur Implementierung der Modellgleichungen. Während die meisten Realisierungen des Modells eine Implementierung über explizite volumetrische Quellterme in den Erhaltungsgleichungen für die wandnahen Zellen nutzen, wurde eine weitere Möglichkeit, nämlich die Modellierung als Randbedingung (Fluss) untersucht (Abbildung Mitte). Dies ermöglicht eine implizite Berücksichtigung der Kondensationsrate im konvektiven Term der Gleichung und damit eine deutlich robustere und numerisch effizientere Implementierung. Gerade auf anwendungsnahen Rechengittern zeigte sich eine verbesserte Performance der Gesamtsimulation.

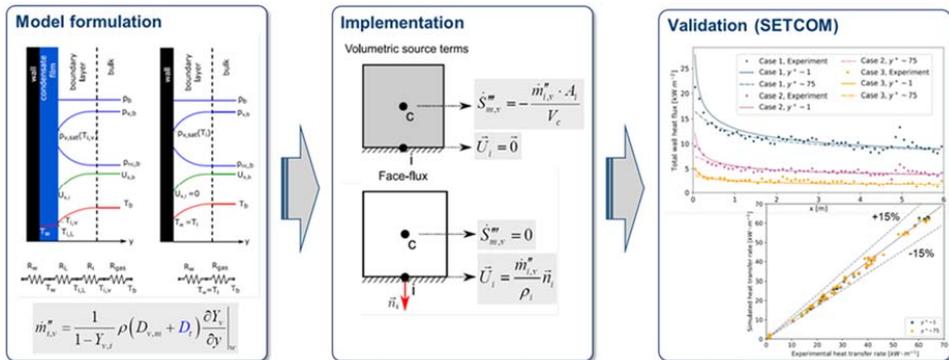


Abb. 25: Modellierung, Modellimplementierung und -validierung der Wandkondensation von Wasser in Anwesenheit nicht kondensierbarer Gase

Die Absicherung des Modells anhand der institutseigenen SETCOM-Versuchsanlage (Separate Effect Tests for Condensation Modeling) bestätigte die Validität des Modellansatzes für erzwungene Konvektion.¹⁶ Aktuell erfolgt im Rahmen eines BMUV-geförderten Forschungsvorhabens gemeinsam mit dem Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung (WSA) der RWTH Aachen eine Erweiterung auf Mischkonvektionsströmungen an geneigten Wänden.

¹⁶ Referenz: G. Vijaya Kumar, L.M.F. Cammiade, S. Kelm, K. Arul Prakash, E.M. Groß, et al., „Implementation of a CFD model for wall condensation in the presence of non-condensable gas mixtures, Applied Thermal Engineering 187 (2021) 116546, <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2021.116546>





3

Highlights

Besondere Ergebnisse

- Techno-ökonomische Bewertung von Verfahren zur Herstellung von Kraftstoffen aus H_2 und CO_2
- Machine Learning bei der Modellierung der Dynamik von Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen
- Eine experimentelle Untersuchung des Ethanol-Upgradings zu Iso-Butanol auf NiPt/C-Katalysatoren in einem Autoklavenreaktor

3.1 Techno-ökonomische Bewertung von Verfahren zur Herstellung von Kraftstoffen aus H₂ und CO₂

Power-to-Fuel-Technologien und die damit hergestellten synthetischen Kraftstoffe sind zahlreichen Studien zu Folge für eine zukünftig weitgehend CO₂-neutrale Energieversorgung unverzichtbar. Der wissenschaftliche Beitrag der o.g. Dissertation ist die Beantwortung der Frage, wie technisch ausgereift, energie- und kostenintensiv unterschiedliche Power-to-Fuel-Konzepte verglichen miteinander sind. Dafür wurden wasserstoffbasierte Herstellungsverfahren elf verschiedener normgerechter Verkehrskraftstoffe techno-ökonomisch gegenübergestellt.

Für die verfahrenstechnischen Analysen wurden alle erforderlichen Chemieanlagen in Aspen Plus® entworfen, wobei technisch bereits etablierte Verfahren adaptiert und fehlende Teilprozesse bzw. Syntheserouten neu entwickelt wurden. Dazu zählen beispielsweise völlig neu entwickelte Verfahrenskonzepte zur H₂-basierten Synthese höherer Alkohole. Anschließend wurden alle Teilprozesse vielversprechender Syntheserouten basierend auf H₂ und CO₂ simulationsgestützt techno-ökonomisch analysiert, bewertet und gegenübergestellt. Die Produkte erfüllen weitestgehend heutige Kraftstoffnormen. Alle entworfenen Verfahrenskonzepte haben keine Nebenprodukte außer Wasser, da auch eigentlich nicht rückführbare Nebenprodukte der Reaktionen mit Hilfe von Reformern zu Synthesegas umgewandelt und so rückverwertet werden. Somit sind die Verfahrenskonzepte auch für den großskaligen Einsatz geeignet. Die Empfindlichkeit der Ergebnisse auf die getroffenen Annahmen und Randbedingungen wurde mittels Sensitivitätsanalysen bewertet.

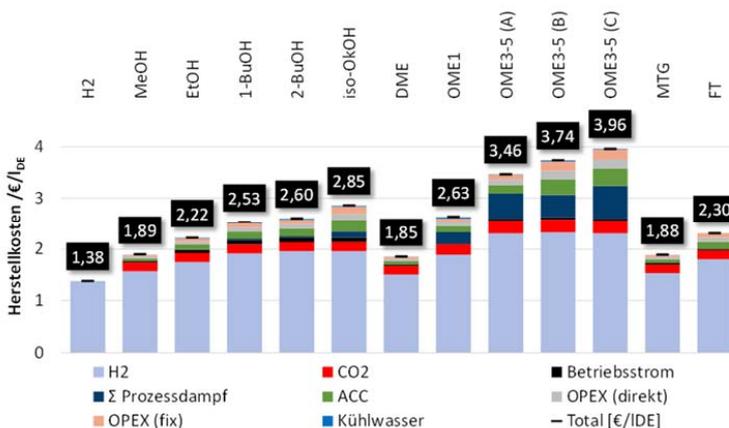


Abb. 26: Gegenüberstellung der Kosten zur Synthese von 1 kg synthetischem Kraftstoff über Power-to-Fuel-Verfahren

Die Arbeit liefert mit dem ganzheitlichen Bild von Verfahren und Produkten eine robuste Grundlage sowohl für Eingliederungen von Power-to-Fuel-Konzepten in Simulationen zukünftiger Energiesysteme und Energieversorgungsstrategien als auch für die Wahl von synthetischen Kraftstoffen für eine zukünftig im besten Fall CO₂-neutrale Mobilität.¹⁷

¹⁷ Schemme, S. Techno-ökonomische Bewertung von Verfahren zur Herstellung von Kraftstoffen aus H₂ und CO₂; Forschungszentrum Jülich: Jülich, 2020; Volume 511.

3.2 Machine Learning bei der Modellierung der Dynamik von Polymer-elektrolyt-Brennstoffzellen

Motivation für den Einsatz maschinellen Lernens

Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen (PEFCs) sind eine vielversprechende Energieumwandlungstechnologie, die Strom aus Wasserstoff mit geringer Lautstärke und wenig oder keinen Emissionen erzeugt. Phänomene während des Brennstoffzellenbetriebs sind komplex und werden durch viele miteinander verbundene Faktoren verursacht. Darüber hinaus ändert sich das dynamische Verhalten der Brennstoffzellen aufgrund unterschiedlicher Betriebsbedingungen und Laständerungen. Ein schnelles Reaktionsmodell, das das dynamische Verhalten der PEFCs vorhersagen kann ist hilfreich, um eine optimale Steuerung der Brennstoffzellensysteme zu implementieren und eine gewünschte Leistung zu erzielen.

Experimente zur Datenerfassung beim Betrieb von PEFCs unter diversen Lastwechseln sind sehr zeitintensiv. Abbildung 27, links zeigt einen PEFC-Teststand im IEK-14 und exemplarisch die in kleinen Zeitschritten gemessene Zellspannung bei vorgegebenen Lastwechseln (Abbildung 27, rechts). Es ist zu beobachten, dass die Zellspannung der elektrischen Last folgt. Dabei ist sowohl ein Rauschen in der gemessenen Zellspannung als auch eine verzögerte Reaktion auf die Lastwechsel zu beobachten.

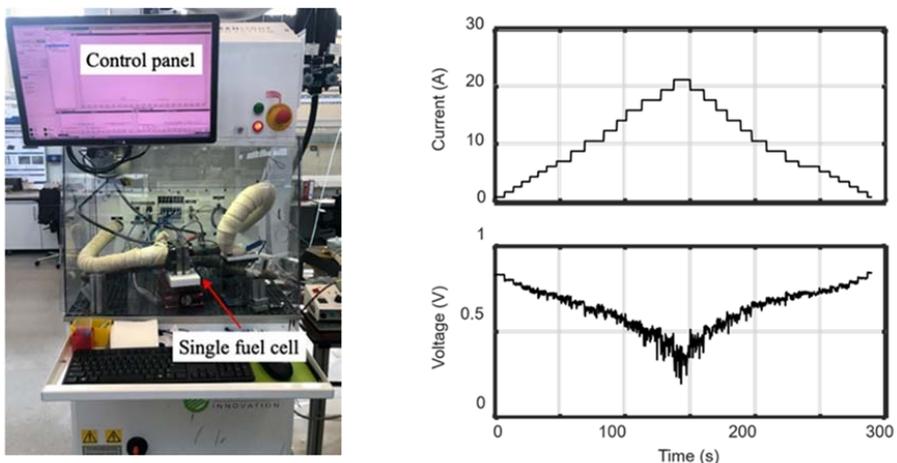


Abb. 27: PEFC-Teststand am IEK-14 (links) und gemessene Zellspannung unter Lastwechsel (rechts)

Die Anforderungen an ein Systemmodell zur Vorhersage des Betriebsverhaltens eines PEFC-Stacks sind:

- Robustheit bei dynamischen Lastwechseln,
- Schnelle Laufzeit, wie bei sog. 0D-Modellen gewohnt,
- Exakte Vorhersage der Zellspannung.

Ein physikalisch basiertes 0D-Modell kann zwar den korrekten Zustand nach einem Lastwechsel darstellen, aber die Dynamik des Lastwechsels selber wird dadurch nicht beschrieben. In der Realität stellt sich bei einem Lastwechsel der stationäre Zustand erst nach

einer gewissen Zeit ein. Außerdem wird das experimentelle Rauschen nicht wieder gegeben. Beide Effekte werden durch ein 0D-Modell typischerweise nicht wiedergegeben.

Aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz zählt das maschinelle Lernen (Machine Learning, ML) zu den datengetriebenen Modellierungstechniken. Es wird das Verhalten eines Brennstoffzellen-Stacks beschrieben, ohne die physikalischen Prozesse abzubilden. Solche Modelle werden daher als Black-Box-Modelle bezeichnet. Simulationsmodelle, die auf physikalischen Gleichungen basieren, werden im Gegensatz dazu als White-Box-Modelle bezeichnet.

Es wurde ein dynamisches Modell für Brennstoffzellen auf der Basis einer Least-Squares-Support-Vektor-Maschine (LSSVM) entwickelt. Mit ML wurde das Potenzial moderner Methoden aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz untersucht mit der Fragestellung: was können wir aus den Experimenten lernen?

Die Vorhersagefähigkeit des LSSVM-Modells wurde zunächst im Vergleich zu experimentellen Daten demonstriert, die von einem Brennstoffzellen-Teststand gesammelt wurden. Die Analyse der Leistung des Modells unter verschiedenen Laständerungen der Brennstoffzelle erfolgte mit Hilfe von künstlichen Daten, die von einem White-Box-Modell generiert wurden, das auf der Funktionsweise der Brennstoffzellensysteme basiert. Die Laständerung wird als Rampe definiert: die Dauer und Höhe des An- oder Abstiegs bilden zwei Parameter in einer systematischen Studie.¹⁸ Damit wurden systematisch die Parameter der Laständerungen untersucht. Es zeigte sich, dass die Leistung des LSSVM-Modells besser ist, wenn dem System moderate Laständerungen auferlegt werden. Daher führen eine hohe Rampendauer und eine kleine Rampenhöhe zu einer guten Modellgenauigkeit. Darüber hinaus wird zur Modellierung eines hochdynamischen Brennstoffzellensystems eine hohe Abtastfrequenz vorgeschlagen, um die Güte des Modells zu erhöhen.

Zu guter Letzt wurde das LSSVM-Modell modifiziert, um seine Qualität bei der Vorhersage des dynamischen Verhaltens der Brennstoffzelle zu verbessern. Ein adaptives Online-LSSVM-Modell wurde entwickelt. Die Bestimmung des Anfangswertes der internen Parameter für das LSSVM-Modell wurde optimiert, indem an Stelle der manuellen Suche ein genetischer Algorithmus verwendet wurde, um das globale Optimum zu ermitteln. Ein adaptiver Prozess wurde durchgeführt, um diese internen Parameter online zu aktualisieren. Mit einem geeigneten Ausgangspunkt für die internen Parameter und Online-Aktualisierungsprozesse kann dieses adaptive Online-LSSVM-Modell auch komplexe nichtlineare Brennstoffzellensysteme mit häufigen Lastwechseln bewältigen.

Experimentelles Rauschen und dessen Auswirkungen auf dynamische Lastwechsel

Zum Trainieren eines ML-Modells wird eine große Datenmenge benötigt, die außerdem den Wertebereich der Operationsparameter während des Betriebes einer PEFC umfasst. Dynamische Simulationsmodelle in 0D ermöglichen zwar die schnelle Berechnung der Zellspannung in Abhängigkeit von Betriebsparametern wie Gaszufuhr, Temperatur, aber das in Experimenten zu beobachtende Verhalten bei Lastwechseln wird durch solche Bilanzmodelle nicht erfasst. Das in Abbildung 27, rechts beobachtete Rauschen wurde mittels schneller Fourier-Transformation (fast Fourier transform, FFT) analysiert und hohe Frequenzen

¹⁸ Zou, W.; Froning, D.; Shi, Y.; Lehnert, W. A least-squares support vector machine method for modeling transient voltage in polymer electrolyte fuel cells, Applied Energy 2020, 271, 115092

herausgefiltert. Die verbleibenden Frequenzen wurden für die Modellierung statistischen Rauschens verwendet, das einem in Simulink implementierten Bilanzmodell überlagert wurde (Abbildung 28).¹⁹

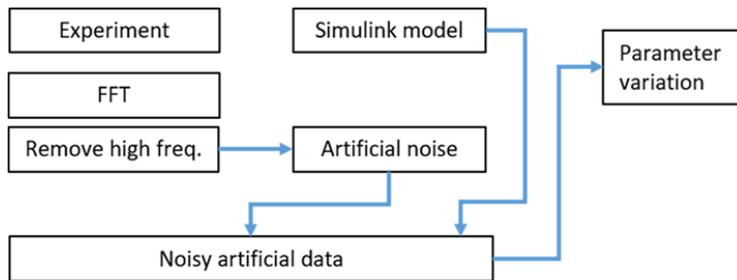


Abb. 28: Schema der Rauschüberlagerung

In der Abbildung 29 ist die Zellspannung dargestellt, wie sie von einem 0D-Simulink-Modell berechnet wird (schwarz), dass an die Messungen angepasst wurde. Zum Vergleich ist die gemessene Zellspannung (blau) dargestellt, ebenso die Überlagerung des Simulink-Outputs mit dem statistisch generierten Rauschen. Das so generierte verrauschte Simulink-Signal (rot) weist die gleichen Charakteristika auf wie die gemessene Zellspannung: es ist sowohl ein statistisches Rauschen als auch eine verzögerte Reaktion auf Lastwechsel zu beobachten.

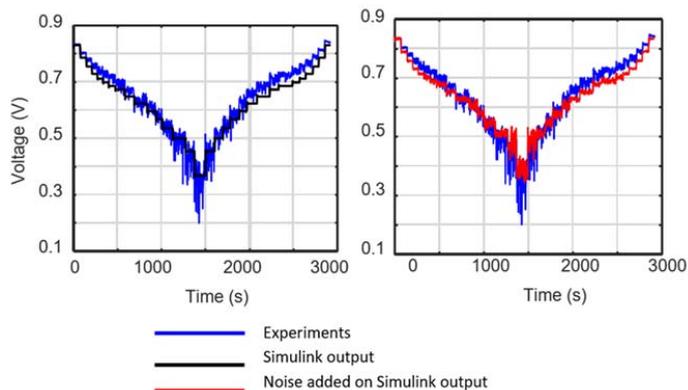


Abb. 29: Überlagerung eines White-Box-Modells mit realistischem Rauschen

Dynamische Laständerungen

Verschiedene Laständerungen, repräsentiert durch Änderungen der Stromdichte, werden in der Analyse berücksichtigt und durch eine Kombination von zwei Faktoren als Rampe dargestellt, nämlich die Dauer und die Höhe der Rampe. Die Rampendauer beschreibt die Dauer der Laständerung und damit deren Dynamik, und die Höhe der Rampe wird verwendet,

¹⁹ Zou, W.; Froning, D.; Shi, Y.; Lehnert, W. Working zone for a least-squares support vector machine for modeling polymer electrolyte fuel cell voltage, Applied Energy 2021, 283, 116191

um die Amplitude der Laständerung zu beschreiben. Die Lastwechsel wurden systematisch untersucht. Die Last wird durch die Stromdichte spezifiziert, die Dynamik des Lastwechsels durch die Dauer des Rampenanstiegs bzw. -abstiegs:

- 9 Werte für die Stromdichte: 0,2; 0,3; ... 1,0 A/cm²
- 12 Werte für die Rampendauer: 1, 3, 5, 10, 30, 6, 90 120, 150, 180, 210, 240 s.

Die Simulation systematischer Lastwechsel mit den oben angegebenen Parametern bildeten die Trainingsdaten für das LSSVM-Modell. In Abbildung 30 ist der Verlauf der Trainingsdaten dargestellt. Für eine Rampenweite von 180 s und Lastwechseln von 0,2 A/cm² ist der Lastverlauf dargestellt, das Trainingssignal sowie die nach dem Training von dem LSSVM-Modell vorhergesagte Zellspannung. Der Fehler lag deutlich unter 0,05 V, außer bei hoher Stromdichte, wo der Fehler aber immer noch unterhalb von 0,1 V lag.

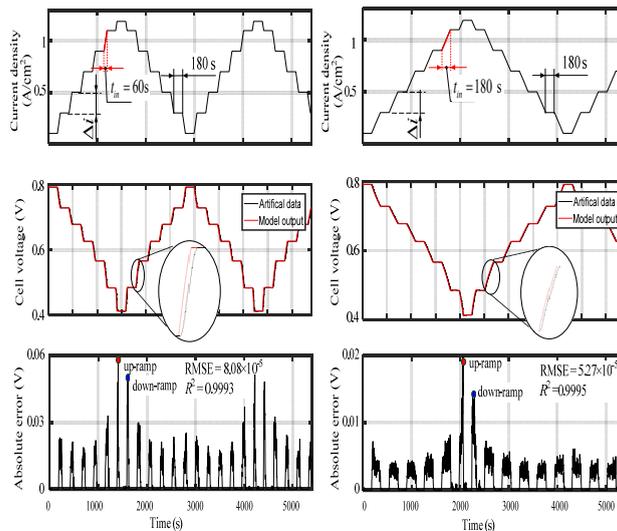


Abb. 30: Trainingsdaten

Die Größe des Fehlers ist deutlich abhängig von den Rampenparametern. Es wurde eine Arbeitszone für das LSSVM-Modell definiert für den Fall, dass die dynamische Reaktion der PEFC auf Laständerungen vorhergesagt werden soll. Basierend auf einer Fehlertoleranz bei der Modellierung kann eine Reihe praktikabler Kombinationen aus Abtastintervall, Rampendauer und Rampenhöhe gefunden werden. Die Arbeitszone hilft dabei, zukünftige Anwendung des LSSVM-Modells zu konfigurieren, wenn auf Änderungen der Betriebslast adäquat reagiert werden soll. Die Analyse der absoluten und relativen Fehler ermöglicht die Spezifikation eines Arbeitsfensters für die Rampenparameter bei Vorgabe eines maximalen absoluten oder relativen Fehlers (Abbildung 31).²⁰

²⁰ Zou, W.; Froning, D.; Shi, Y.; Lehnert, W. An online adaptive model for the nonlinear dynamics of fuel cell voltage, Applied Energy 2021, 288, 116561

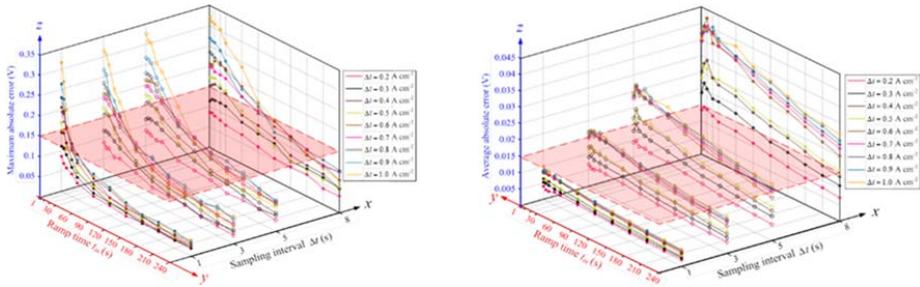


Abb. 31: Arbeitsfenster bei Vorgabe eines maximalen (links), eines relativen Fehlers (rechts)

Optimierung der Hyper-Parameter

Die Genauigkeit der Vorhersage eines LSSVM hängt außer von den Trainingsdaten auch von zwei weiteren Hyperparametern (σ, γ) ab. Dazu wurde ein adaptives Online-Updating-Verfahren entwickelt. Dafür gibt es keine allgemeingültige Systematik, daher wurde ein genetischer Algorithmus (GA) durchgeführt, um die Hyperparameter zu optimieren.

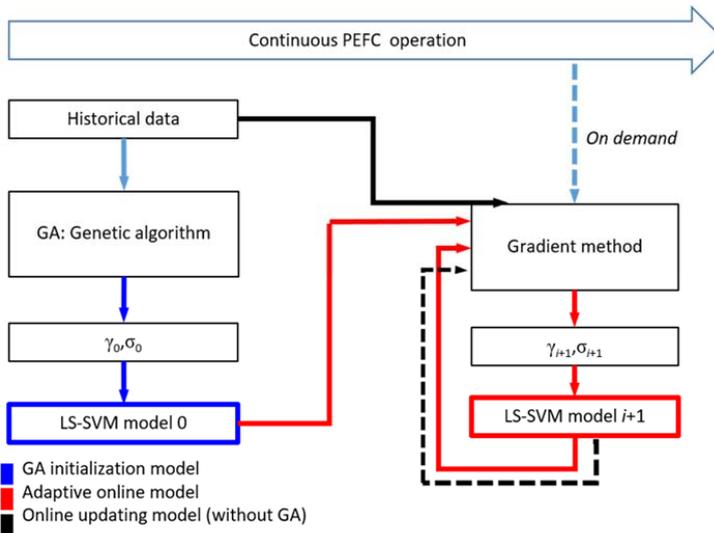


Abb. 32: Online-update der Hyperparameter

In jeden Evolutionsschritt des GA wurde das LSSVM-Modell neu trainiert und dessen Güte mit dem mittleren prozentualen Fehler (mean absolute percentage error, MAPE) bewertet. Dieses Verfahren ist sehr rechenintensiv und eignet sich damit zwar für die Initialisierung des Modells, aber nicht für schnelle Anpassungen der Hyperparameter im laufenden Betrieb. Beim weiteren Betrieb eines PEFC-Stacks ist durch Änderung äußerer Einflüsse oder Degradation eine schleichende Änderung des dynamischen Verhaltens zu erwarten. Um dem Rechnung zu tragen, muss von Zeit zu Zeit das LSSVM durch Anpassung der Hyperparameter nachjustiert werden. Für die Anpassung der Hyperparameter wurde ein wesentlich schnelleres Gradientenverfahren eingesetzt.

Drei Verfahren der Hyperparameter-Optimierung wurden betrachtet:

- Einmalige Optimierung (Initialisierung) mit dem GA,
- Online updating mit dem Gradientenverfahren, aber ohne GA-Initialisierung,
- Initialisierung mit GA, online updating mit dem Gradientenverfahren.

Anhand von vier Szenarien, die jeweils zwei Werte für die beiden Rampenparameter (Zeit und Höhe) umfassen:

- Rampenzeit: 1 s; Rampenhöhe: 0,2 A/cm²
- Rampenzeit: 60 s; Rampenhöhe: 0,2 A/cm²
- Rampenzeit: 1 s; Rampenhöhe: 0,5 A/cm²
- Rampenzeit: 60 s; Rampenhöhe: 0,5 A/cm²

wurde die Effizienz des LSSVM-Modells analysiert. Um die Relevanz einer Online-Optimierung der Hyperparameter nachzuweisen, wurde das LSSVM-Modell einmalig mit einem GA initialisiert (■). Wenn zusätzlich in Abständen die Hyperparameter mit einem Gradientenverfahren nachjustiert wurden, (■), zeigte sich in allen vier Fällen eine leichte Verringerung des MAPE. Der Methodenvergleich wurde vervollständigt durch eine Variante, in der die Initialisierung ebenfalls durch ein Gradientenverfahren durchgeführt wurde (■). Der deutlich höhere MAPE zeigt die Signifikanz der Hyperparameter und deckt gleichzeitig die Schwäche des Gradientenverfahrens auf, bei einer Optimierung oft nur lokale Minima zu finden. Die empfohlene Kombination ist daher eine erstmalige Optimierung der Hyperparameter mit dem GA, und danach sukzessive eine Anpassung der Hyperparameter mit einen schnellen Gradientenverfahren. Die Entwicklung der dynamischen ML-Modelle für den Betrieb von PEFCs wurden in einer Dissertation abgeschlossen.²¹

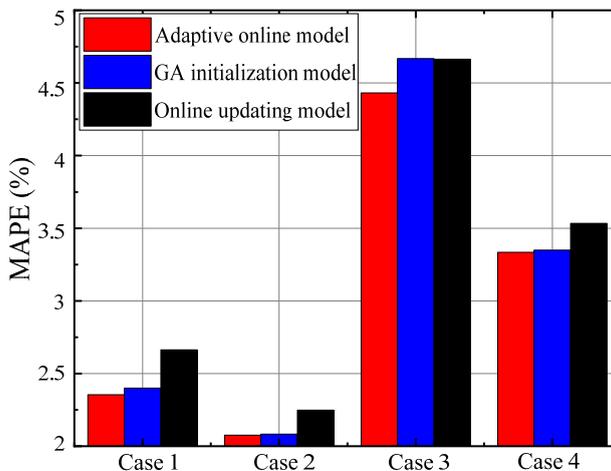


Abb. 33: Mittlerer prozentualer Fehler

²¹ Zou, W. Machine Learning in Modeling of the Dynamics of Polymer Electrolyte Fuel Cells, Dissertation, RWTH Aachen, 2021

3.3 Eine experimentelle Untersuchung des Ethanol-Upgradings zu Iso-Butanol auf NiPt/C-Katalysatoren in einem Autoklavenreaktor²²

Die Synthese von Iso-Butanol ausgehend von CO₂-basiertem Ethanol mittels der so genannten Guerbet-Reaktion hat in der jüngsten Vergangenheit großes wissenschaftliches und technisches Interesse geweckt, da Iso-Butanol wegen seiner günstigen chemischen und physikalischen Eigenschaften als Ersatzstoff für konventionelles Benzin angesehen werden kann. Dadurch können bei Einsatz von Iso-Butanol im Transportsektor signifikante Mengen an CO₂-Emissionen eingespart werden.

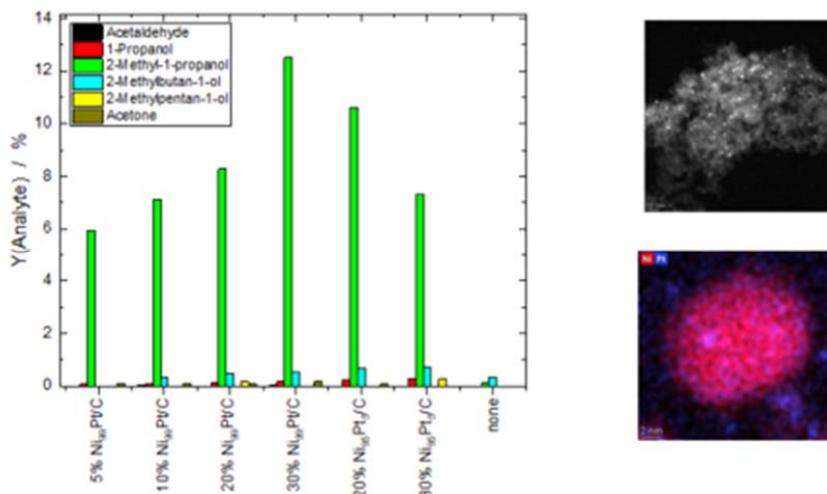


Abb. 34: Ausbeuten an verschiedenen Reaktionsprodukten auf unterschiedlichen Katalysatoren (links) und elektronenmikroskopische Aufnahmen des NiPt/C-Katalysators

Das IEK-14 hat in diesem Zusammenhang eine große Anzahl an Katalysatoren synthetisiert und in der Guerbet-Reaktion getestet. Allen Katalysatoren ist gemeinsam, dass sie auf Aktivkohlen aufgebracht worden sind. Als besonders vielversprechend haben sich dabei Legierungen aus Nickel und Platin erwiesen. Diese Legierungen wurden mit unterschiedlichen atomaren Verhältnissen von Nickel zu Platin synthetisiert und in unterschiedlichen Mengen auf die Aktivkohlen imprägniert. Die obenstehende Abbildung zeigt auf der linken Seite die Ausbeuten an verschiedenen Reaktionsprodukten für unterschiedliche Katalysatoren. Dabei wies die Probe mit einem atomaren Nickel/Platin-Verhältnis von 99:1 und einer Beladung von 30 Ma.-% mit 13% die höchste Ausbeute an Iso-Butanol (2-Methyl-1-Propanol) auf. Die Selektivität zum Iso-butanol betrug 93%. Dieser Katalysator zeigte über einen Zeitraum von 24 h ein stabiles Betriebsverhalten. Auf der rechten Seite der Abbildung sind elektronenmikroskopische Aufnahmen dieses Katalysators gezeigt. Es ist eine einheitliche Verteilung von kleinen Ni- und Pt-Partikeln auf der Oberfläche der Aktivkohle zu erkennen. Dies ist eine Grundvoraussetzung für eine hohe katalytische Aktivität.

²² J. Häusler, J. Pasel, F. Woltmann, A. everwand, M. Meledina, H. Valencia, M. Lipinska-Chwalek, J. Mayer, R. Peters, Catalysts 2021, 11, 406





4

Ausblick

Ausblick auf neue FuE-Vorhaben

- Hochtemperatur-PEM-Brennstoffzellen mit in Polymermembranen immobilisierten protischen ionischen Flüssigkeiten als Elektrolyt
- HyInnolyse: Dynamik, gekoppelte Systeme und Wasserstoffspeicher und HyInnoCells: Produktion elektrochemischer Zellen
- PEP.IN: Industrialisierung der PEM-Elektrolyseproduktion – Produktionsauslegung
- QM-GDL: GDL-Qualitätssicherung für den Markthochlauf
- Ermittlung von räumlich aufgelösten Konzentrationsprofilen für die Edukte und Produkte im Reaktor für den MtG-Prozess im Projekt Decartrans
- HYINNOCHEM: Methanolsynthese aus grünem Wasserstoff
- HYINNOSOFC: Hochtemperatur-Brennstoffzellen mit flexibler Brennstoffnutzung für eine unabhängige Energieversorgung
- Demonstrationsprojekt „NRW-Revier-Power-to-BioJetFuel“
- Projekt STACY: Towards Safe Storage and Transportation of Cryogenic Hydrogen

4.1 Hochtemperatur-PEM-Brennstoffzellen mit in Polymermembranen immobilisierten protischen ionischen Flüssigkeiten als Elektrolyt

Für die zukünftigen wissenschaftlichen Aktivitäten wurden zwei Anträge zur Förderung bei der DFG und BMWF eingereicht. Diese sind z.Z. unter noch Begutachtung. Die Ergebnisse der bisherigen Untersuchungen zeigen die zentrale Rolle des Protonenübertragungsschritts für die Kinetik der Sauerstoffreduktionsreaktion (ORR) in derartigen nichtwässrigen aber protischen Elektrolyten (PIL). Zur weiteren Aufdeckungen der Zusammenhänge zwischen der molekularen Struktur des Elektrolyten und Parametern wie den Restwassergehalt und Betriebstemperatur auf den mikroskopischen Mechanismus der Elektrodenreaktionen sind daher spektroelektrochemische Untersuchungen (Raman/IR) und elektrochemische AFM-Untersuchungen (E-AFM) geplant und in Arbeit.

Neben den experimentellen Untersuchungen sind auch theoretische Arbeiten in Kooperation mit dem IEK-13 im Rahmen einer HITEC-finanzierten Promotionsarbeit begonnen worden um die Struktur der Elektrolyt/Elektrodenrenzfläche bzw. der elektrochemischen Doppelschicht zu simulieren. Hierbei sollen Methoden basierend auf der Dichte-Funktionaltheorie und der Molekulardynamik zum Einsatz kommen (Quantum Espresso, LAMMPS, CP2K). Ziel ist ein genaues Verständnis des Protonentransfers zur Elektrodenoberfläche. In ionischen Flüssigkeiten, d.h. „Salzschmelzen“ liegt eine verhältnismäßig starre elektrochemische Doppelschicht aus Kationen- und Anionenlagen vor. In den untersuchten PIL-Elektrolyten sind nur das Kation bzw. vorhandenes Restwasser potentielle Protonendonatoren. Die Art der die Elektrodenoberfläche terminierenden Ionenlage und die Ordnung in der Lagenstruktur hängt vom Elektrodenpotenzial relativ zum Nullladungspotential (PZC) der Elektrode und vom Restwassergehalt ab. Das PZC ist eine Größe spezifisch für eine bestimmte Kombination von Elektrodenmaterial und Elektrolyt. Experimentelle Messungen des PZC für die in den vorangehenden Arbeiten verwendeten PILs sind ebenfalls in Arbeit.

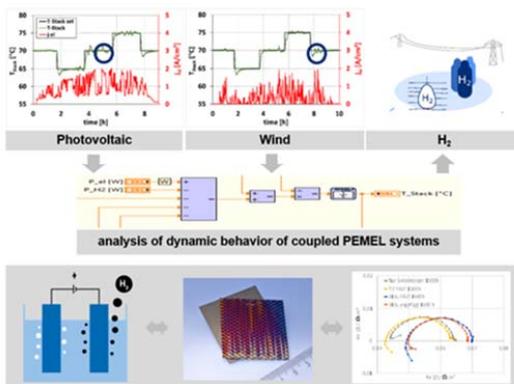
Die nächsten Optimierungsschritte für die Immobilisierung der PILs bzw. der Herstellung von Elektrolytmembranen ist die Verwendung von PIL-Mischungen um Protonenleitfähigkeit und Sauerstofftransport zu verbessern. Bei der Zellpräparation gilt es, den Kontakt zwischen Elektrode (GDE) und Elektrolytmembran durch Optimierung der Katalysatorschicht und des verwendeten Binders und geeigneten Bedingungen für das Verpressen weiter zu verbessern.

4.2 HyInnoLyse - Dynamik, gekoppelte Systeme und Wasserstoffspeicher und HyInnoCells - Produktion elektrochemischer Zellen

Das Verbundvorhaben HyInnoLyse

Die großtechnische Wasserstofferzeugung aus fluktuierend verfügbarer Elektrizität mittels Wasserelektrolyse bildet einen unverzichtbaren Baustein in einer zukünftig CO₂-neutralen Energieversorgung. Durch parallele und komplementäre Untersuchung der Komponenten und des Betriebsverhaltens ist es möglich, Elektrolysesysteme für den dynamischen Betrieb mit erneuerbaren Energiequellen nachhaltig zu optimieren. Dabei stehen die Senkung der Investitionskosten, die Steigerung der Lebensdauer und der Effizienz im Fokus. Ziel des Projektes ist, eine robuste Systemtechnik für Elektrolyseure zu entwickeln und gleichzeitig das Wissen um das dynamische Systemverhalten und mögliche Degradationsmechanismen die vom dynamischen Betrieb ausgelöst werden zu schaffen.

HyInnoLyse targets the requirements for the dynamics of electrolysis in renewable energy systems
Influence of load on dynamic behavior of process variables (temperature, pressure, ...)



• APPROACH

- Modelling PEMEL & intermediate H₂ storage systems
- Analysis of interconnection variations of PEMEL systems, intermediate storages, and power electronics
- Analysis of dynamic behavior in coupled systems and components
- Corrosion and stability tests

PROJECT PARTNERS



Abb. 35: Dynamik von Elektrolyseuren in gekoppelten Systemen - HyInnoLyse

Basierend auf Untersuchungen an bestehenden Prüfständen der Forschung und Industrie werden Systemmodelle auf Basis der grundlegenden Reaktionen unter Berücksichtigung von Flächeneffekten (Variation der Stromdichteverteilung) und den Wechselwirkungen mit den Nebenaggregaten erstellt. Diese Modelle sollen neben dem dynamischen Verhalten ebenfalls die Degradation berücksichtigen. Die Nutzung fortschrittlicher Leistungselektronik und die Hebung von Synergien mit dem automotive Segment erschließen weitere Kostensenkungen insbesondere vor dem Hintergrund der zunehmenden Elektrifizierung der Mobilität.

Die direkte Kopplung der Elektrolyse mit fortschrittlicher Wasserstoffspeichertechnik ermöglicht eine Entkopplung des Systems von der Dynamik des Gasnetzes. Hier liegt die Herausforderung auch in der thermischen Einbindung des Energiespeichers in das Gesamtsystem.

Das Verbundvorhaben HyInnoCells

In den HyInno-Projekten wird eine standortgerechte Systemauslegung und Technologieauswahl adressiert. Die Weiterentwicklung des Kostentreibers Leistungselektronik wird zu einer

signifikanten Senkung der Investitionskosten führen. Damit die neue Leistungselektronik die Lebensdauer des Systems nicht negativ beeinflusst, soll die Degradation in Abhängigkeit von unterschiedlichen Betriebsbedingungen und in Kombination mit kostengünstigen Anoden- und Kathodenbeschichtungen untersucht werden. Durch enge Zusammenarbeit mit den anderen Projekten des Zukunftsclusters wird der gesamte Lebenszyklus des Elektrolysesystems betrachtet, um so die Forschungsaktivitäten nachhaltig zu stärken und Arbeitsplätze zu schaffen.

HylInnoCells creates porous transport layers for electrochemical cells with optimized properties

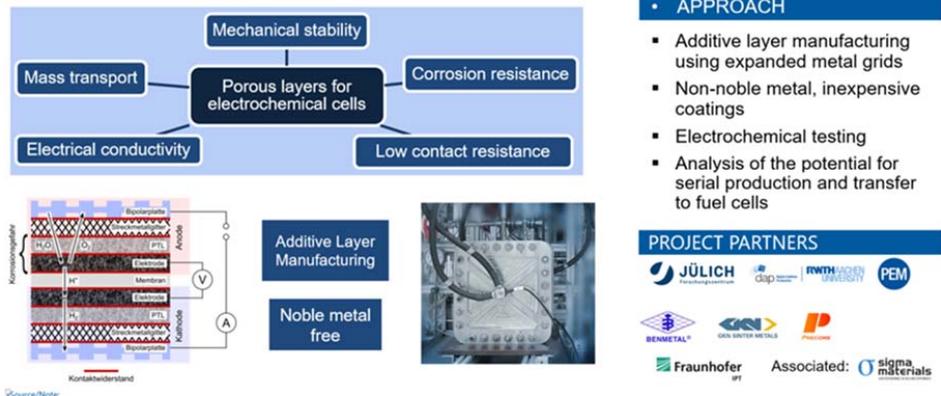


Abb. 36: Poröse Transportschichten für elektrochemische Zellen - HylInnoCells

Während die Aufklärung von Alterungsphänomenen mit Hilfe von elektrochemischen Zellcharakterisierungen und der Modellbildung der Degradation dem Themenfeld Grundlagenforschung zuzuordnen sind, bildet die Entwicklung von skalierbaren Leistungselektronikmodulen die angewandte Forschung ab. Das verbindende Glied sind die elektrochemischen Messungen, die zur Ergebnisvalidierung genutzt werden.

Im Projekt werden Entwicklungen angestoßen, die bis dato noch nicht in Kombination mit Elektrolyseuren betrachtet wurden und auch in ihrer technischen Reife dementsprechend gering einzustufen sind. Es wird der Nachweis der Funktionalität mit Hilfe von Simulationen und Versuchsaufbauten im Labor angestrebt.

4.3 PEP.IN - Industrialisierung der PEM-Elektrolyseproduktion – Produktionsauslegung

Im Projekt PEP.IN werden von Seiten des IEK-14 in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner H-TEC ein bestehender PEM-Elektrolyse-Stackaufbau hinsichtlich des mechanischen und elektrochemischen Verhaltens untersucht. Aus den Studien sollen Optimierungsvorschläge für ein verbessertes Stackdesign hinsichtlich diverser Designparameter wie der Beschichtung oder der mechanischen Auslegung einzelner Stack-Komponenten abgeleitet werden.

Zur Bestimmung des Status Quo des bestehenden Stackaufbaus werden am IEK-14 etablierte Messmethoden zur Bestimmung der Druckverteilung im Stack angewendet (beispielhafte Darstellung in Abbildung 37a). Diese dienen zur Bewertung des mechanischen Verhaltes, das ebenfalls, wie in Abbildung 37b dargestellt, mithilfe der FEM modelliert werden soll, um konstruktive Entscheidungen zum Stackdesign parametrisch untersuchen zu können. Weiterhin soll das korrosive Verhalten von Elektrolyse Stacks in-situ und ex-situ untersucht werden. Zur ex-situ Untersuchung werden beispielsweise Kontaktwiderstände vor und nach dem elektrochemischen Betrieb untersucht (siehe Abbildung 37c). Zur in-situ Untersuchung soll unter anderem das in Abbildung 37d dargestellte und am IEK-14 konzipierte drei Elektroden-Setup verwendet werden, um Korrosionsströme von Komponenten und deren Beschichtungen messen zu können.

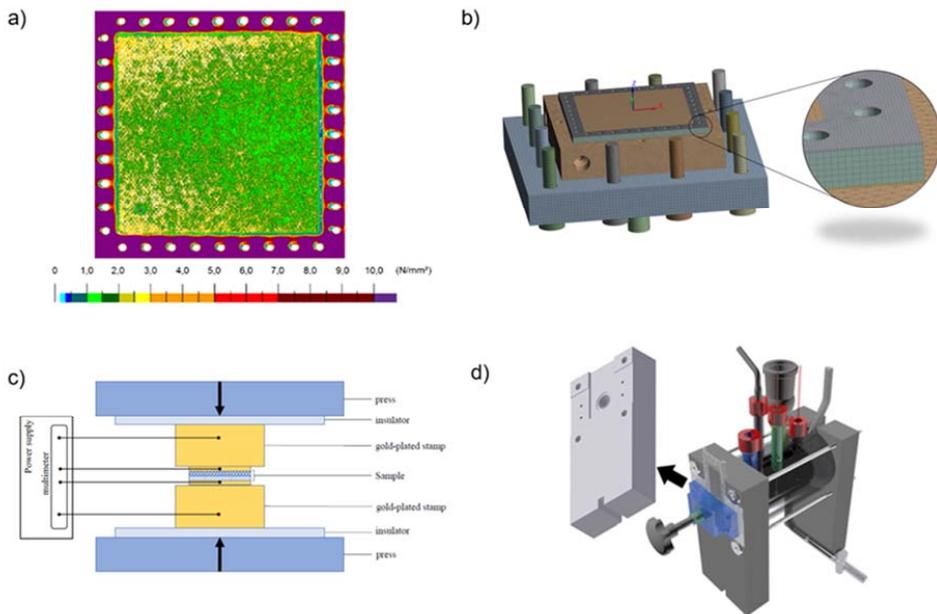


Abb. 37: Unterschiedliche Methoden zur Untersuchung von Elektrolyse Stacks. a) Druckverteilung mittels drucksensitiver Folien; b) Modellierung des Mechanischen Verhaltens mittels FEM; c) Kontaktwiderstandsmessungen; d) Aufbau zur Messung des korrosiven Verhaltens von Bauteilen und Beschichtungen

In einem weiteren Projektzweig soll das am IEK-14 entwickelte Patent zur „Einkomponenten-Bipolarplatte“ weiterentwickelt werden und Möglichkeiten gefunden werden die Technologie auf Systeme der Projektpartner übertragen zu können.

4.4 QM-GDL - GDL-Qualitätssicherung für den Markthochlauf

Gasdiffusionsschichten sind stochastische Faser-Materialien, die zum Stoff- und Ladungstransport zwischen Elektroden und Strömungsverteilern eingesetzt werden. Im Projekt wird

der Frage nachgegangen, inwiefern produktionsbedingte Schwankungen von Schichtdicken- und -dichten die mechanischen Eigenschaften von Gasdiffusionsschichten und infolgedessen die Polarisationskurven von PEM-Brennstoffzellen beeinflussen.

Im Projekt werden Verteilungsfunktionen von Schichtdicken- und -dichten erfasst, wobei insbesondere statistische Ausreißer dynamisch-mechanisch untersucht werden. Mithilfe von Röntgentomographie und einer dem Strömungsverteiler nachempfundenen Einspannvorrichtung wird die lokale Kompression von Schichten in Zellen untersucht und mit Erkenntnissen der mechanischen Analyse korreliert. Elektrochemische Tests sollen helfen weitergehende Korrelationen mit der elektronischen Leitfähigkeit und dem Grenzstromverhalten von Brennstoffzellen zu finden.

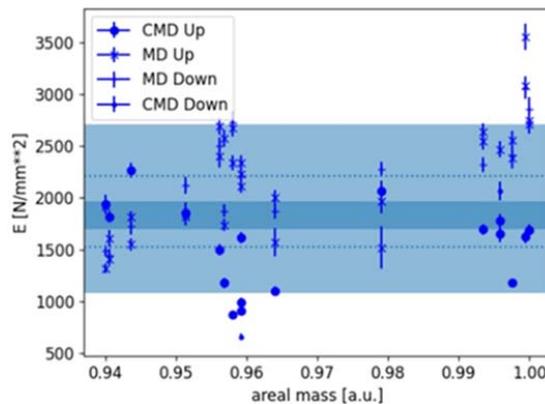


Abb. 38: Biegesteifigkeit einer GDL in Abhängigkeit vom Flächengewicht. Die Biegung erfolgt entlang (MD) und quer (CMD) zur Maschinenrichtung aus der Produktion.

Erste Ergebnisse zeigen, dass Dicken und Massen der Schichten eine Streuung von ca. 10% aufweisen. Eine Korrelation mit mechanischen Eigenschaften kann bislang nicht festgestellt werden. Die Projektarbeit soll helfen, die Auswirkungen von Produktionstoleranzen zu quantifizieren und gegebenenfalls zu präzisieren, sofern derzeitige Toleranzen zu unzureichender Qualität bezüglich Zellzusammenbaus und -betriebs führen.

4.5 Ermittlung von räumlich aufgelösten Konzentrationsprofilen für die Edukte und Produkte im Reaktor für den Methanol-to-Gasoline-Prozess im Projekt Decartrans

Grüne und nachhaltige Kraftstoffe für den Transportsektor können auf Basis von CO₂, das aus der Luft, biogenen Quellen oder Industrieabgasen abgetrennt worden ist, und grünem H₂ synthetisiert werden. Beispiele sind Methanol, Ethanol oder Dimethylether. Methanol kann in einem nächsten Schritt mittels des Methanol-to-Gasoline (MtG)-Prozesses zu Ottokraftstoff weiterverarbeitet werden. Dazu wird das IEK-14 in Decartrans in einem ersten Schritt räumlich aufgelöste Konzentrationsverläufe der Produkte und Edukte des MtG-Prozesses in einem Profilreaktor experimentell ermitteln. Die erzielten experimentellen Daten werden dann in

einem zweiten Schritt die Basis für ein Reaktormodell sein, das mit Hilfe von CFD-Simulationen entwickelt wird. Die wissenschaftlichen, technischen und wirtschaftlichen Chancen des Teilvorhabens liegen in der Verbesserung des MtG-Prozesses und den damit einhergehenden Emissionsverringerungen und Kraftstoffeinsparungen. Risiken liegen vor allem in einer möglicherweise nicht ausreichend exakten Bestimmung der räumlich aufgelösten Edukt- und Produktkonzentrationen im MtG-Reaktor, wodurch auch das daraus abgeleitete Modell ungenauer werden würde. Bei der auf den experimentellen Ergebnissen aufbauenden Modellbildung ist zu beachten, dass der Gesamtprozess in seiner Fülle der ablaufenden Reaktionen sowie deren Wechselwirkungen sehr komplex ist. Mittels statistischer Versuchsplanung werden daher zuerst wichtige Einflussgrößen identifiziert und deren Wechselwirkungen untereinander untersucht und ein empirisches mathematisches Modell für den Parameterraum erstellt. Für die Modellentwicklung werden aufgrund der Komplexität zunächst die Einzelprozesse simulativ erfasst und untersucht. Die Modellentwicklung ermöglicht die Optimierung des Reaktordesigns, z. B. bezüglich möglicher Hot-Spots und einer optimalen Produktausbeute und -qualität (auch in Bezug auf einen geringeren Aromatengehalt).

Es ist positiv für die wirtschaftlichen Erfolgsaussichten von strombasierten Kraftstoffen wie Benzin aus dem MtG-Prozess, dass im Gegensatz zur Elektromobilität oder zu gasförmigen Kraftstoffen keine Investitionen in eine flächendeckende Verteilerinfrastruktur getätigt werden müssen. Bei Abschluss des Projektes liegt ein experimentell validiertes Reaktormodell vor, das eine Optimierungsstrategie für den MtG-Reaktor enthält und eine Effizienzsteigerung des Prozesses möglich macht. Firmen aus dem Chemieanlagenbau verfügen über einen Prozess und ein Produkt, das als grün und nachhaltig eingestuft werden kann, und in deren Herstellung und Weiterverarbeitung sie auch langfristig investieren können. Die Automobilindustrie verfügt langfristig über einen grünen Kraftstoff für den langlaufenden Straßengüterverkehr, für den sich eine Motorenadaption auch auf lange Sicht rechnet. Das sichert durch eine Verbesserung der Wettbewerbssituation vorhandene und schafft neue Arbeitsplätze und sichert den bestehenden Markt für kohlenwasserstoffbasierte Kraftstoffe und den Gütertransport für die nächsten Jahrzehnte ab.

4.6 HylInnoChem – Methanolsynthese aus grünem Wasserstoff

HylInnoChem verfolgt zwei Ansätze zur Synthese werthaltiger Chemikalien unter Nutzung von grünem Wasserstoff in der Chemieindustrie: Die elektrochemische Synthese von Wasserstoffperoxid und die thermokatalytische Synthese von Methanol. Für die elektrochemische Synthese von Wasserstoffperoxid wird ein Reaktor entwickelt, welcher aus grünem Wasserstoff und Sauerstoff hochkonzentrierte Wasserstoffperoxid Lösungen synthetisieren kann. Das Wasserstoffperoxid kann anschließend in Prozessen zur Synthese von Propylenoxid oder zur Anolytsoleentchlorung in der Chloralkali-Elektrolyse eingesetzt werden. Für die thermokatalytische Methanolsynthese wird ein neues Reaktorkonzept für einen Power-to-Liquid Prozess entwickelt. Um Methanol nachhaltig herzustellen, kann CO₂ aus Biogas abgetrennt oder aus dem Abgas der gasmotorischen Verbrennung abgetrennt werden. In Verbindung mit Wasserstoff, der aber via Elektrolyse aus Windkraft fluktuierend vorliegt, soll Methanol in einem geeigneten Reaktorkonzept dynamisch synthetisiert werden. Im Vergleich zum Stand der Technik wird ein Reaktor entwickelt, welcher energieeffizient ist und durch Prozessintensivierung einen verbesserten Wärme- und Stofftransport erreicht.

Das IEK-14 wird in diesem Vorhaben einen Power-to-Liquid-Reaktor für die dynamische Methanolsynthese mit Unterstützung von strömungsdynamischen Simulationen konstruieren und erproben. Zu den Arbeitspaketen zählen die Auslegung des Reaktors mithilfe von strömungsdynamischer Simulation, die Konstruktion und Fertigung des Reaktors und die experimentelle Verifikation. IEK-14 beteiligt sich zudem am Arbeitspaket Systemintegration.

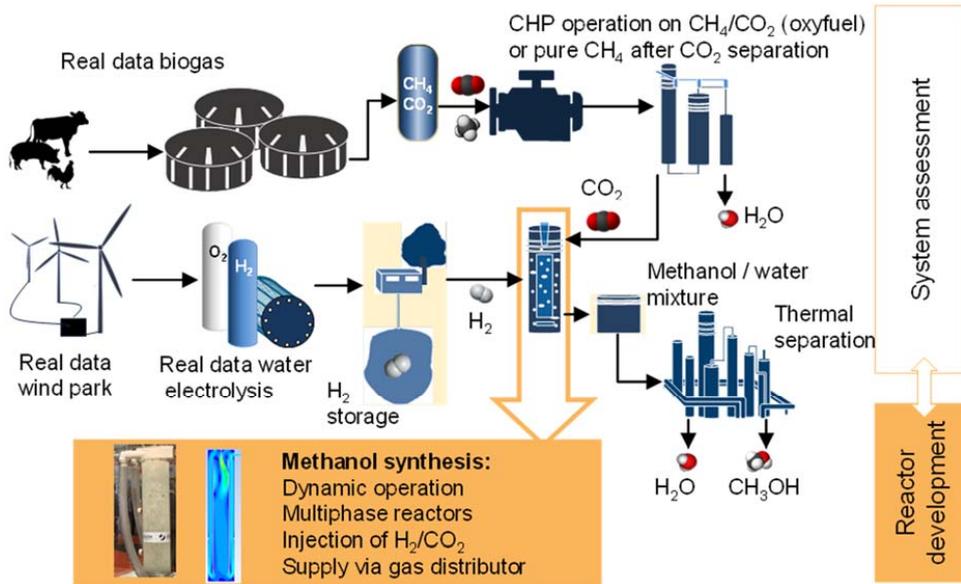


Abb. 39: Darstellung des Arbeitsplans im Projektteil „Dynamische Methanolsynthese“ im HyInnoChem-Projekt.

Die Projektpartner des IEK-14 sind RWTH Aachen, Covestro Deutschland, Fumatech BWT, TLK energy, Carbon Minds und New Power Pack. Das Projekt wird im Rahmen des Zukunftsclusters Wasserstoff durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert.

4.7 HyInnoSOFC – Hochtemperatur-Brennstoffzellen mit flexibler Brennstoffnutzung für eine unabhängige Energieversorgung

In den kommenden Jahren wird sich die Nutzung von effizienten, dezentralen mikro Kraftwärmekopplungs-Systemen (KWK) zur Deckung des Strom- und Wärmebedarfs deutlich erhöhen. Wichtig ist, dass die bereits jetzt am Markt erhältlichen Systeme, die auf den Betrieb mit Erdgas ausgelegt wurden, auch in Zukunft, das heißt bei der angestrebten Erhöhung des H_2 -Anteils im Gasverteilnetz oder bei Umstellung auf 100% H_2 genutzt werden können. Damit wird für Kunden und Investoren eine wichtige Planungssicherheit für den Betrieb solcher Systeme erreicht.

HyInnoSOFC adressiert eine standortgerechte Systemauslegung. Basierend auf Untersuchungen der Forschung und Industrie werden die Systemkomponenten charakterisiert und in

einem nächsten Schritt optimiert. Insbesondere die Brenngasaufbereitung im Reformer bei unterschiedlich zusammengesetzten Brenngasen mit einem H₂-Anteil von bis zu 20% steht im Zentrum der Betrachtungen. Neben der Weiterentwicklung der Komponenten ist die Bestimmung der Gaszusammensetzung eine zu beantwortende Fragestellung. Zur Entwicklung einer gasflexiblen, effizienten Betriebsführung sind eine weitere Sensierung der Systeme sowie die Kompositionsmessung von Vorverbrennungs- und Verbrennungsgasen im Projekt vorgesehen. Weiterhin soll mit einer Entwicklung und Integration relevanter Komponenten die Voraussetzung für eine einfache Umstellung auch auf 100% H₂ geschaffen werden. Bestehend aus einem OEM und drei wissenschaftlichen Partnern deckt das Konsortium die gesamte Forschungspalette ab und stellt eine holistische Betrachtung der Gasaufbereitung für mikro-KWK-Systeme dar.

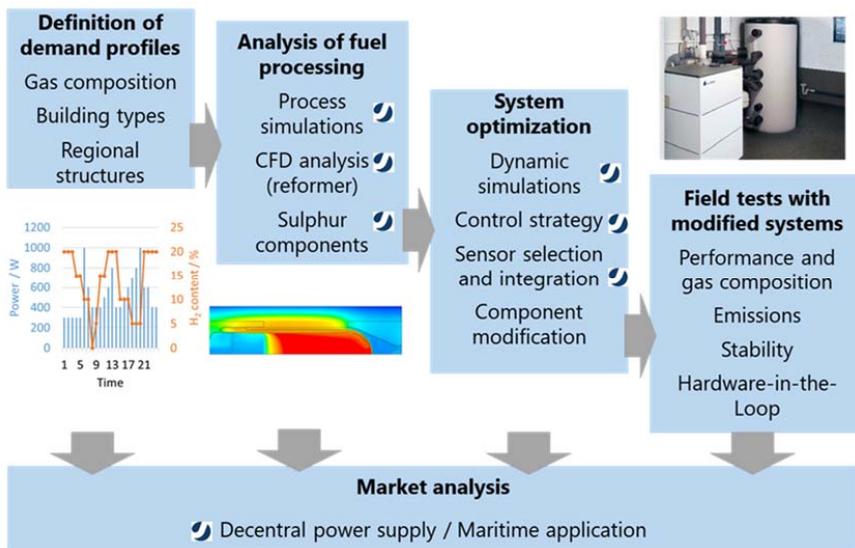


Abb. 40: Darstellung der Arbeitspakete im Projekt HlynnoSOFC. Die Arbeitspakete mit der Beteiligung des IEK-14 werden mit dem Logo des Forschungszentrums Jülich hervorgehoben.

Die Projektpartner des IEK-14 sind RWTH Aachen und Sunfire Fuel Cells. Das Projekt wird im Rahmen des Zukunftsclusters Wasserstoff durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert.

4.8 Demonstrationsprojekt „NRW-Revier-Power-to-BioJetFuel“

Gemeinsam mit den Partnern BP Europa, RWE Power und RWE Renewables wird die grundsätzliche Machbarkeit einer Demonstrationsanlage im Rheinischen Revier zur Herstellung regenerativer synthetischer Rohstoffe auf Basis von Klärschlamm (und ggf. anderer Biomasse) und regenerativem H₂ sowie ihrer Weiterverarbeitung und Nutzung im Ruhrgebiet untersucht. Der Ansatz zielt darauf ab, die Erschließung und Verwertung von biogenem CO₂

für die Produktion klimaneutraler Treibstoffe zu demonstrieren und dabei die Biomasse Klärschlamm einzusetzen. Das Potential der demonstrierten Technik soll als Blaupause für intelligent angewandte Sektorenkopplung über die Grenzen von Nordrhein-Westfalen hinaus und zur Stärkung der Revierregionen ausgelotet werden.

Als Wasserstoffquellen werden sowohl mit erneuerbarem Strom gespeiste Elektrolysetechniken (alkalisch oder PEM) als auch die Entnahme von erneuerbarem H₂ aus einer Wasserstoffpipeline betrachtet. Als Kohlenstoffquelle soll wahlweise eine Mono-Klärschlammverbrennungsanlage oder eine Anlage zur Hochtemperaturkonversion, z. B. im Rheinischen Revier am RWE Power-Standort in Hürth-Knapsack, dienen. Die Rohprodukte Methanol und ein Kohlenwasserstoffgemisch sollen über drei unterschiedliche Synthesewege vor Ort hergestellt werden. Die Weiterverarbeitung der Rohprodukte soll unter Nutzung der Raffinerie-Infrastruktur von BP in Gelsenkirchen oder Lingen erfolgen. Der erneuerbare Strom soll aus einem RWE-eigenen Windpark im Rheinischen Revier oder in Norddeutschland gewonnen werden.

Demonstrationsprojekt NRW-Revier-Power-to-BioJetFuel

Techno-ökonomische Analyse verschiedener Prozessrouten zur Produktion von synthetischem Kerosin auf Basis von grünem Wasserstoff und Kohlenstoffdioxid

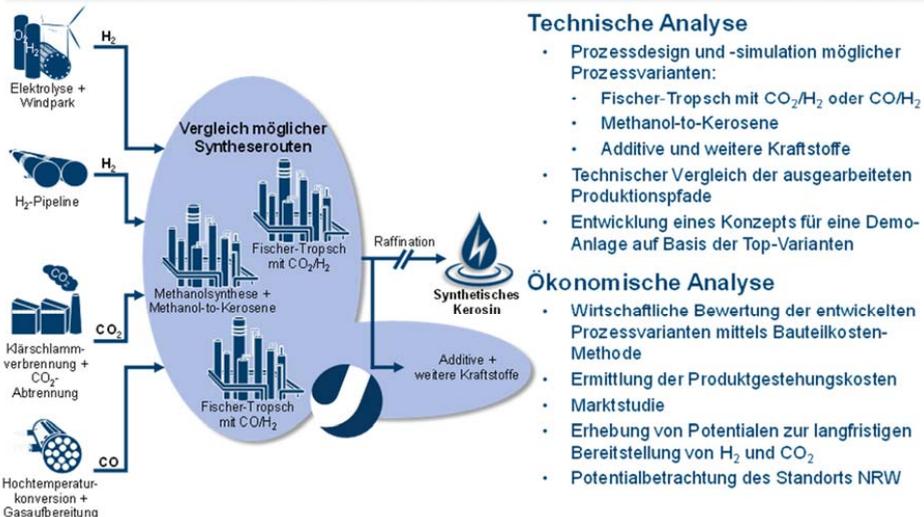


Abb. 41: In der Konzeptstudie werden drei verschiedene Varianten zur Herstellung von Rohprodukten aus Klärschlamm und regenerativem Wasserstoff und ihre Weiterverarbeitung zu nachhaltigem Flugzeugtreibstoff sowie Additiven und weiteren Kraftstoffen untersucht.

Das IEK-14 bildet im Projekt die Schnittstelle zwischen dem von RWE Renewables bereitgestellten Wasserstoff, dem von RWE Power bereitgestellten Kohlendioxid bzw. Syngas (CO + H₂) und der Produktaufbereitung durch BP Europa SE. Die Schnittstellen-Aktivitäten vom IEK-14 sind in Abbildung 41 zusammengefasst.

4.9 Projekt STACY – Towards Safe Storage and Transportation of Cryogenic Hydrogen

Weltweiten Bemühungen zielen auf die Dekarbonisierung des Energiesektors mit einem steigenden Anteil erneuerbarer Energien im Energiemix. Energiespeichertechnologien sind erforderlich, um überschüssige, aus fluktuierenden Quellen erzeugte Energie zu speichern und bei Bedarf verfügbar zu machen. In diesem Zusammenhang ist davon auszugehen, dass die großtechnische Speicherung und der Transport von verflüssigtem (kryogenem) Wasserstoff (LH₂) aufgrund der hohen Speicherdichte eine grundlegende Rolle in einer potenziellen künftigen Wasserstoffwirtschaft spielen wird.

Die Gewährleistung einer sicheren Implementierung von LH₂-Speicher- und Transporttechnologien ist im Hinblick auf den wirtschaftlichen Nutzen und die öffentliche Akzeptanz zwingend erforderlich. Das übergeordnete Ziel des internationalen Projekts STACY ist es daher, einen Beitrag zur Sicherheit von LH₂-Speicherung und -Transport zu leisten, indem

- (1) fundamentale sicherheitsrelevante Parameter der Wasserstoffverbrennung, die für sehr niedrige Temperaturen noch nicht verfügbar sind, experimentell ermittelt werden,
- (2) neuartige Katalysatoren für katalytische Rekombinatoren zur Verhinderung der Bildung zündfähiger Gasgemische bei Wasserstoff-Leckagen entwickelt und qualifiziert werden,
- (3) fortschrittliche numerische Werkzeuge zur Untersuchung von Szenarien potenzieller Wasserstofflecks und zur Bewertung der Effizienz von Sicherheitsmaßnahmen in die Anwendung kommen.

Im Rahmen des Teilprojekts „Betriebsverhalten katalytischer Rekombinatoren“ erfolgt im IEK-14 die Qualifizierung neuartiger Katalysatoren sowie die Entwicklung von Rechenmodellen, die eine Bewertung der Effektivität der Sicherheitsmaßnahmen im Rahmen von Sicherheitsanalysen ermöglichen.



Abb. 42: STACY – Sichere Speicherung und Transport von flüssigem H₂ (LH₂)

Die erzielten Ergebnisse sollen die Entwicklung sicherheitsbezogener Regelwerke und Normen unterstützen, die öffentliche Akzeptanz von LH₂-Technologien erhöhen und sich somit positiv auf die wirtschaftlichen und gesellschaftlichen Aspekte im Zusammenhang mit LH₂ auswirken. Der Industriebeirat spielt eine zentrale Rolle bei der Formulierung des industriellen Bedarfs, der Beratung zu technischen Randbedingungen und der Überwachung des Projektfortschritts.





5

Daten

Zahlen, Daten und Fakten

- Das Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-14)
- Abteilungskompetenz im Überblick
- Publikationen, Technologietransfer und Ressourcen
- Preise und Auszeichnungen
- Gremienarbeiten
- Anfahrtsbeschreibung
- Abkürzungsverzeichnis

5.1 Das Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-14)

Wenige Monate vor dem zugrundeliegenden Berichtszeitraum 2020 und 2021 wurde das ehemalige IEK-3 in zwei Institutsbereiche aufgeteilt. Unter der Leitung von Professor Stolten wird das neue IEK-3 basierend auf der ehemaligen Abteilung „Verfahrens- und Systemanalyse“ mit der Ausrichtung auf „Techno-ökonomische Systemanalyse“ weitergeführt. Die anderen, experimentell ausgerichteten Abteilungen des ehemaligen IEK-3 wurden unter der bekannten Bezeichnung „Elektrochemische Verfahrenstechnik“ zum neuen Institutsbereich IEK-14 formiert und werden bis zur erfolgreichen Berufung von bis zu zwei sich ergänzenden Direktor:innen von Professor Peters kommissarisch geleitet. Gut ein Jahr später wurden als weitere strukturelle Veränderungen die Abteilung „Festoxid-Wandler“ vom IEK-14 an das IEK-9 „Elektrochemische Grundlagen“ und die Abteilung „Sicherheitsforschung“ vom IEK-6 an das IEK-14 versetzt. Eine weitere Herausforderung für das IEK-14 waren die 2020 startenden politischen Initiativen zur Einleitung und Bewältigung einer globalen Energiewende sowie zu einem techno-ökonomisch getragenen Wandel in den deutschen Braunkohlerevieren. Mit beiden Initiativen waren und sind große Erwartungen im Hinblick auf die Beiträge der deutschen Energieforschung verbunden.

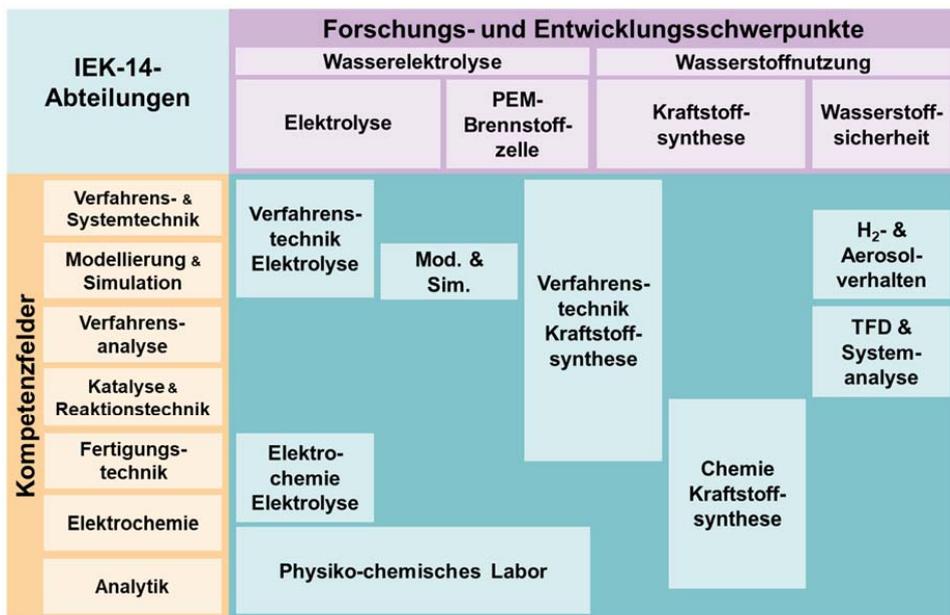


Abb. 43: Wissenschaftliche Fachabteilungen im Kreuzungsbereich von Kompetenzfeldern und FuE-Schwerpunkten

Die neue Abteilungsstruktur des IEK-14 verortet nach jeweiligem FuE-Schwerpunkt und Kompetenzfeldern kann Abbildung 43 entnommen werden. Der Themenschwerpunkt „Elektrolyse“ orientiert sich an drei unterschiedlichen, technologischen Konzepten der elektrochemischen Wasserspaltung. Für PEM-, AEM- und alkalische Elektrolyseure der nächsten und übernächsten Generation sollen technisch, ökonomisch und ökologisch verbesserte Systeme

erforscht und verifiziert werden. Dafür konnte die existierende multifunktionale Forschungsinfrastruktur um ein Wasserstofftechnikum mit einer MW-Elektrolysetesteinrichtung erweitert werden. Diese Testeinrichtung dient gleichzeitig als Untersuchungsgegenstand für eine zukünftige Wasserstoffherzeugung innerhalb eines integrierten, erneuerbaren Energiesystems, das im Zusammenhang mit weiteren Einrichtungen des Jülicher Living Lab Energy Campus (LLEC) Möglichkeiten und Grenzen der Sektorkopplung erschließen soll.

Die Erforschung von ionischen Flüssigkeiten als neuartige Elektrolyte für die bei über 100 °C betriebene, Polymermembran-basierte Brennstoffzelle erschließt sich mit neuen FuE-Vorhaben die nächste Entwicklungsstufe hin zu funktionstüchtigen, technisch relevanten Zellen.

Der Themenschwerpunkt „Kraftstoffsynthese“ hat seine auf Verfahrens- und Systemanalysen basierende Orientierungsphase zu ersten, vielversprechenden Ergebnissen im Hinblick auf geeignete Einsatzstoffe und Prozesspfade geführt und orientiert sich zusätzlich zur Prozessentwicklung auf die Katalysator- und Reaktorentwicklung für die Alkohol-, Benzin- und Kerosinsynthese.

Der neu ins IEK-14 eingeführte Schwerpunkt der Sicherheitsforschung wird sich in den folgenden drei bis fünf Jahren von seiner ursprünglichen Zielausrichtung, die auf der Absicherung von mit radioaktivem Brennstoff arbeitenden Kraftwerken lag, hin zu Sicherheitsanalysen, -konzepten und -einrichtungen für den Einsatz von Wasserstoff-basierten Energiesystemen entwickeln. Erste Vorhaben in diese Richtung werden bereits bearbeitet und neue Vorhaben zeichnen sich ab.

Die Kernkompetenz des IEK-14 und dessen Alleinstellungsmerkmal liegen in der fachlichen Kombination der Disziplinen Elektrochemie und Verfahrenstechnik von den Grundlagen bis hin zu den technischen Anwendungen in den Arbeitsbereichen Wasserelektrolyse und Wasserstoffnutzung. Dem liegt zugrunde, dass zur erfolgreichen Verifikation entsprechender Aggregate sowohl die Kenntnisse über die in den Kernkomponenten eingesetzten Materialien und ablaufenden Prozesse, als auch die Auslegung und das Design der einzelnen Komponenten und des Systems sowie mögliche Interaktionen und die jeweiligen Betriebsbedingungen in einen funktionalen Zusammenhang gebracht werden. Nur dieser integrierte Arbeitsansatz gewährleistet, dass die Technologielösungen als Verifikatoren die gesetzten Ziele wie hoher Wirkungsgrad, hohe spezifische Leistung, lange Lebensdauer und geringe Kosten erreichen.

Mit über 100 Mitarbeitern engagiert sich das IEK-14 in den Subtopics „Elektrochemie für H₂“ und „Strombasierte Kraftstoffe und Chemikalien“ im PoF IV-Programm MTET und stellt den Vertreter für das Topic „Chemische Energieträger“ im Kernteam der Initiative zur Helmholtz Energiewende-Roadmap (HETR). Im Rahmen der Initiativen zur bundesweiten H₂-Strategie sowie zum Strukturwandel im Revier hat sich das IEK-14 mit erkennbaren FuE-Beiträgen an einer Vielzahl von Aktivitäten beteiligt, was sich positiv auf die Sichtbarkeit, die Ressourcenbeschaffung und die Weiterentwicklung des IEK-14 auswirken wird. Insbesondere konnten durch die aktuellen Initiativen erheblich breitere Kooperationstätigkeiten mit einschlägigen Instituten und Lehrstühlen der RWTH Aachen aufgebaut werden, die das IEK-14 auch durch eine aktive Beteiligung an JARA-Energy weiter ausbauen wird.

Aufbau und Bewirtschaftung themenorientierter Kooperationen haben einen erheblichen Einfluss auf die Erreichbarkeit und die Güte von FuE-Zielen. Für komplexe Themen, die durch Fremdexpertise zu besseren Lösungen geführt werden können, ist das IEK-14 bedeutende Zusammenarbeiten mit FZJ-internen und -externen Forschungseinrichtungen und zahlreichen

Industrieunternehmen eingegangen. Zusammenarbeiten, die von Exzellenz und höchster Passgenauigkeit geprägt sind, werden zu strategischen Kooperationen weiterentwickelt. Das IEK-14 konnte seine Drittmittelerträge durch eine engagierte und zielgerichtete Projektakquise um ca. 30% im Jahr 2021 steigern. Wesentlicher Baustein sind dabei Fördermittel aus den Bundesministerien für Wirtschaft, Forschung und Verkehr und der EU. Mit dem Expertiseübertrag durch Publikationen und Präsentationen schafft das IEK-14 eine hohe Sichtbarkeit. Außerdem engagiert sich das IEK-14 in Lehrveranstaltungen an Universitäten, Hochschulen und Sommerschulen sowie in der Doktorandenausbildung zur Schulung des wissenschaftlichen Nachwuchses.

Für die wissenschaftliche Leitung aller Arbeitsfelder des IEK-14 ist Professor Peters verantwortlich und koordiniert gemeinsam mit seinem ständigen Vertreter Dr. Emonts übergreifende Belange der wissenschaftlichen Arbeitsthemen.



Institutsleiter (kommissarisch)

Prof. Dr.-Ing. Ralf Peters

Tel.: 02461-61-4260

E-mail: ra.peters@fz-juelich.de



**Ständiger Vertreter des Institutsleiters
und Wissenschaftlicher Koordinator**

Dr.-Ing. Bernd Emonts

Tel.: 02461-61-3525

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

5.2 Abteilungskompetenz im Überblick

Verfahrenstechnik Elektrolyse

Elektrochemie Elektrolyse

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.

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

Anlagen, Verfahren, Methoden

Einrichtungen

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

Modelle

- Beschreibung des Stoff-, Ladungs- und Wärmetransports

Einrichtungen

- 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



Dr.-Ing. Martin Müller

Tel.: 02461-61-1859

e-mail: mar.mueller@fz-juelich.de



Dr. Joachim Pasel

Tel. 0261-61-5140

e-mail: j.pasel@fz-juelich.de

Arbeitsgebiete, Leistungsangebote

Die Wasserelektrolyse und die PEFC werden von der MEA bis zum Stack in der Abteilung und in enger Kooperation mit der Verfahrenstechnik bis zum System bearbeitet. Funktionale Schichten – Membran, poröse Transportschichten – werden charakterisiert und ihre funktionale Kopplung zu allen Komponenten im Stack erarbeitet. Für die Charakterisierung funktionaler poröser Schichtsysteme werden neben Transportsimulationen auch Methoden der künstlichen Intelligenz, z. B. maschinelles Lernen, angewandt, um in der multiskaligen Kopplung bei der Stackauslegung Dimensionen reduzieren zu können.

Bei fortschreitender, technischer Entwicklung neuer zukunftsweisender Energiesysteme gewinnen wissenschaftliche Arbeiten zum Verständnis grundlegender Phänomene zunehmend an Bedeutung. Im Mittelpunkt stehen grundlegende Untersuchungen zum Ionentransport und zur elektrochemischen Kinetik flüssiger (nichtwässriger) und fester Elektrolyte für den Einsatz in zukünftigen Brennstoffzellen- und Batterieanwendungen. Ziel ist die Aufklärung der zugrundeliegenden physikalischen und elektrochemischen Mechanismen sowie der Material-/Struktureigenschaften. Neben experimentellen Techniken wie Bildgebung, Spektroskopie, elektrochemische/physikalische Methoden werden auch Modellierungsmethoden benutzt.

Anlagen, Verfahren, Methoden

Modelle und Methoden

- Simulationsmodelle zur Beschreibung von Stoff-, Ladungs- und Wärmetransportprozessen in Zellen und Stacks
- Simulationsmodelle zur Analyse der Eigenschaften funktionaler Schichten in Abhängigkeit ihrer Mikrostruktur
- Maschinelles Lernen zur Charakterisierung von funktionalen Schichten und Dimensionsreduktion in der Multiskalen-Kopplung

Einrichtungen und Methoden

- Bildgebende Analysemethoden: Elektronenmikroskopie (SEM/EDX), Differentialinterferenzkontrast-/Lichtmikroskopie (DICM), Rasterkraftmikroskopie (AFM), Röntgen-Nano-CT
- Elektrochemische Methoden: Impedanzspektroskopie (EIS), Mikroelektroden, Scheibenelektroden (RDE), Zyklovoltammetrie (CV), Chronoamperometrie (CA)
- Spektroskopische Methoden: (FT-)IR-Spektroskopie, Spektroelektrochemie (SNIFTIRS), Ramanspektroskopie/oberflächenverstärktes Raman (SERS)
- Physikalisch-chemische Analysemethoden: Röntgenbeugung/Polfigur/Reflektometrie (XRD/XRR), Thermogravimetrie/Kalorimetrie (TGA/DSC), Karl-Fischer (KF), Handschuhbox, Klimakammer, Zugprüfung, BET

Ansprechpartner

Im Ruhestand seit
Ende September 2022.
Dank für die FuE-
Arbeit am IEK-14.



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



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

Chemie Kraftstoffsynthese

Verfahrenstechnik Kraftstoffsynthese

Arbeitsgebiete, Leistungsangebote

Der Energie- und Verkehrssektor erfordert neuartige, umweltschonende Materialien. Beginnend mit einer grundlegenden Literaturrecherche werden potenzielle Lösungsmöglichkeiten erprobt und mit analytischen Messmethoden ausgewertet. Entwicklungsschwerpunkt sind Katalysatoren für die Synthese von höheren Alkoholen wie Butanol, die bezüglich ihrer chemischen und physikalischen Eigenschaften konventionellen Kraftstoffen sehr ähneln und diese ersetzen können. Dabei wird von grünem Methanol und Ethanol ausgegangen. Daneben werden Reaktoren für die Wasser-Gas Shift-Reaktion zur mikrobiellen Methansynthese erprobt und Materialien zur Entschwefelung von H₂-Erdgas-Gemischen getestet.

Neue und innovative Verfahren werden durch einen kombinierten Ansatz aus technischen und wirtschaftlichen Analysen bewertet. Im Kern der Arbeiten liegt die Entwicklung von chemischen Reaktoren und verfahrenstechnischen Systemen mit Hilfe von Modellierungsarbeiten. Die Validierung erfolgt durch experimentelle Erprobungen. Die Reaktoren und weiteren Systemkomponenten werden durch detaillierte Simulationen konzipiert, optimiert und ausgelegt. Einzelne Komponenten werden in verfahrenstechnischen Anlagen zu einem Gesamtsystem zur Herstellung von synthetischen Kraftstoffen aus H₂ und CO₂ integriert.

Anlagen, Verfahren, Methoden

- Autoklavenreaktor zum Katalysator-Screening für die Alkoholsynthese
- Rohrreakorteststand zur Alkoholsynthese im Technikumsmaßstab
- Testmodul für die präferentielle Oxidation von CO
- Testmodul für die Kopplung von ATR mit der Wasser-Gas Shift-Reaktion
- Aufbau zum Test von Materialien zur Entschwefelung von H₂-Erdgas-Gemischen
- Konzentrationsbestimmung (GC, GC/MS, FTIR) von Reaktionsprodukten
- Gerät zur temperaturprogrammierten Desorption, Oxidation und Reduktion
- Reaktor für die „Temporal Analysis of Products (TAP)“

Einrichtungen und Modelle

- Teststände zur Untersuchung von Reaktoren, Teil- und Gesamtsystemen unter stationären und dynamischen Bedingungen
- CFD-Simulationen zur Auslegung von Reaktoren und Systemkomponenten
- FEM-Analyse zu den Reaktorteilen
- Prozesssimulationen zur Prozessentwicklung und Optimierung
- Dynamische Simulation von Energiesystemen
- Wirtschaftlichkeitsanalysen

Ansprechpartner



Dr. Joachim Pasel
Tel.: 02461-61-5140
e-mail: j.pasel@fz-juelich.de



Dr.-Ing. Remzi Can Samsun
Tel. 02461-61-4616
e-mail: r.c.samsun@fz-juelich.de

Wasserstoffsicherheit

Arbeitsgebiete, Leistungsangebote

Die H₂-Sicherheitsforschung simuliert mit quelloffenen CFD-Methoden Unfallszenarien, in denen H₂ unkontrolliert freigesetzt wird. Es kann die Bildung brennbarer Gasgemische vorhergesagt sowie die Eignung und Effizienz installierter Gegenmaßnahmen bewertet werden, woraus sich anwendungsspezifische Sicherheitskonzepte ableiten lassen. Die Validierung der numerischen Modelle erfolgt anhand eigener Experimente, z.B. zur H₂-Rekombination oder zur Wandkondensation, sowie anhand von Großexperimenten, die in internationalen Projekten gemeinsam mit Partnern durchgeführt werden. Industrielle Partner werden bei Fragestellungen der H₂-Sicherheit und mit der Entwicklung sicherheitsbezogener Hardware unterstützt. Qualifikationstests untermauern die störungsfrei Funktion kommerzieller Rekombinatoren.

Anlagen, Verfahren, Methoden

Einrichtungen

- Versuchsanlagen zur Betriebsuntersuchung katalytischer H₂-Rekombinatoren
- Versuchsanlagen zur Validierung von CFD-Modellen in den Bereichen Wandkondensation und Aerosolverhalten

Modelle

- Spezialisiertes CFD-Tool containment-FOAM für die Anwendung in H₂-Freisetzungsszenarien, basierend auf dem quelloffenen Code OpenFOAM

Ansprechpartner



Dr.-Ing. Ernst-Arndt Reinecke
Tel.: 02461-61-5530
e-mail: e-a.reinecke@fz-juelich.de

5.3 Publikationen, Technologietransfer und Ressourcen

Die wissenschaftlich-technischen Arbeitsergebnisse des IEK-14 wurden in einschlägigen Journalen veröffentlicht aber pandemiebedingt kaum auf internationalen bzw. 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-14 in den Jahren 2020 und 2021 dreißig Artikel veröffentlichen (siehe Tabelle 3). Daneben wurden weitere Journale adressiert, die im Hinblick auf ihre thematische Ausrichtung über eine große Übereinstimmung mit den Arbeitsschwerpunkten des IEK-14 verfügen. Dies führte zu maximalen, jährlichen Veröffentlichungsleistungen in den drei favorisierten Journalen*, die zwischen 4 bis 7 Artikel pro Journal und Jahr lagen. Die jährliche Gesamtpublikationsleistung des IEK-14 in referierten Journalen betrug 56 Artikel im Jahr 2020 und 56 Artikel im Jahr 2021.

Tab. 3: Publikationsleistung des IEK-14 in referierten Journalen

Journal	Impact-Faktor	2020	2021
Progress in Energy and Combustion Science	35,339	0	1
Advanced Energy Materials	29,698	0	1
Renewable and Sustainable Energy Reviews	16,799	0	1
Environment International	13,352	0	1
Chinese Journal of Catalysis	12,92	1	0
Energy Conversion and Management	11,533	1	0
Applied Energy*	11,446	4	3
Journal of Cleaner Production	11,072	1	0
Green Chemistry	11,034	0	1
Science of the Total Environment	10,753	1	0
ACS Applied Materials & Interfaces	10,383	0	3
Journal of Power Sources*	9,794	5	4
Materials Today Energy	9,257	1	0
Solar RRL	9,173	0	1
Journal of CO2 Utilization	8,321	1	1
Journal of Physics Energy	7,528	1	0
International Journal of Hydrogen Energy*	7,139	7	6
ACS Applied Energy Materials	6,959	1	0
Sustainable Energy & Fuels	6,813	2	0
APL Materials	6,635	0	1
Journal of Molecular Liquids	6,633	0	2
Catalysis Today	6,562	0	1
International Journal of Molecular Science	6,208	0	1
Catalysis Science & Technology	6,177	1	0
Biotechnology Journal	5,726	1	0
ChemCatChem	5,497	0	1
Electrochemistry Communications	5,443	1	0
Scientific Reports	4,996	1	0
Chemical Engineering Science	4,889	0	1

ChemElectroChem	4,782	0	1
Catalysts	4,501	1	1
Energy Sustainability and Society	4,494	1	0
Journal of the Electrochemical Society*	4,386	7	4
Journal of Physical Chemistry	4,177	0	2
RSC Advances	4,036	1	0
Physical Chemistry Chemical Physics	3,945	2	0
Sustainability	3,889	0	1
International Journal of Adhesion and Adhesives	3,848	1	0
Materials	3,748	1	0
Solid State Ionics	3,699	0	1
Transport in Porous Media	3,610	0	1
Catalysis Communications	3,510	0	1
Energies	3,252	3	4
Fuel Cells	2,948	4	0
Journal of Materials Research	2,909	0	1
Crystals	2,670	1	2
Journal of Power Sources Advances	0,560	1	0
Environmental and Climate Technologies	0,270	0	1
Advances in Applied Energy	keine Angabe	0	1
ECS Transactions	keine Angabe	1	5
VGB Power Tech	keine Angabe	1	0
Chemie-Ingenieur-Technik	keine Angabe	1	0

Insgesamt beteiligten sich die Wissenschaftler des IEK-14 im Jahr 2020 mit 20/6 und 2021 mit 27/1 Vorträgen/Postern an nationalen und internationalen Konferenzen. Die wichtigsten Konferenzen mit IEK-14-Beteiligungen waren 2020 das 14th European SOFC & SOE Forum (Luzern/Schweiz und online) mit 5 Vorträgen, das Virtual AIChE Annual Meeting mit 4 Vorträgen sowie die 8th OpenFOAM Conference (online) mit 2 Vorträgen. 2021 war das IEK-14 beim 17th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC-XVII) (digital) mit 6 Vorträgen vertreten/beteiligt und beim European Fuel Cell Forum 2021 (Luzern/Schweiz und online) mit 3 Vorträgen. Die Ausrichtung zahlreicher Fachkonferenzen wurde pandemiebedingt ausgesetzt oder als Online-Event organisiert, wodurch eine Präsentation von spezifischen Einzelbeiträgen aus den wissenschaftlichen Fachabteilungen des IEK-14 nicht stattfinden konnte bzw. eingeschränkt war.

Darüber hinaus wurden im Berichtszeitraum 2020 und 2021 16 Doktorarbeiten in den FuE-Schwerpunkten Elektrolyse (6), Brennstoffzellen (2), Kraftstoffsynthese (1) und Sicherheitsforschung (6) fertiggestellt. Darüber hinaus prüfte Professor Lehnert 2020/2021 zwei weitere Promotionsvorhaben externer Doktoranden erfolgreich.

Zur Gewährleistung eines substanziellen Wissens- und Technologieaustauschs beteiligt sich das IEK-14 an zahlreichen nationalen und internationalen FuE-Projekten (2020: 31; 2021: 37), die von der Europäischen Kommission (EC; 2020: 6; 2021: 5), den Bundesministerien für Wirtschaft (BMW; 2020: 9; 2021: 8), für Bildung und Forschung (BMBF; 2020: 8; 2021: 15), für Verkehr und digitale Infrastruktur (BMVI; 2020: 1; 2021: 1) sowie verschiedenen Ministerien der Länder Nordrhein-Westfalen und Bayern (2020: 2; 2021: 2) finanziell gefördert oder von

der Wirtschaft (2020: 5; 2021: 6) finanziert wurden. Dabei übernahm das IEK-14 in einigen Projekten auch die Leitung und Koordination. Wichtige Bausteine zum geordneten Technologietransfer sind die zahlreichen Patentanmeldungen (2020: 4, 2021: 3) und Patenterteilungen (2020: 4, 2021: 1) im Berichtszeitraum.

Tab. 4: Kerndaten des IEK-14 für 2020 und 2021

Jahr		2020	2021
Publikationen	Referierte Journale ¹⁾	56	56
	Bücher und Journale	6	14
	Aufsatz in einem Buch	3	7
	Dissertationen ²⁾	9	7
Technologie- transfer	Laufende Drittmittelprojekte	31	37
	Patentanmeldungen	4	3
	Patenterteilungen	4	1
Ressourcen³⁾	Personal (PoF ⁴⁾ /Drittmittel)	100 (77/22)	90 (57/33)
Erläuterungen	¹⁾ nach ISI-Zitationsindex ²⁾ Interne Doktoranden ³⁾ Angaben als Kopfzahl ⁴⁾ PoF: Programmorientierte Förderung		

Das IEK-14 beschäftigte im Berichtszeitraum zwischen 100 (01.2020) und 90 (12.2021) Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, 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-14-Personals weniger als ein Jahr angestellt, so dass die effektive Personalkapazität von den angegebenen Zahlen für einen Zeitpunkt abweichen kann.

5.4 Preise und Auszeichnungen

Für herausragende Leistungen bei der Bearbeitung eines wissenschaftlich-technischen Themas haben Wissenschaftler des IEK-14 im Berichtszeitraum eine Reihe interessanter Preise und Auszeichnungen erhalten.

2020

Borchersplakette der RWTH Aachen

Dissertation „Techno-ökonomische Bewertung von Verfahren zur Herstellung von Kraftstoffen aus H₂ und CO₂“

Dr. Steffen Schemme

Ruf an die Queen's University in Kingston, Kanada

Adjunct Professor

Dr. Marcelo Carmo

Christian Friedrich Schönbein Award – Medal of Honour

für seinen herausragenden Beitrag zur Weiterentwicklung der SOFC-Technologie, Luzern im Oktober 2020

Prof. Ludger Blum

Energieforschungspreis Wasserstoff.NRW 2020

Dissertationsarbeit „Techno-ökonomische Bewertung von Verfahren zur Herstellung von Kraftstoffen aus H₂ und CO₂“

Dr. Steffen Schemme

2021

Borchersplakette der RWTH Aachen

Dissertation “Machine learning in modeling of the dynamics of polymer electrolyte fuel cells”

Fr. Dr. Wei Zou

Verleihung eines Preisgeldes im Rahmen von InnovationPlus des Helmholtz Innovation Fonds

für das besondere Engagement bei der Lizenzierung der Technologie zur Herstellung und dem Vertrieb von Direkt-Methanol-Brennstoffzell-Systemen an die HYREF GmbH

Andreas Glösen, Michael Hehemann, Roger Keller, Martin Müller, Walter Zwaygardt

5.5 Gremienarbeiten

Die national wie international anerkannte Kompetenz des IEK-14 auf dem Gebiet der Elektrolyse-, Brennstoffzellen- und Wasserstofftechnik schlägt sich auch in der Repräsentanz und Mitarbeit von IEK-14-Wissenschaftlern in nationalen und internationalen Gremien nieder. Die Wirkung zahlreicher Wissenschaftler des IEK-14 in leitenden Positionen für das Technology Collaboration Programme on Advanced Fuel Cells der International Energy Agency (IEA) verleiht dem IEK-14 eine hohe internationale Sichtbarkeit. Eine Zusammenstellung der Gremienarbeiten der IEK-14-Mitarbeiter ist im Folgenden aufgelistet und erläutert:

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

seit 2009, Dr. R.C.Samsun

Mitglied des Executive Committee

seit 2011, Dr. R.C. Samsun

Mitglied des Annex 36 „Systems Analysis“

seit 2013, Prof. L. Blum (März 2021 ausgeschieden)

Mitglied des Annex 32 „Solid Oxide Fuel Cells“

seit 2014, Prof. S. Beale

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

seit 2017, Dr. M. Carmo (Oktober 2021 ausgeschieden)

Operating Agent für Annex 30 „Electrolysis“

seit 2014, Prof. L. Blum (März 2021 ausgeschieden), Dr. M. Carmo (Oktober 2021 ausgeschieden, Dr. M. Müller

Mitglieder des Annex 30 „Electrolysis“

seit 2014, Prof. W. Lehnert

Mitglied des Annex 31 „Polymer Electrolyte Fuel Cells“

seit 2014, Dr. M. Müller

Mitglied des Annex 35 „Fuel Cells for Portable Applications“

seit 2014, Prof. L. Blum (März 2021 ausgeschieden), D. Froning, Prof. W. Lehnert, Dr. U. Reimer

Mitglieder des Annex 37 „Modeling of Fuel Cell Systems“

Institute of Mechanical Engineering (IMEchE), Vereinigtes Königreich

seit 1980, Prof. S. Beale (September 2021 ausgeschieden)

Mitglied

American Society of Mechanical Engineers (ASME), USA

seit 1981, Prof. S. Beale (September 2021 ausgeschieden)

Mitglied

Professional Engineers Ontario, Kanada

seit 1985, Prof. S. Beale (September 2021 ausgeschieden)

Mitglied

Arbeitsgemeinschaft Elektrochemischer Forschungsinstitutionen (AGEF)

seit 1990, Dr. K. Wippermann

Mitglied

Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)

seit 1990, Dr. K. Wippermann

Mitglied der GDCh und Mitglied der Fachgruppe Angewandte Elektrochemie der GDCh

Seit 2009, Dr. U. Reimer

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 (September 2021 ausgeschieden)

Mitglied

Verein Deutscher Ingenieure (VDI)

seit 1999, Prof. W. Lehnert

Mitglied

Electrochemical Society (ECS), USA

seit 1999, Prof. W. Lehnert

Mitglied

Gesellschaft für Informatik

seit 2002, D. Froning

Mitglied

Deutsche Physikalische Gesellschaft

seit 2002, Dr. C. Rodenbücher

Mitglied

Deutscher Wasserstoff- und Brennstoffzellen-Verband (DWV)

seit 2004, Prof. W. Lehnert

Mitglied

Initiative Qualifizierung – Brennstoffzelle

seit 2005, Dr. B. Emonts

Mitglied des Führungskreises

Fachausschuß BREZEL der VDI-Gesellschaft

seit 2005, Prof. L. Blum (März 2021 ausgeschieden)

Mitglied des Fachausschusses

Seit 2021, Dr. R.C. Samsun

Mitglied des Fachausschusses

N.ERGHY im FCH Undertaking der EU

seit 2008 – 2012, Prof. R. Peters

Mitglied des Fachausschusses „AA Transport und Betankungsinfrastruktur“

seit 2013, Prof. R. Peters

Mitglied des Arbeitskreises „Transport Säule“

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

seit 2008, Prof. S. Beale (September 2021 ausgeschieden)

Mitglied

Computational Thermal Sciences Journal, begellhouse

seit 2008, Prof. S. Beale (September 2021 ausgeschieden)

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 (September 2021 ausgeschieden)

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 (September 2021 ausgeschieden)

Mitglied des Redaktionsausschusses

ProcessNet Fachgruppe Energieverfahrenstechnik

seit 2012, Prof. R. Peters

Mitglied des Beirats

Netzwerk Brennstoffzelle und Wasserstoff NRW

seit 2012, Dr. B. Emonts

Vorsitzende der Plattform Wasserstoff und der Expertengruppe H₂-System

International Association of Hydrogen Energy (IAHE)

seit 2012, Dr. B. Emonts

Mitglied

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

VDMA Arbeitsgemeinschaft Brennstoffzellen - PG HT-BZ (SOFC)

seit 2013, Prof. L. Blum (März 2021 ausgeschieden)

seit 2020, Dr. R.C. Samsun

Mitglied

VDMA Verband der deutschen Maschinen- und Anlagenbauer

seit 2013, Dr. H. Janßen

Mitglied

Gesellschaft für Informatik – Arbeitskreis „Numerische Simulation“

seit 2015, D. Froning

Mitglied

Advances Journal der Royal Society of Chemistry

seit 2016 – Dr. J. Pasel

Mitherausgeber

TRENDS2017 - Transition to Renewable Energy Devices, Aachen

2017, Prof. R. Peters

Stellvertretender Leiter der Konferenz und des Organisationskomitees

Profilbereich - Energy, Chemical & Process Engineering (ECPE) der RWTH Aachen

seit 2020, Prof. R. Peters

Mitglied

seit 2021, Prof. R. Peters

Mitglied des Steering Committee

VDI/VDE Fachausschuss Wasserstoff und Brennstoffzellen

seit 2020, Dr. R.C. Samsun

Mitglied des Beirats

Jülich Aachen Research Alliance (JARA) Energy

seit 2021, Prof. R. Peters

Mitglied

HyCologne e.V.

seit 2021, Prof. R. Peters

Mitglied des Vorstands

5.6 Anfahrtsbeschreibung

5.6.1 Mit dem PKW

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

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

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

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

1. (kürzere Strecke mit Stadtverkehr) bis Abfahrt Jülich-Ost, rechts abbiegen, auf der B55n ca. 500 m rechts abbiegen in Richtung Jülich, nach 200 m vor den Sendeanlagen links abbiegen, weiter bis zum Kreisverkehr "Merscher Höhe", dort links abbiegen, vorbei am Solar-Campus der Fachhochschule, immer geradeaus entlang der Brunnenstraße, Kreuzung Römerstraße überqueren, weiter auf der Wiesenstraße, hinter dem Kreisverkehr und dem Wohnwagenhändler links abbiegen bis zum Forschungszentrum (beschildert).

2. (längere Strecke, aber zügigere Verkehrsführung) bis Abfahrt Jülich-West, am ersten Kreisverkehr links in Richtung Jülich, am zweiten Kreisverkehr rechts abbiegen in Richtung Düren (B 56); nach ca. 5 km links in die L 253 einbiegen, der Beschilderung "Forschungszentrum" folgen.



Abb. 44: 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 Beschilderung. Das Forschungszentrum selbst ist nicht Bestandteil des öffentlichen Straßennetzes und wird von Navigationssystemen daher nicht erkannt.

5.6.2 Mit dem Flugzeug

Flughafen Köln/Bonn: Vom Bahnhof am Flughafen entweder zum Hauptbahnhof Köln mit der S13, von dort mit dem Regional-Express zum Bahnhof Düren oder zum Bahnhof Köln-Ehrenfeld mit dem Regional-Express und von dort mit der S12 zum Bahnhof Düren. Von Düren weiter: siehe "Mit der Bahn".

Mit der Bahn **Flughafen Düsseldorf:** Vom Bahnhof am Flughafen zum Hauptbahnhof Köln und weiter zum Bahnhof Düren. Manche Züge fahren direkt durch, bei anderen muss man am Hauptbahnhof Köln umsteigen. Von Düren weiter: siehe "Mit der Bahn".

5.6.3 Mit der Bahn

Bundesbahn von Aachen oder Köln kommend bis Bahnhof Düren, von dort mit der Dürener Kreisbahn ("Rurtalbahn") bis Station "Forschungszentrum". Von dort rechts gehen, dann sind es etwa 20 Minuten zu Fuß zum Haupteingang des Forschungszentrums.



Abb. 45: Lageplan Forschungszentrum Jülich

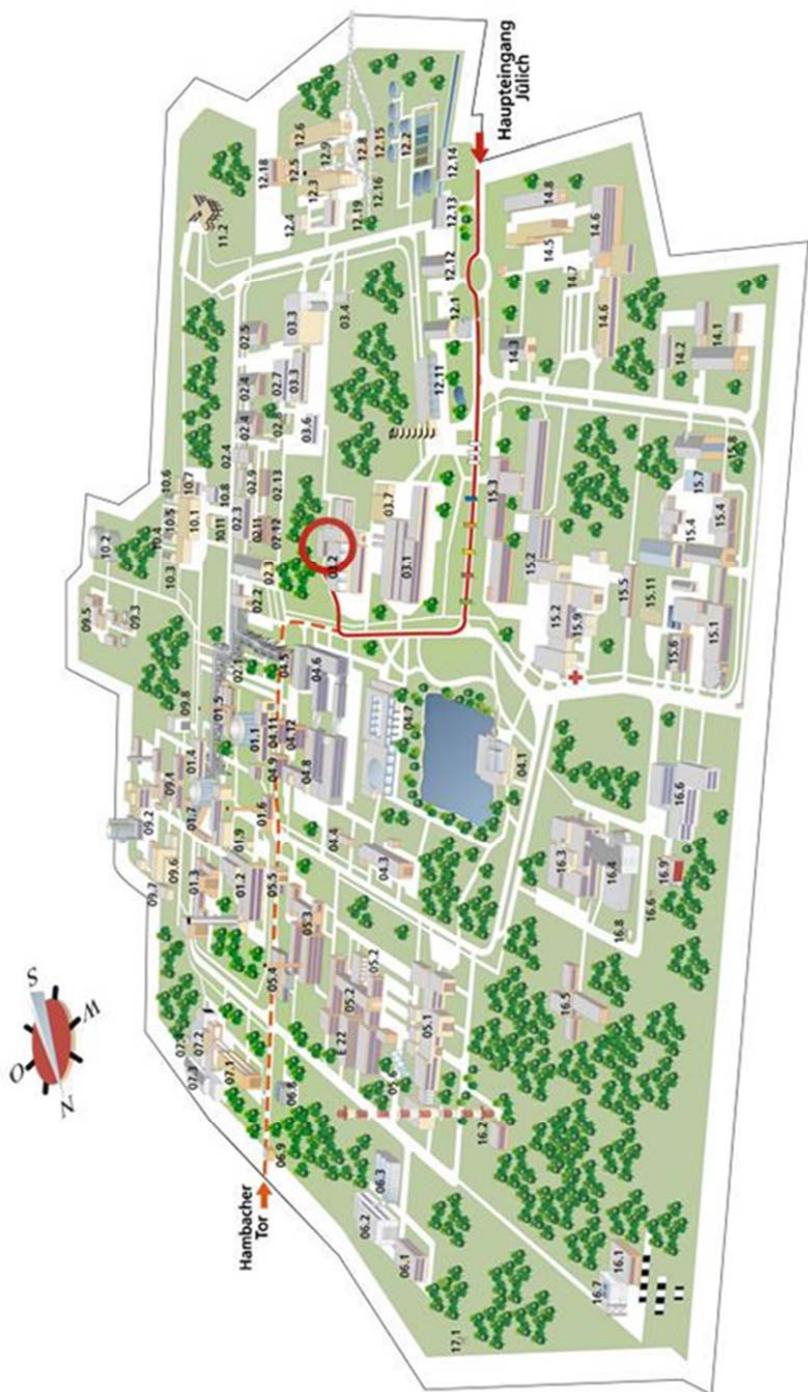


Abb 46: Lageplan Institut für Energie- und Klimaforschung, IEK-14: Elektrochemische Verfahrenstechnik, Helmholtz-Ring H8, Geb. 03.2

5.7 Abkürzungsverzeichnis

AEM	Anionenaustauschmembran (engl.: Anion Exchange Membrane)
AFM	Rasterkraftmikroskop (engl.: Atomic Force Microscope)
AGEF	Arbeitsgemeinschaft Elektrochemischer Forschungsinstitutionen
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
BET	Analyseverfahren zur Größenbestimmung von Oberflächen (Brunauer-Emmett-Teller)
BMBF	Bundesministerien für für Bildung und Forschung
BMVI	Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur
BMWi	Bundesministerien für Wirtschaft
BREZEL	Expertenkomitee Brennstoffzelle des Vereins Deutscher Ingenieure (VDI)
BZ	Brennstoffzelle
CAN	Centrum für Angewandte Nanotechnologie
CCM	Katalysatorbeschichtete Membran (engl.: Catalyst Coated Membrane)
CFD	Rechnergestützte Fluidodynamik (engl.: Computational Fluid Dynamics)
CP	Credit Points
CS	Cassetten-Substrat-Konzept
CV	Cyclovoltametrie
DBG	Deutsche Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie
DC	Gleichstrom (engl.: Direct Current)
DC/DC-Netz	Gleichstrom/Gleichstrom-Netz
DME	Dimethylether
DMFC	Direkthanol-Brennstoffzellen (engl.: Direct Methanol Fuel Cell)
DPG	Deutsche Physikalische Gesellschaft e. V.
DSC	Differenzthermoanalysator (engl.: Differential Scanning Calorimeter)
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
EU	Europäische Union
FEM	Finite Elemente Methode
FH Aachen	Fachhochschule Aachen
FINE	Framework for Integrated Energy System Assessment

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
GDCh	Gesellschaft Deutscher Chemiker
GDL	Gasdiffusionsanlage
GEE	Gesellschaft für Energiewissenschaft und Energiepolitik
HT-SOC	Hochtemperatur-Festoxidzelle (engl.: High-temperature Solid Oxide Cell)
HC Kerosin	Kohlenwasserstoff-Kerosin (engl.: Hydrocarbon)
HGF	Helmholtz-Zentrum Berlin
HIFIPEFC	BMW-gefördertes Verbundvorhaben zur Charakterisierung ionischer Flüssigkeiten für den Einsatz als Elektrolyt in Brennstoffzellen mit Polymermembran
HPC	Hochleistungsrechner (engl.: High Performance Computer)
H-REM	Hochauflösendes Rasterelektronenmikroskop
HTS	Hochtemperatur-Shiftstufen
IAHE	Internationale Organisation für Wasserstoffenergie (engl.: International Association of Hydrogen Energy)
IEA	Internationale Energieagentur (engl.: International Energy Agency)
IEEE	Institut der Elektro- und Elektronikingenieure (engl.: Institute of Electrical and Electronics Engineers)
IEK-1	Institut für Energie- und Klimaforschung - Werkstoffsynthese und Herstellungsverfahren
IEK-3	Institut für Energie- und Klimaforschung - Elektrochemische Verfahrenstechnik
IEK-9	Institut für Energie- und Klimaforschung - Grundlagen der Elektrochemie
IEK-10	Institut für Energie- und Klimaforschung - Energiesystemtechnik
IEK-11	Institut für Energie- und Klimaforschung – Erneuerbare Energien
IL	Ionische Flüssigkeit (engl.: Ionic Liquid)
IMechE	Institution für Maschinenbau-Ingenieure (engl.: Institution of Mechanical Engineers)
INW	Institut für Nachhaltige Wasserstoffwirtschaft
ISE	Internationale Gesellschaft für Elektrochemie (engl.: International Society of Electrochemistry)
JARA	Jülich Aachen Forschungsallianz (engl.: Jülich Aachen Research Alliance)
JURECA	Jülicher Großrechnerforschung für Exascale-Cluster (engl.: Jülich Research on Exascale Cluster Architectures)
KOH	Kaliumhydroxid
KWK	Kraft-Wärme-Kopplung
LHV	Heizwert (engl.: Lower Heating Value)
LP	Linear Programming
LTS	Niedertemperatur-Shiftstufen
MEA	Membran-Elektroden-Einheiten (engl.: Membrane Electrode Assembly)
N.ERGHY	Gesellschaft der Forschungseinrichtungen in der europäischen Wasserstoff und Brennstoffzellen Initiative
NRW	Nordrhein-Westfalen
NTS	Niedertemperatur-Shiftstufe
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
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	Programmorientierten Förderung der HGF
ProMINat	Studierendenakademie
PSI	Paul Scherrer Institut
PtG	Strom zu Gas (engl.: Power-to-Gas)
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
RWTH	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen
SCT	Segmentierte Zellentechnologie (engl.: Segmented Cell Technology)
SEI	Festelektrolyt-Grenzschicht (engl.: Solid Electrolyte Interface)
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
STEM	Rastertransmissionselektronenmikroskopie
SWS	Sommer-/Wintersemester
TAP	Zeitaufgelöste Analyse von Reaktionsprodukten (engl.: Temporal Analysis of Products)
TEM	Transmissionselektronenmikroskop
TG	Thermogravimetrische Analyse
TGA	Thermogravimetrie-Analysator
TRENDS	Konferenz für den Übergang zu erneuerbaren Energieeinrichtungen und -systemen (engl.: Transition to Renewable Energy Devices and Systems)
TSA	Technoökonomische Energiesystemanalyse
VDE	Verband der Elektrotechnik Elektronik Informationstechnik e. V.
VDI	Verein Deutscher Ingenieure
VDI-GVC	Verein Deutsche Ingenieure – Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen
VOF	Verfahren der numerischen Strömungsmechanik (engl.: Volume-of-Fluid)
WGS	Wasser-Gas Shift Reaktion
WS	Wintersemester
ZEA-3	Zentralinstitut für Engineering, Elektronik und Analytik - Analytik

Band / Volume 577

Neue Ziele auf alten Wegen?

**Strategien für eine treibhausgasneutrale Energieversorgung
bis zum Jahr 2045**

D. Stolten, P. Markewitz, T. Schöb, F. Kullmann, S. Risch, T. Groß,
M. Hoffmann, D. Franzmann, T. Triesch, S. Kraus, R. Maier, B. Gillessen,
H. Heinrichs, N. Pflugradt, T. Grube, J. Linssen, L. Kotzur (2022), VI, 81 pp
ISBN: 978-3-95806-627-4

Band / Volume 578

**Improving stationary and mobile cosmic ray neutron soil moisture
measurements**

Assessment of the cosmic ray neutron uncertainty
and the potential of the thermal neutron signal

J. C. Jakobi (2022), xxiii, 137 pp
ISBN: 978-3-95806-628-1

Band / Volume 579

**Application-Specific Calibration of Condensation Particle Counters
under Low Pressure Conditions**

O. B. F. Bischof (2022), ix, 137 pp
ISBN: 978-3-95806-629-8

Band / Volume 580

**Konzepte und Potenziale von Demonstrationsanlagen für die Produktion
von erneuerbarem synthetischen Flugzeugtreibstoff als Beitrag zur
Transformation der Reviere in NRW – Abschlussbericht**

S. Weiske, F. Schorn, J. L. Breuer, L. Becka, N. Beltermann, N. Wegener,
R. C. Samsun, P. Moser, S. Schmidt, C. Götte, E. Rietmann, U. Balfanz, A.
Spieckermann, D. Beckmann, J. Edler-Krupp, F. Steffen und R. Peters
(2022), 167 pp
ISBN: 978-3-95806-630-4

Band / Volume 581

Schlussbericht

**Accelerating Low-carbon Industrial Growth through
CCUS (ALIGN-CCUS)**

S. Weiske, S. Schemme, R. C. Samsun, R. Peters, S. Troy, S. Morgenthaler,
D. Schumann, P. Zapp (2022), 216 pp
ISBN: 978-3-95806-632-8

Band / Volume 582

Closed Carbon Cycle Mobility –

Klimaneutrale Kraftstoffe für den Verkehr der Zukunft

F. Schorn, J. Häusler, J. L. Breuer, S. Weiske, J. Pasel, R. C. Samsun, R.
Peters (2022), 220 pp
ISBN: 978-3-95806-636-6

Band / Volume 583

Machine learning for monitoring groundwater resources over Europe

Y. Ma (2022), viii, 125 pp

ISBN: 978-3-95806-638-0

Band / Volume 584

Mechanical properties of single and dual phase proton conducting membranes

W. Zhou (2022), IV, VI, 133 pp

ISBN: 978-3-95806-645-8

Band / Volume 585

Improvements to gravity wave physics from an observational perspective

M. Geldenhuys (2022), vii, 136 pp

ISBN: 978-3-95806-647-2

Band / Volume 586

Impact of severe convection on the water vapor mixing ratio in the extra-tropical stratosphere

D. Khordakova (2022), ii, 136 pp

ISBN: 978-3-95806-648-9

Band / Volume 587

Effects of salt precipitation during evaporation on porosity and permeability of porous media

J. Piotrowski (2022), xxvii, 139 pp

ISBN: 978-3-95806-650-2

Band / Volume 588

IEK-14 Report 2022

Forschung für die Energiewende und den Wandel im Rheinischen Revier

B. Emonts (Hrsg.) (2022), ???

ISBN: 978-3-95806-652-6

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

Der neue Institutsbereich IEK-14: Elektrochemische Verfahrenstechnik entstand aus der Teilung des alten IEK-3 sowie den Verlegungen der Abteilungsaktivitäten „Festoxid-Wandler“ an das IEK-9 und „Sicherheitsforschung“ an das IEK-14. Neben diesen strukturellen Veränderungen hatte das IEK-14 mit den politischen Initiativen zur Energiewende sowie zum Revierwandel weitere Herausforderungen zu bestehen. Mit neu ausgerichteten Themenschwerpunkten liefert das IEK-14 systematisch die von der Energieforschung erwarteten Lösungen auf technologiebezogene Fragen. Der Themenschwerpunkt „Wasserelektrolyse“ fokussiert sich auf PEM-, AEM- und alkalische Elektrolyseure der nächsten und übernächsten Generation. Die Erforschung von ionischen Flüssigkeiten als neuartige Elektrolyte für die bei über 100 °C betriebene Polymermembran-basierte Brennstoffzelle erschließt sich mit neuen FuE-Vorhaben die nächste Entwicklungsstufe hin zu funktionstüchtigen, technisch relevanten Zellen. Der Themenschwerpunkt „Kraftstoffsynthese“ hat seine auf Verfahrens- und Systemanalysen basierte Orientierungsphase zu vielversprechenden Einsatzstoffen und Prozesspfade geführt und orientiert sich zusätzlich auf die Katalysator- und Reaktor-entwicklung für die Alkohol- und Kerosinsynthese. Der neu ins IEK-14 eingeführte Schwerpunkt der Sicherheitsforschung entwickelt sich zu einem einzigartigen Forschungsbeitrag für Sicherheitsanalysen, -konzepte und -einrichtungen beim Einsatz von H₂-basierten Energiesystemen.



Die Wasserelektrolyse bei Temperaturen von etwa 70 °C erlaubt einen hochdynamischen Betrieb mit schnellen An- und Abfahrprozeduren. Der Reifegrad bei Elektrolyseuren mit Polymerelektrolytmembran und/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 H₂-Erzeugung wird die Integration in das Energiesystem erprobt und die Skalierung der Herstelltechnik erprobt und validiert.



Der Betrieb einer PEM-Brennstoffzelle oberhalb von 100 °C ermöglicht eine effektivere Kühlung und macht die Befeuchtung der Gase und eine Wasserrekycling überflüssig. Dies erfordert neue, nichtwässrige, protonenleitende Elektrolyte. Ziel ist die Entwicklung von PEM-Brennstoffzellen auf Basis protischer, ionischer Flüssigkeiten (PIL), geeignet für den Betrieb bei 100–120 °C. Um PILs hinsichtlich ihrer Grenzflächen- und Bulkeigenschaften zu optimieren, werden die grundlegenden Mechanismen der elektrochemischen Reaktionen und des Ionentransports untersucht. Die PILs werden in einem Matrixpolymer immobilisiert und in Einzelzellen getestet.



Für die Luft- und Schifffahrt sowie in Teilen für den straßengebundene Schwerlasttransport müssen weiterhin flüssige Kraftstoffe mit hoher Energiedichte zur Verfügung stehen. Um diesen Verkehrsbereich zu defossilisieren können die benötigten Kraftstoffe aus nachhaltig erzeugtem H₂ und CO₂ aus Biomasse, Luftabtrennung und nicht vermeidbaren Prozessgasen erzeugt werden. Zugehörige FuE-Arbeiten konzentrieren sich auf die Prozessanalyse sowie die Katalysator- und Reaktorentwicklung. Die Skalierung dieser aufwendigen Umwandlungstechnik spielt für die Integration in das Energiesystem eine wichtige Rolle.



Neben den technisch-ökonomischen Herausforderungen haben Fragen der technischen Sicherheit für die Akzeptanz neuer Wasserstofftechnologien eine besondere Bedeutung. Die Wasserstoff-Sicherheitsforschung betrachtet modellgestützt unfallbedingte und unvermeidbare H₂-Freisetzungen, identifiziert die auftretenden Risiken und untersucht die Wirksamkeit sicherheitsgerichteter Maßnahmen. Auf dieser Basis lassen sich anwendungsspezifische Sicherheitskonzepte ableiten sowie Sicherheitseinrichtungen entwickeln, erproben und charakterisieren, um Schäden und mögliche Akzeptanzprobleme zu vermeiden.

Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 588

ISBN 978-3-95806-652-6