

Vergleichende technoökonomische Betrachtung von metallischen zu organischen Durchflussbatterien

Daniel Ulrich Gerlach

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Elektrische Energiesysteme und Informationstechnik der Universität der Bundeswehr München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)

angenommenen Dissertation.

Gutachter/Gutachterin:

1. Frau PD Dr. rer. nat. Sabine Trupp
2. Herr Prof. Dr.-Ing. Thomas Weyh
3. Herr Adj. Assoc. Prof. (UNSW, UQ) Dr.-Ing. Jens Noack

Die Dissertation wurde am 22.01.2025 bei der Universität der Bundeswehr eingereicht und durch die Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik am 13.06.2025 angenommen. Die mündliche Prüfung fand am 25.06.2025 statt.

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit entwickelt einen Ansatz zum technoökonomischen Vergleich verschiedener metallischer und organischer Durchflussbatterien. Das entwickelte Modell ermöglicht die Untersuchung unterschiedlicher Optimierungsstrategien anhand von Sensitivitätsanalysen realer Durchflussbatteriesysteme und bewertet diese hinsichtlich energie- und leistungsbezogener Kosten sowie des Optimierungspotenzials. Darüber hinaus wird erläutert, wie sich Degradationsuntersuchungen in die technoökonomische Analyse integrieren lassen, um den langfristigen Betrieb von Durchflussbatterien realitätsnah abzubilden. Die gewonnenen Erkenntnisse bieten die Grundlage für die Entwicklung gezielter Optimierungsstrategien zur Kostensenkung.

Zur Effizienzsteigerung der Sensitivitätsanalysen, der Erhöhung der Auflösung der Datenmatrizen durch mehr Datenpunkte und der Integration in anwendungsorientierte Simulationsumgebungen wurde das technoökonomische Modell in die Software „FLOw battery Techno-Economics“ (FLOTE) überführt.

Die erforderliche Datenbasis für die Modellierung, bestehend aus über 300 Eingangsparametern, wurde durch den Eigenbau sämtlicher untersuchter Durchflussbatterien und umfassende Labortests generiert. Hierfür wurden standardisierte Vanadium/Vanadium, MV/TEMPOL und AQDS/BQDS Durchflussbatterien konstruiert und in zwei verschiedenen Testszenarien analysiert. Dabei wurden unter anderem die komponentenbezogenen Herstellungskosten sowie technische Parameter wie Leistungs- und Energiedichte in Abhängigkeit von Stromstärke und Kapazitätsdichte in Bezug auf die Zyklenanzahl ermittelt. Die Sensitivitätsanalysen mehrerer Batterieparameter hinsichtlich der Gesamtkosten wurden im Detail durchgeführt, und geeignete Optimierungsstrategien zur Kostenreduktion identifiziert.

Abschließend wird ein Ansatz gewählt, mit dem das Modell durch mathematisch vereinfachte Anwendungen zur Feinabstimmung von Batterieparametern genutzt werden kann, um gezielte Kostensenkungen zu erzielen.

In Zukunft wird es möglich sein, das Modell durch die Berücksichtigung von komponentenweisen Skaleneffekten auch für Durchflussbatterien im Industriemaßstab anzuwenden. Insbesondere die schnittstellenoffene Programmierung der Software FLOTE ermöglicht die Integration von Durchflussbatterien in eine Simulationslandschaft als Energiespeichersystem, wodurch eine anwendungsfallorientierte Analyse über längere Nutzungsphasen hinweg möglich wird. Die entwickelten Optimierungsstrategien und Methoden zur Feinabstimmung von Durchflussbatterien könnten zudem organischen Durchflussbatterien auf dem Weg zur Marktreife helfen.

Abstract

This work develops an approach for the techno-economic comparison of various metallic and organic redox flow batteries. The model established for this purpose enables the investigation of different optimization strategies through sensitivity analyses of real flow battery systems. These strategies are evaluated with respect to energy- and power-specific costs as well as their optimization potential. Furthermore, the integration of degradation studies into the techno-economic analysis allows for a realistic representation of the long-term operation of flow batteries. The resulting insights provide a foundation for the development of targeted cost-reduction strategies.

To increase the efficiency of sensitivity analyses, enhance the resolution of data matrices through additional data points, and facilitate integration into application-oriented simulation environments, the techno-economic model was implemented in the software tool “FLOW battery Techno-Economics” (FLOTE).

The modeling was supported by a dataset comprising over 300 input parameters, generated through in-house construction of all investigated flow battery systems and extensive laboratory testing. Standardized Vanadium/Vanadium, MV/TEMPOL, and AQDS/BQDS flow batteries were constructed and analyzed under two distinct test scenarios. Among other metrics, component-specific manufacturing costs and technical parameters such as power and energy density were determined as functions of current density and capacity density over cycle number. Detailed sensitivity analyses of several battery parameters with respect to total system costs were conducted, and suitable optimization strategies for cost reduction were identified.

Finally, a simplified approach was implemented to enable the model to be used for fine-tuning battery parameters through mathematically reduced applications, supporting targeted cost reductions.

In future applications, the model can be extended to industrial-scale systems by incorporating component-level economies of scale. In particular, the open-interface architecture of the FLOTE software allows for the integration of flow batteries into broader simulation environments for energy storage systems, enabling use-case-specific analysis over extended operational lifespans. The optimization strategies and parameter tuning methods developed in this study may further support the commercialization of organic redox flow batteries.

Seht ihr den Mond dort stehen?

Er ist nur halb zu sehen

und ist doch rund und schön.

So sind wohl manche Sachen,

die wir getrost belachen,

weil unsre Augen sie nicht sehn.

Matthias Claudius (1740–1815),
Abendlied (3. Strophe)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich von ganzem Herzen bei allen bedanken, die mich während der Fertigstellung dieser Dissertation unterstützt und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein allererster und tiefster Dank gilt meiner Frau Ragna sowie meinen Kindern Noah und Nelly. Ihr unerschütterliches Vertrauen in mich und ihre Geduld, besonders in den Zeiten, in denen ich aufgrund der berufsbegleitenden Fertigstellung der Dissertation oft abwesend war, haben mir unendlich viel Kraft gegeben.

Ein weiterer, ganz besonderer Dank geht an meine Eltern, insbesondere an meine Mutter, für ihre frühe und tiefgehende Vermittlung des besonderen Werts von Bildung. Ihre Überzeugung, dass Bildung, wie auch Erziehung, einen Menschen von Grund auf bestimmen und zu einem erfüllten und zufriedenen Leben beitragen, haben mich geprägt. Die daraus resultierende Neugier war für mich eine konstante Quelle der Inspiration und Motivation.

Mein herzlicher Dank gilt auch meiner Doktormutter, Frau PD Dr. Sabine Trupp, die mich mit ihrer unermüdlichen Unterstützung und fachlichen Expertise durch den gesamten Promotionsprozess begleitet hat. Ihre stets konstruktiven Anmerkungen und ihre Geduld haben mir während dieser Arbeit in vielerlei Hinsicht geholfen.

Ein großer Dank geht auch an Prof. Dr. Jens Noack, der mir von Beginn an und in allen entscheidenden Phasen mit seiner Unterstützung und seinem Fachwissen zur Seite stand. Ebenso danke ich Prof. Dr. Michael Faulde, der den ersten Impuls für meine Promotion gab und mir immer als geschätzter Diskussionspartner zur Verfügung stand.

Ich möchte auch den Studierenden des Fraunhofer-Instituts für Chemische Technologie danken, die mit ihrer praktischen Laborarbeit eine wesentliche Datengrundlage dieser Dissertation geschaffen haben. Besonders danke ich Katharina Bischof, Chloé Le Boulch, Rabin Siva Dev und Ganzorig Davaasuren für ihre tatkräftige Unterstützung und die vielen produktiven Stunden im Labor. Ohne ihre engagierte Mitarbeit – sei es bei den ersten Versuchen mit Durchflussbatterien oder bei der präzisen Durchführung von Testreihen – wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen. Rabin und Katharina möchte ich an dieser Stelle viel Erfolg auf ihrem eigenen Promotionsweg wünschen.

Abschließend gilt mein besonderer Dank auch meinen Freunden und Arbeitskollegen, deren Verständnis für den Zeitaufwand, den diese Arbeit in den vergangenen Jahren erforderte – Zeit, die ansonsten auch ihnen hätte gewidmet werden können – von großer Bedeutung für mich war. Ihr Entgegenkommen, ihre Geduld und ihre Unterstützung haben mich in meiner Arbeit wesentlich bestärkt.

Inhaltsverzeichnis

1. Motivation	1
2. Einleitung	3
2.1. Technische Herausforderungen aktueller Energiepolitik	3
2.2. Struktur der Arbeit	7
3. Stand des Wissens	9
3.1. Übersicht Energiespeichertechnologien	9
3.2. Durchflussbatterien	12
3.2.1. Funktionsprinzip von Durchflussbatterien	12
3.2.2. Technische Grundlagen	16
3.2.2.1. Vanadium/Vanadium FB (V FB)	16
3.2.2.2. MV/TEMPOL FB	17
3.2.2.3. AQDS/BQDS FB	18
3.3. Technoökonomie	19
3.3.1. Ökonomische Grundlagen	19
3.3.2. Technoökonomische Kenndaten	20
3.3.3. Technoökonomische Ansätze zur Modellierung von Durchflussbatterien	21
4. Modellierung	23
4.1. Technische Modellierung von Durchflussbatterien	23
4.1.1. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Energie zur technischen Modellierung	26
4.1.2. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Leistung zur technischen Modellierung	26
4.1.3. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Steuerung und Verbindungen zur technischen Modellierung	28
4.1.4. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Infrastrukturkosten	29
4.1.5. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Finanzierungskosten	29
4.2. Ökonomische Modellierung von Durchflussbatterien	32
4.2.1. Herstellungskosten	32
4.2.2. Modellierung der Betriebskosten der untersuchten Durchflussbatterien unter Berücksichtigung der Degradation der Elektrolyten	33
4.3. Technoökonomische Modellierung	37
4.4. Überführung des Modells in eine Stand-Alone-Software (FLOTE)	38

4.5. Überblick über die Softwarearchitektur	40
4.5.1. Sensitivitätsanalyse-Modul „MVF“	40
4.5.2. Array-Generierungsmodul „Arrays“	40
4.5.3. Kostenberechnungsmodul „datafile“	41
4.5.4. Visualisierungsmodul „sensitivity_plot“	41
5. Durchführung der Experimente zur Bestimmung der Datenbasis für die Modellierung	42
5.1. Ablauf eines 5x5-Zyklen Tests.....	44
5.2. Ablauf der Degradationstests	45
6. Ergebnisse	46
6.1. Technische Leistungsdaten der im Labor getesteten organischen und anorganischen Durchflussbatterien	46
6.1.1. 1,67 M Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien	46
6.1.2. 0,5 M und 0,1 M MV/TEMPOL Durchflussbatterien	50
6.1.3. 0,3 M, 0,2 M und 0,1 M AQDS/BQDS Durchflussbatterien	55
6.1.4. Vergleichende Diskussion der konzentrationsbezogenen relativen Energiedichten der untersuchten Durchflussbatterietypen	60
6.2. Ökonomische Daten der verschiedenen im Labor getesteten organischen und anorganischen Durchflussbatterien in Form der Herstellungskosten	62
6.2.1. Leistungsbezogene Herstellungskosten	62
6.2.2. Energiebezogene Herstellungskosten von 1,67 M und 0,3 M V Durchflussbatterien	63
6.2.3. Energiebezogene Herstellungskosten von 0,5 M, 0,3 M und 0,1 M MV/TEMPOL Durchflussbatterien	66
6.2.4. Energiebezogene Herstellungskosten von 0,3 M, 0,2 M und 0,1 M AQDS/BQDS Durchflussbatterien	68
6.3. Degradation verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien im Labor	72
6.3.1. Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien.....	72
6.3.2. MV/TEMPOL Durchflussbatterien.....	77
6.3.3. AQDS/BQDS Durchflussbatterien	81
6.3.4. Nutzungsfunktionen der degradationsuntersuchten Durchflussbatterien	84
7. Technoökonomische Diskussion	97
7.1. Einführung der Sensibilitätsanalyse als technoökonomisches Instrument	97
7.1.1. Definition einer Optimierungsfrage zur Auswirkung auf die spezifischen Energieinhaltskosten oder die spezifischen Leistungskosten	97
7.2. Einführung des Optimierungspotenzials	98
7.2.1. Ergebnisse ausgewählter Optimierungsfragen	100

7.2.1.1.	Ergebnisse ausgewählter Optimierungsfragen verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien im Labor mit den Elektrolytenpaaren Vanadium/Vanadium und MV/TEMPOL	100
7.2.1.1.1.	Konzentration der aktiven Spezies über Stromdichte	102
7.2.1.1.2.	Effektive Zellspannung über Stromdichte	104
7.2.1.1.3.	Spezifische Kosten der aktiven Spezies über effektiven Zellspannung.....	106
7.2.1.1.4.	Innerer Widerstand über Stromdichte	108
7.2.1.1.5.	Spezifische Kosten der Membran über flächenspezifischem Widerstand der Membran	110
7.2.1.1.6.	Spezifische Kosten der Bipolarplatte über flächenspezifischem Widerstand der Bipolarplatte.....	113
7.2.1.1.7.	Spezifische Kosten der Elektrode über flächenspezifischem Widerstand der Elektrode	115
7.2.1.1.8.	Spezifische Kosten der Gasdiffusionsschicht über flächenspezifischem Widerstand der Gasdiffusionsschicht	117
7.2.1.2.	Ergebnisse ausgewählter Optimierungsfragen verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien im Labor mit den Elektrolytenpaaren Vanadium/Vanadium, MV/TEMPOL und AQDS/BQDS	119
7.2.1.2.1.	Aktive Fläche über Stromdichte.....	120
7.2.1.2.2.	Konzentration der aktiven Spezies über Stromdichte	126
7.2.1.2.3.	Effektive Zellspannung über Stromdichte	130
7.2.1.2.4.	Innerer Widerstand über Stromdichte.....	133
7.2.1.2.5.	Konzentration der aktiven Spezies über effektiver Zellspannung.....	138
7.2.1.2.6.	Aktive Fläche über innerem Widerstand	142
7.2.1.2.7.	Konzentration der aktiven Spezies über innerem Widerstand.....	147
7.3.	Nutzung des Optimierungspotenzials zur Priorisierung von Optimierungsfragen	152
7.3.1.	Diskussion ausgewählter Optimierungsfragen verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien mit dem Betriebspunkt einer Stromdichte von 25 mA cm^{-2}	152
7.3.2.	Diskussion ausgewählter Optimierungsfragen verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien mit dem Betriebspunkt einer Stromdichte von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$	156
7.4.	Nutzung des Optimierungspotenzials zur Eingrenzung der Optimierungsfragen und Bestimmung eines optimierten Betriebszustands.....	160
8.	Zusammenfassung und Ausblick	162
Anhänge		168
A.	Aufbau Durchflussbatterie.....	168
i.	Eingesetzte Materialien.....	170
B.	Bauanleitung der standardisierten Durchflussbatterie und des Teststands	172
C.	Messreihenübersicht zur Ermittlung der wesentlichen Eingangsparameter für die technoökonomische Modellierung	182

D. Übersicht der technoökonomischen Modellierungsdaten	183
i. Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien	185
ii. MV/TEMPOL Durchflussbatterien	186
iii. AQDS/BQDS Durchflussbatterien	187
E. Detaillierte Beschreibung der Programmteile von FLOTE	188
i. Programmteil "MVF"	188
ii. Programmteil "Arrays"	188
iii. Programmteil "datafile"	189
iv. Programmteil "sensitivity_plot"	190
Abkürzungsverzeichnis	192
Einheiten- und Symbolverzeichnis	193
Abbildungsverzeichnis	195
Liste der Publikationen	203

1. Motivation

Bereits 2018 stellte das Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) in seinem Sonderbericht¹ fest, dass in allen Bereichen der Gesellschaft schnelle und tiefgreifende Maßnahmen erforderlich sind, um das Ziel zu erreichen, die globale Erwärmung im Vergleich zum Beginn des Industriezeitalters auf maximal 1,5°C zu begrenzen. Seitdem hat sich der Handlungsbedarf weiter verstärkt. Im Klimabericht von 2023 wird der Klimawandel noch drastischer als Bedrohung für das menschliche Wohlbefinden und die Gesundheit des Planeten identifiziert. Demnach leben fast 3,6 Milliarden Menschen, also nahezu die Hälfte der Weltbevölkerung, in Regionen, die besonders stark von den Folgen des Klimawandels betroffen sind.^{2,3} Die Reduktion der Kohlendioxidemissionen wird in beiden Berichten als eine der wesentlichen Maßnahmen genannt.

Eine Möglichkeit, Kohlendioxidemissionen zu reduzieren, besteht darin, vermehrt auf die Nutzung fossiler Brennstoffe zugunsten regenerativer Energiequellen zu verzichten.⁴⁻⁶ Die Nutzung regenerativer Energien bringt jedoch Herausforderungen mit sich, da der Energiebedarf häufig zu Zeiten auftritt, in denen nachhaltige Energiequellen wie Wind-, Sonnen- und Wasserkraft nicht ausreichend zur Verfügung stehen. Eine Lösung für dieses Problem liegt in der Speicherung dieser Energie.⁷ Innerhalb von Energienetzen gibt es unterschiedliche Anwendungen (z. B. Bereitstellung von Energie- und Energiereserven, Unterstützung der Netzstabilisierung, Erhöhung der Momentanreserve, Verbesserung der Leistung, Last- und Spitzenlastausgleich, Ermöglichung der Schwarzstartfähigkeit von Kraftwerken, Energietransfer in der Folge von Energiehandel an Termin- und Spotmärkten), die verschiedene Anforderungen an die jeweilige Technologie stellen.⁸ Durchflussbatterien (FBn) sind grundsätzlich für viele dieser Anwendungen geeignet.⁹⁻¹²

Für einen erfolgreichen Markteinstieg von Energiespeichersystemen (ESS) ist es wichtig, mittelfristig einen konkurrenzfähigen Marktpreis für die Speicherung von Energie oder die Bereitstellung von Leistung anzubieten.¹³ Insbesondere Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien (V FBn) wurden bereits in netzrelevantem Maßstab kommerzialisiert¹⁴⁻¹⁶, jedoch hat diese Technologie die vom US-Energieministerium empfohlenen energiespezifischen Zielkosten von 150 \$ kWh⁻¹ für ein ESS⁸, das für eine vierstündige Entladung bei Nennleistung ausgelegt ist, noch nicht erreicht¹⁶⁻²⁰. Ein Hinweis auf die Erreichbarkeit solcher Ziele ist, dass die FB-Preise im Jahr 2014 noch bei über 500 \$ kWh⁻¹ lagen.^{20,21} Das Erreichen der Zielmarke erfordert daher eine weitere Senkung der jeweiligen Materialkosten.²¹

Der zunehmende politische Druck im Zusammenhang mit dem Ziel, den Anstieg der globalen Durchschnittstemperatur^{22,23} zu begrenzen, verdeutlicht die Notwendigkeit wirtschaftlich erfolgreicher ESS, insbesondere angesichts der verstärkten Nutzung nachhaltiger Energieerzeugung. Diese ist nicht nur umweltfreundlich, sondern inzwischen auch kosteneffizient²⁴. Gemäß der Literatur ist es für einen erfolgreichen Markteintritt erforderlich, dass die Stromspeicherkosten (englisch: Levelized Cost of Storage (LCOS)) im Bereich < 0,06 \$ kWh⁻¹ liegen²².

Neben den Kosten der im Zellstapel verbauten Komponenten haben auch die auf die Kapazität, also die Energie, entfallenden Kosten einen großen Einfluss auf die Batteriekosten. Der Elektrolyt ist hier der entscheidende Faktor, wobei die höchsten Kosten durch die aktive Spezies verursacht werden.²⁵ Daher haben viele Studien

versucht, kostengünstigere aktive Spezies zu finden, die als Ersatz für die üblichen Vanadium-Elektrolyte dienen können.²⁶ So konzentrieren sich diese Studien bspw. auf billige anorganische Moleküle wie Metallpolysulfide^{27–29} oder Iodid^{27,29}. Organische Moleküle sind jedoch noch vielversprechender, da sie überwiegend aus Elementen bestehen, die auf der Erde sehr häufig vorkommen^{30–33} und daher bei hohen Produktionsraten vergleichsweise günstig sein werden. Das allgemeine Ziel besteht darin, die Kosten für die Chemikalien zu senken oder die Energiedichte des Elektrolyten zu erhöhen.^{16,21,25}

In der wissenschaftlichen Literatur werden verschiedene Parameter als potenzielle Ansatzpunkte zur Kostensenkung diskutiert.¹⁶ So haben neben anderen Faktoren die Anzahl der pro Molekül gespeicherten Elektronen (z), die chemischen Kosten (€ kg^{-1}), die Molarität (mol L^{-1}) und die molare Masse (kg mol^{-1}) einen deutlichen Einfluss auf die Kosten einer FB.^{16,21,25} Aus diesem Grund werden derzeit metallorganische Elektrolyte untersucht.^{16,28,34–38} Ebenso ist die Zellspannung über die Leerlaufspannung (OCV)^{27,34,39–41,41,42} für die FB kostenrelevant und daher in technoökonomischen Betrachtungen von Bedeutung.

Die genannten Überlegungen sind nur Ausschnitte aus den aktuellen Forschungsansätzen und verdeutlichen die hohe Komplexität und Vielfalt der FBn. Gerade deshalb ist es unerlässlich, sowohl technologische als auch ökonomische Aspekte zu kombinieren, um FBn zu bewerten. Zu diesem Zweck wurde in dieser Arbeit die technoökonomische Modellierung einer V FB von Noack et al.⁴³ weiterentwickelt. In der Literatur basieren verschiedene Optimierungsstudien auf der Betrachtung einer einzelnen Komponente oder Technologie.^{20,25,41,44,45} Das Modell dieser Studie wurde verwendet, um eine Vielzahl von Komponenten in Sensitivitätsanalysen zu variieren²⁵, um Optimierungsstudien hinsichtlich der energiespezifischen Systemkosten zu ermöglichen, was sich an dem umfassenderen Ansatz von Minke et al.⁴⁶ orientiert.

Auch in Zukunft wird weiterhin Forschungsbedarf bestehen, um einzelne Komponenten zu optimieren. Bisher wurde dabei die Frage, wie viel Potenzial die eine oder andere Optimierung im Hinblick auf die konkrete FB birgt, noch nicht ausreichend beachtet. Nur mit diesem Wissen kann jedoch eine zielgerichtete Priorisierung von Forschungsfragen erfolgen, sodass eine gesteuerte Forschung möglich wird.

Ziel dieser Arbeit war es, eine derartige Kennzahl zu entwickeln und Hinweise auf deren Nutzen bei der Anwendung zu geben.

2. Einleitung

2.1. Technische Herausforderungen aktueller Energiepolitik

Der Anteil erneuerbarer Energien an der Stromerzeugung in Deutschland hat sich gemäß Berichten des Umweltbundesamtes⁴⁷ seit 1990 kontinuierlich erhöht. Damals lag der Anteil bei nur etwa 6%. In den folgenden Jahren stieg er langsam an und erreichte im Jahr 2019 etwa 46%. Im Jahr 2022 wurde dieser Anteil erneut auf rund 55% gesteigert. Dieser Trend ist das Ergebnis der durch gesetzgeberische Anreize⁴⁸ gestützten angestrebten Energiewende in Deutschland. So garantiert bspw. das Gesetz zum Ausbau erneuerbarer Energien den Erzeugern von grünem Strom eine feste Vergütung über einen bestimmten Zeitraum und schafft dadurch Planungssicherheit sowie Investitionsanreize.

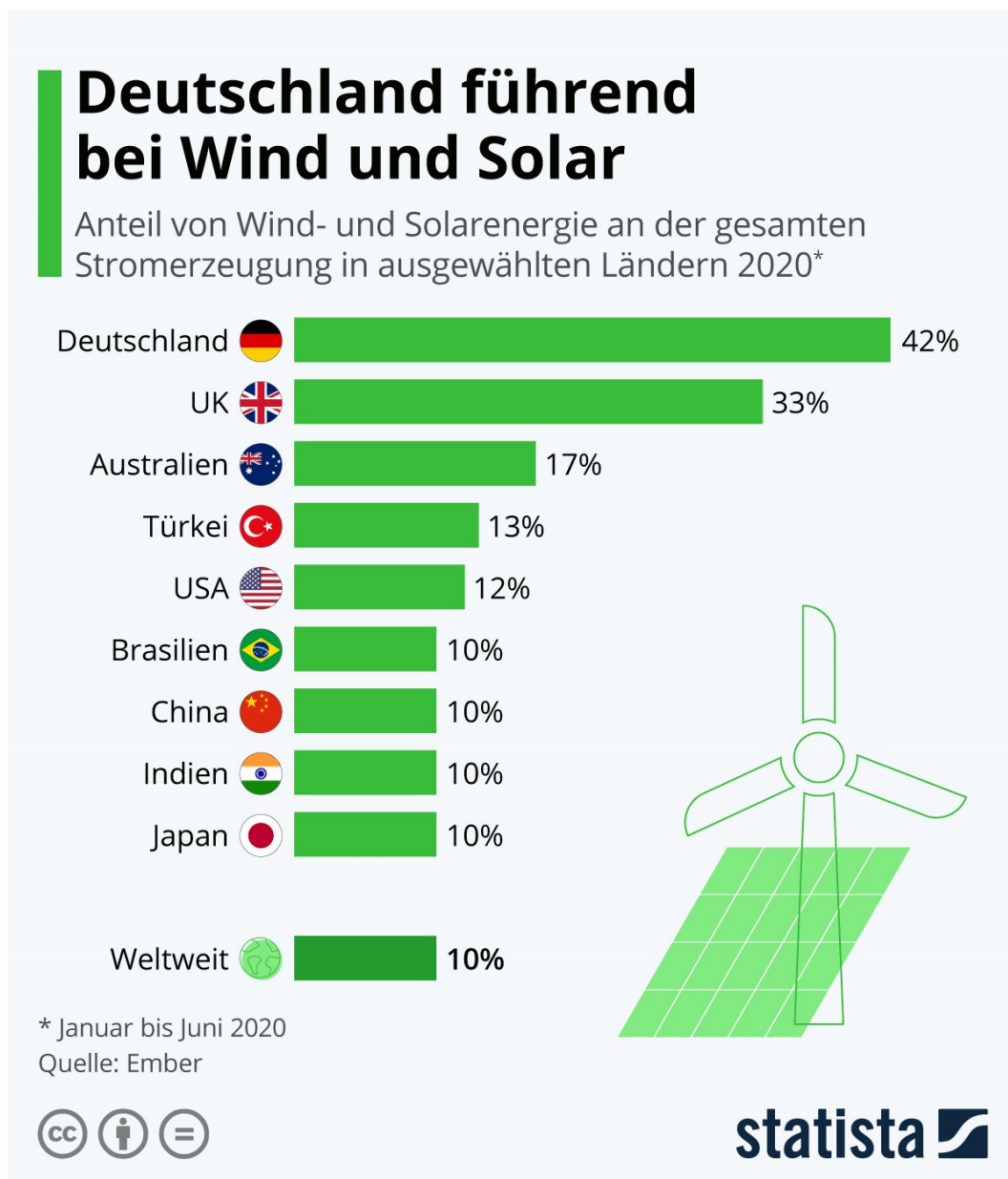


Abbildung 1. Anteil von Wind- und Solarenergie an der gesamten Stromerzeugung in ausgewählten Ländern (Januar bis Juni 2020).⁴⁹

Geplant ist, unter anderem die Windkraft, Photovoltaik und Biomasse weiter auszubauen. Deutschland ist bereits heute einer der führenden Produzenten von Wind- und Solarenergie, gemessen an der gesamten eigenen Stromerzeugung⁴⁹ (vgl. **Abbildung 1**). Dieser Anteil wächst seit Jahren kontinuierlich von 6,3% (2000), 10,3% (2005), 17,1% (2010), 31,4% (2015), 45,3% (2020) bis auf 52% im ersten Halbjahr 2023. Zur Erreichung der ambitionierten klimapolitischen Ziele ist bis 2030 ein Anteil von 80% avisiert.⁵⁰

Dieser Stromverbrauch ist jedoch nur ein Teil des gesamten Energieverbrauchs. Der gesamte Endenergieverbrauch lässt sich im Wesentlichen in vier Sektoren aufteilen.⁵¹ Im Jahr 2022 wiesen die drei größten Sektoren vergleichbar hohe Energieverbräuche auf: Industrie mit 2.403 Petajoule (PJ), Verkehr mit 2.509 PJ und Haushalte mit 2.441 PJ. Der Sektor Gewerbe, Handel, Dienstleistungen (einschließlich Militär) hatte mit 1.172 PJ einen geringeren Verbrauch. Auch die Art der Energiebereitstellung, hinsichtlich Intensität und Dauer, unterscheidet sich innerhalb der Sektoren, was zu unterschiedlichen Anforderungen an mögliche ESS je nach Anwendungsgebiet führen kann. Wie in **Abbildung 2** zu sehen, ist der Endenergieverbrauch ein Teil des Primärenergiebedarfs, der wiederum ein Teil des gesamten Energieaufkommens in Deutschland ist. In all diesen Bereichen werden mit fortschreitender Energiewende andere und möglicherweise auch mehr ESS erforderlich sein.⁵²

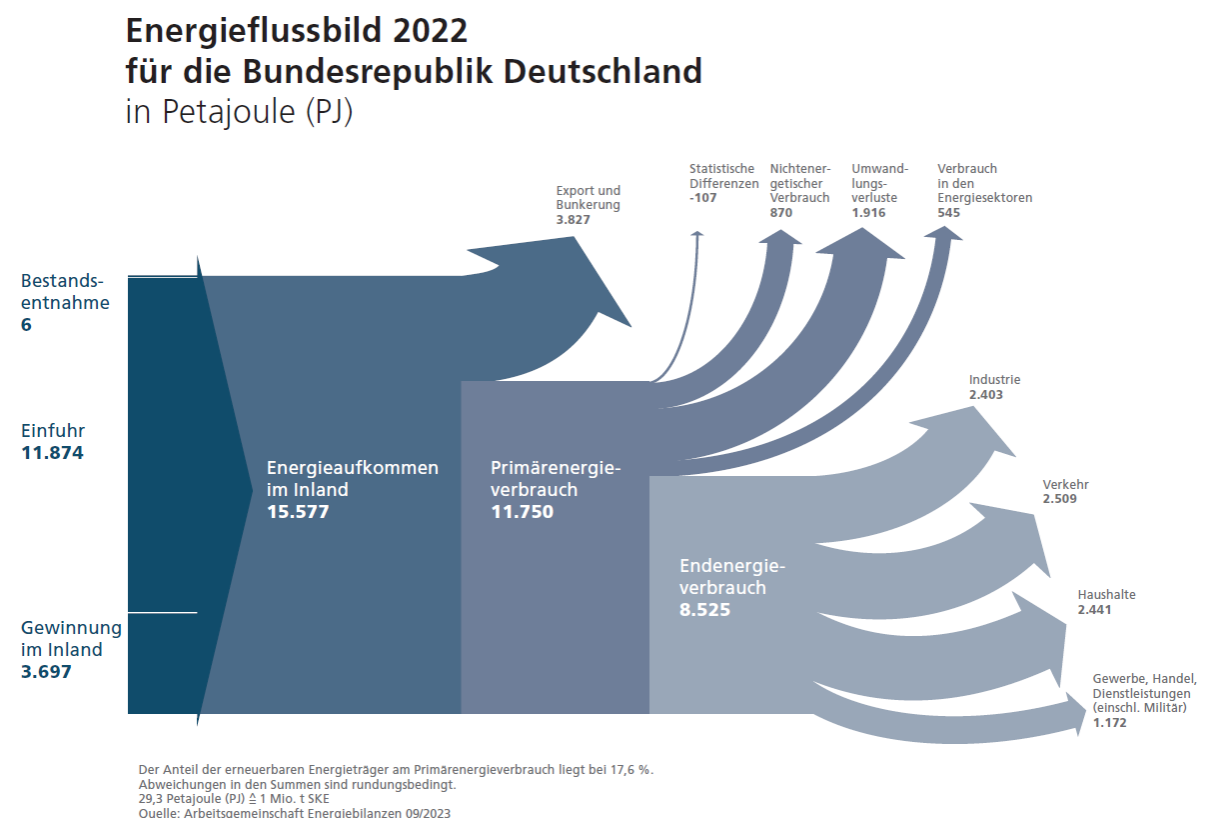


Abbildung 2. Energieflussbild 2022 für die Bundesrepublik Deutschland in Petajoule (PJ).⁵¹

Der Ansatz, insgesamt Energie zu sparen, ist in den Statistiken ebenfalls erkennbar. So ist im Jahr 2022 ein Rückgang des Energieverbrauchs auf den niedrigsten Stand seit 1990 sichtbar. Der Primärenergieverbrauch sank von 14.905 PJ (1990) auf 11.750 PJ (2022), während der Anteil der erneuerbaren Energien daran von 196 PJ und

1,3% (1990) auf 2.071 PJ und 18% (2022) deutlich stieg.⁵³ Damit wächst auch der Bedarf an ESS (vgl. **Abbildung 3**).

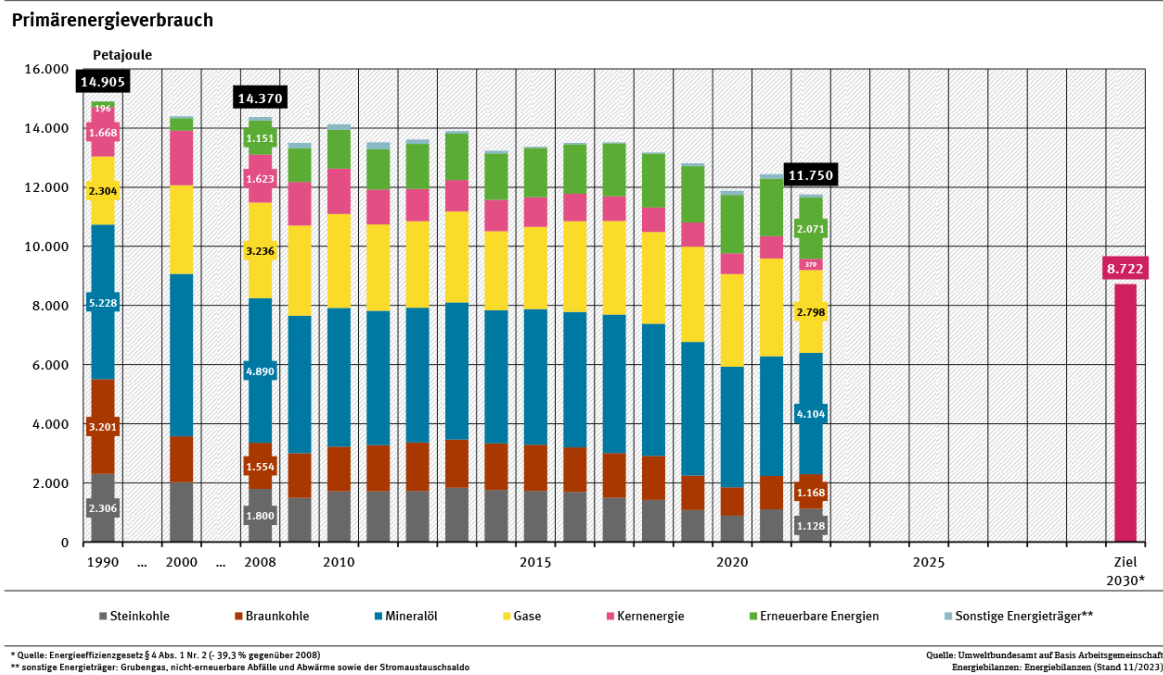


Abbildung 3. Primärenergieverbrauch für die Bundesrepublik Deutschland von 1990 bis 2022 in Petajoule (PJ).⁴⁷

Die Europäische Union und andere große Wirtschaftsräume haben für die nächsten Jahrzehnte ambitionierte Nachhaltigkeitsziele gesetzt und mit Maßnahmenprogrammen hinterlegt. Der Europäische Green Deal fordert konkrete technische Vorgaben, um die EU bis 2050 in eine klimaneutrale Wirtschaft zu transformieren. Ein Teil dieser Forderungen erfordert eine zunehmend umfangreiche Nutzung erneuerbarer Energien.^{54,55}

In den USA wurde 2021 eine langfristige Strategie erlassen, die das Ziel einer Netto-Null-Emission bis 2050 verfolgt, mit dem Zwischenschritt einer Reduzierung um 50% - 52% im Vergleich zu 2005 bis 2030. Gleichzeitig soll bis 2035 ein Anteil von 100% CO₂-neutral produziertem Strom erreicht werden.⁵⁶

Weltweit ist der Anstieg des Anteils erneuerbarer Energien am Gesamtenergieverbrauch weniger deutlich. Der Anteil lag 1990 bei 13,6%, 2019 bei 14,9% und 2022 bei 15,3%, was einen Anstieg von 1,7% in über 32 Jahren bedeutet. Allerdings ist bei diesen Überlegungen zu berücksichtigen, dass der Gesamtenergieverbrauch im selben Zeitraum von 420.000 PJ (1990) auf 540.000 PJ (2022) angestiegen ist, was einer Steigerung von ca. 28% entspricht.^{57,58} Somit ist der absolute Wert der genutzten erneuerbaren Energien um ca. 30% gestiegen. Die Bestrebungen der wesentlichen Wirtschaftsräume der Steigerung der Nutzung von Solar- und Windenergie zur Deckung des Gesamtenergiebedarfs lassen einen weiteren Anstieg von weltweit 1.612 TWh (Solar) und 2.336 TWh (Wind) in 2023 über 10.689 TWh (Solar) und 7.535 TWh (Wind) in 2035 auf 21.557 TWh (Solar) und 12.347 TWh (Wind) in 2050 erwarten.⁵⁹ Diese Tendenz deutet somit auch auf einen zukünftig steigenden Bedarf an ESS hin. Die

Relevanz des Ausbaus stabilisierender Kapazitäten für die Versorgungssicherheit wird in zahlreichen Studien hervorgehoben.⁶⁰

Aufgrund der bereits angesprochenen Notwendigkeit der steigenden Befähigung zur Energiespeicherung⁷, die mit der Nutzung erneuerbarer Energien einhergeht, hat sich diese zu einer Schlüsseltechnologie zur Verbesserung der Nachhaltigkeit der Stromerzeugung entwickelt.⁶¹ Die Verbesserung der Effizienz der bestehenden Infrastruktur für fossile Brennstoffe durch Lastausgleich und Preisarbitrage⁸ wurde bereits erfolgreich angewandt und leistet einen positiven Beitrag für das gesamte Stromnetz. Weitere Entwicklungen werden dazu beitragen, die Auswirkungen der Schwankungen bei erneuerbaren Energien (z. B. Sonnen- und Windenergie) abzumildern und deren Einsatz zu fördern. Darüber hinaus ist die Bereitstellung⁹ hochwertiger Dienste wie Frequenzregelung, Spannungsstützung oder Notstromversorgung⁸ von wachsendem Interesse. Da der Energiebedarf aufgrund des erwarteten Industrie- und Bevölkerungswachstums bis 2050 um etwa 50% ansteigen dürfte, wird der Handlungsbedarf in all diesen Bereichen deutlich zunehmen.¹¹

Zwingende Voraussetzung für die steigende Nutzung erneuerbarer Energien ist aufgrund ihres fluktuierenden Aufkommens der deutliche Ausbau von ESS.^{9,62,63} Schon die jüngsten Entwicklungen hin zu einer verstärkten Nutzung erneuerbarer Energien haben die Nachfrage nach ESS sprunghaft ansteigen lassen. Es wird erwartet, dass die Anforderungen an die Energiespeicherung bis 2030 die aktuellen Werte verdreifachen werden.⁶⁴

2.2. Struktur der Arbeit

In dieser Arbeit wurden die Ergebnisse bei der Herleitung einer technoökonomisch relevanten Kennzahl dargestellt und anhand von Labor- und Modellierungsergebnissen hinsichtlich zukünftiger Anwendungsmöglichkeiten diskutiert. Die dazu angewendete Struktur ist in **Abbildung 4** dargestellt. Da die Bereitstellung der Energie durch ein ESS in dieser Arbeit als zentrale Eigenschaft betrachtet wurde, wurden die Daten der Entladezyklen für die Berechnungen und Diskussionen herangezogen.

Zunächst wurde der Stand des Wissens als Ausgangspunkt dargelegt, und die notwendigen elektrochemischen, technischen sowie ökonomischen Grundlagen (siehe Kapitel 3) wurden erörtert.

Auf dieser Grundlage erfolgte die Darstellung der technischen und ökonomischen Modellierung, die durch wechselseitige Abhängigkeiten in eine technoökonomische Modellierung überführt wurde (siehe Kapitel 4). Das entwickelte Modell wurde zusätzlich in eine Stand-alone-Software überführt.⁶⁵

Die für die spätere Anwendung dieses Modells erforderliche Datenbasis wurde durch zwei unterschiedliche Testreihen mit insgesamt drei verschiedenen FB-Typen in umfangreichen Laborexperimenten erarbeitet (siehe Kapitel 5). Dabei wurden technische Leistungsdaten, Herstellungskosten sowie die zeitlichen Nutzungsfunktionen auf Basis von Degradationsuntersuchungen ermittelt (siehe Kapitel 6).

Anschließend wurden diese Daten in das Modell eingepflegt. In dieser Arbeit wurden darauf basierend exemplarisch Optimierungsfragen mithilfe von Sensitivitätsanalysen diskutiert (siehe Kapitel 7). Die Ergebnisse dieser Diskussionen dienten der Priorisierung der Optimierungsfragen, die ebenfalls thematisiert wurden (siehe Kapitel 7.3).

Das Optimierungspotenzial diente außerdem als Grundlage für die Entwicklung einer vereinfachten Methode zur Ableitung eines kostenoptimierten Parametersatzes für den Betrieb einer spezifischen FB (siehe Kapitel 7.4).

In Kapitel 8 wurde die Arbeit abschließende zusammengefasst und ein Ausblick gegeben.

Stand des Wissens & Grundlagen

Modellierung

Technische Modellierung

- Mittlere Leistungsdichte
- Energiedichte
- Effizienzen (VE, CE, EE)

Ökonomische Modellierung



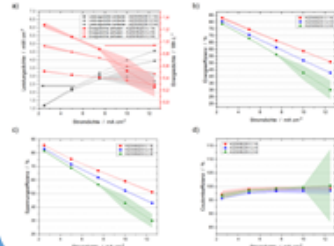
Stand-Alone-Software



Technoökonomische Modellierung

Ermittlung der Datenbasis

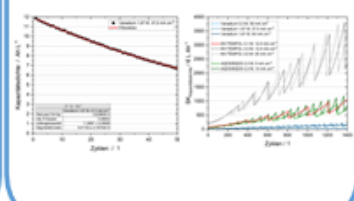
Technische Leistungsdaten



Herstellungskosten



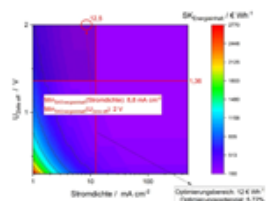
Technische Nutzungsfunktionen & Degradation



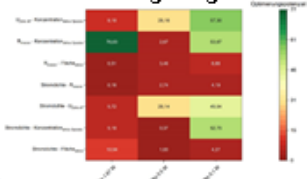
Technoökonomische Diskussion

Optimierungsfragen anhand von Sensitivitätsanalysen

- Optimierungspotenzial
- Optimierungsbereich



Priorisierung von Optimierungsfragen



Parameterwerte für einen kostenoptimalen Betrieb

Zusammenfassung und Ausblick

- Kostenoptimierung auf Grundlage von komponentenweisen Optimierungspotenzialen
- Optimierungspriorisierte, komponentenweise Untersuchung von Skaleneffekten
- Erweiterung des technoökonomischen Modells durch Integration ermittelter Skaleneffekte und zeitlicher Nutzungsaspekte mittels Degradationsuntersuchungen
- Methode der mithilfe des Optimierungspotenzials gewichteten Optimierungsfragen zur Ermittlung technoökonomisch sinnvoller Parametersätze für die Betriebszustände einer Durchflussbatterie

Abbildung 4. Struktur der Arbeit.

3. Stand des Wissens

3.1. Übersicht Energiespeichertechnologien

Die steigende Nachfrage nach ESS führt dazu, dass sowohl neuartige Methoden der Energiespeicherung entwickelt als auch deren Effizienz gesteigert werden und die Bereitstellung einer konsistenten und kontrollierten Leistung verbessert wird. Grundsätzlich lassen sich ESS physikalisch in fünf Typen klassifizieren. Diese Typisierung basiert auf der Art, wie die Energie gespeichert wird. So gibt es elektrische, thermische, mechanische, chemische und elektrochemische ESS. In **Tabelle 1** ist eine Auswahl konkreter technischer Anwendungen dieser Typen aufgeführt.

Tabelle 1. Klassifizierung Energiespeichersysteme.

Energiespeichersysteme	Typ	Technische Anwendungen (Beispiele)
	Elektrische Energiespeichersysteme	Doppelschichtkondensator ^{66–68}
		Supraleitende Magnetische Energiespeicher ^{69–71}
	Thermische Energiespeichersysteme	Sensible Wärmespeicher ^{72–76}
		Salzschmelzespeicher ^{63,77,78}
	Mechanische Energiespeichersysteme	Pumpspeicher ^{79–81}
		Druckluftspeicher ^{63,82,83}
		Schwungradspeicher ⁶³
	Chemische Energiespeichersysteme	Elektrolyseur (Wasserstoff) ^{63,84,85}
		Brennstoffzelle ⁸⁵
		Synthetisches Erdgas ^{63,86}
	Elektrochemische Energiespeichersysteme	Sekundärbatterien ^{87,88}
		Blei-Säure-Batterie ⁸⁷
		Natrium-Schwefel-Batterie ^{89,90}
		Lithium-Ionen-Batterie ^{91,92}
		Durchflussbatterie ^{93–96}

ESS können darüber hinaus auch als Hybridformen dieser Kategorien auf Basis der gespeicherten Energieform bestehen. Die Chronologie der Erfindung von ESS ab dem 19. Jahrhundert ist auszugsweise in **Tabelle 2** dargestellt.

Tabelle 2. Auszugsweise Chronologie der Erfindungen von Energiespeichersysteme ab dem 19. Jahrhundert⁹⁷

Jahr	Energiespeichersystem
1839	Brennstoffzelle ⁸⁵
1859	Blei-Säure-Batterie ⁹⁸
1883	Schwungradspeicher ⁹⁹
1899	Nickel-Cadmium-Batterie ⁹⁹
1907	Pumpspeicher ⁷⁹
1960	Natrium-Schwefel-Batterie ¹⁰⁰
1969	Supraleitende Magnetische Energiespeicher ¹⁰¹
1977	Erdwärmesonden-Wärmespeicher ¹⁰²
1978	Druckluftspeicher ¹⁰³
1982	Superkondensator ⁷⁰
1983	Vanadium-Durchflussbatterie ¹⁰⁴
1983	Polysulfid-Brom-Durchflussbatterie ¹⁰⁵
1991	Lithium-Ionen-Batterie ¹⁰⁶
2007	Papierbatterie ¹⁰⁷

Aramendia et al. führen in **Tabelle 3** wesentliche Merkmale verschiedener ESS^{108,109} auf.

Tabelle 3. Wesentliche technische Merkmale ausgewählter Energiespeichersysteme

ESS	Maximale Nennleistung [MW]	Entladezeit	Maximale Zyklen/ Maximale Lebenszeit	Volumetrische Energiedichte [Wh L ⁻¹]	Effizienz [%]
Pumpspeicherkraftwerk	1.000	4 - 12 h	30 - 60 a	0,2 - 2	70 - 85
Druckluftspeicher	1.000	2 – 30 h	20 - 40 a	2 - 6	40 - 70
Schwungrad	20	s - min	20.000 - 100.000 Zyklen	20 - 80	70 - 95
Blei-Säure-Batterie	100	1 min - 8 h	6 - 40 a	50 - 80	80 - 90
NaS-Batterie	100	1 min - 8 h	2.500 - 4.400 Zyklen	150 - 300	70 - 90
Li-Ionen-Batterie	100	1 min - 8 h	1.000 – 10.000 Zyklen	200 - 400	85 - 95
Durchflussbatterie	100	>> 1 h	12.000 - 14.000 Zyklen	20 - 70	60 - 85

Die Energienetze, die den steigenden Herausforderungen der nächsten Dekaden gerecht werden¹¹, stellen unterschiedliche Anforderungen an das jeweilige ESS^{10,12,110–112}. FBn¹¹³ haben einen herausragenden Vorteil aufgrund der entkoppelten Skalierbarkeit von Leistung und Kapazität, der hohen erreichbaren Zyklenzahlen^{108,114,115}, des einfachen thermischen Managements und der guten Sicherheitseigenschaften^{8,95,116–119}. Sie eignen sich grundsätzlich für viele Anwendungen^{10,12,14,95,110,118} und sind, anders als

z. B. Pumpspeicherkraftwerke, unabhängig von den geologischen Bedingungen, die nicht in allen Ländern gut verfügbar sind⁶¹. Die für ein elektrochemisches ESS hohe Zyklenzahl ist ein vielversprechendes Merkmal der FBn.

Herkömmliche FBn nutzen Speichermedien, die aus in anorganischen Säuren oder Basen gelösten Metallsalzen oder anderen anorganischen Verbindungen als redoxaktive Spezies bestehen^{43,115,120,121}. Dazu zählen auch die V FBn, die zu den bislang am meisten erforschten Technologien im Bereich der FBn gehören. Zudem wurden auf dieser Technologie beruhende ESS bereits seit Mitte der 1990er Jahre in größeren Anwendungen realisiert, was in **Tabelle 4** ausschnittsweise zu sehen ist.

Tabelle 4. Ausschnitt weltweit gebauter Energiespeichergroßanlagen auf der Basis von Vanadium/Vanadium Durchflussbatterie-Technologie^{97,122–126}

Jahr	Ort	Speicher- kapazität [MWh]	Anwendung
1996	Kashima-Kita Electric Power, Japan	0,8	Lastnivellierung
1996	Tatsumi Substation, Kansai Electric, Japan	0,9	Spitzenlastglättung
2000	Kansai Electric, Japan	1,6	Spitzenlastglättung
2001	Hokkaido Electric Power Wind Farm, Japan	1	Stabilisierung der Ausgangsleistung von Windkraftanlagen
2001	Tottori Sanyo Electric, Japan	1,5	Spitzenlastglättung und Notstromversorgung
2001	Stellenbosch University, Süd Afrika	0,5	Spitzenlastglättung und Notstromversorgung
2001	Gwansei Gakuin University, Japan	5	Spitzenlastglättung
2001	Mailand, Italy	0,09	Dezentrales Energieversorgungssystem
2003	High-Tech Fabrik, Japan	2	Spitzenlastglättung und Notstromversorgung
2003	Huxley Hill Wind Farm, King Island	1	Windenergiespeicherung und Ersatz von Dieselmotoren
2004	Castle Valley, Moab, USA	2	Spannungsversorgung und Ausbau der ländlichen Einspeisung
2005	Electric Power Development Co., Ltd., Tomamae, Hokkaido, Japan	6	Windenergiespeicherung und -stabilisierung
2011	Bielefeld, Deutschland	0,65	Windenergiespeicherung und -stabilisierung
2011	Zhangbei National V, China	8	Wind- und Solarenergiespeicherung und -stabilisierung
2012	Yokohama, Japan	5	Solarenergiespeicherung und -stabilisierung
2013	GuoDian LongYuan, China	10	Wind- und Solarenergiespeicherung und -stabilisierung
2013	Pellworm, Deutschland	1,6	Wind- und Solarenergiespeicherung und -stabilisierung

Jahr	Ort	Speicher- kapazität [MWh]	Anwendung
2014	Braderup, Deutschland	1	Windenergiespeicherung und -stabilisierung
2016	Hokkaidō, Japan	60	Solarenergiespeicherung und -stabilisierung
2019	RedoxWind Pfinztal, Deutschland	20	Windenergiespeicherung und -stabilisierung
2021	Dalian Rongke Power, Dalian, China	400 (800)	Wind- und Solarenergiespeicherung und - stabilisierung

Jedoch haben einige dieser metallbasierten Systeme den Nachteil, dass sie in der Natur nur selten vorkommen und folglich teuer sind oder deren Preis volatil ist bzw. ihre technische Komplexität bisher eine Kommerzialisierung verhindert.^{115,121} Eine Möglichkeit zur Überwindung dieser ökologischen und ökonomischen Schwierigkeiten stellt die Nutzung von umweltfreundlicheren, kostengünstigeren und ungefährlicheren organischen Aktivmaterialien dar. Auch wenn zu erwarten ist, dass organische FBn (O FBn) niedrigere Energiedichten als die klassischen Systeme wie V FBn erreichen¹¹⁵, eröffnet die enorm große Anzahl an existierenden organischen Verbindungen und deren Derivaten neue Wege für die Suche nach potentiellen Redoxpaaren.¹²⁷

3.2. Durchflussbatterien

3.2.1. Funktionsprinzip von Durchflussbatterien

FBn sind elektrochemische Energiespeicher, die ihre Energie durch reversible Redoxreaktionen in flüssigen Elektrolytlösungen umwandeln und speichern. Sie kombinieren die Umkehrbarkeit elektrochemischer Prozesse, wie sie in Sekundärbatterien vorkommen, mit den Eigenschaften von Brennstoffzellen.^{128,129} Im Gegensatz zu traditionellen Batterien, die ihre Energie in Feststoffmaterialien speichern, nutzen FBn flüssige Elektrolyte, die in externen Tanks gelagert und durch die Zellen gepumpt werden. Dies ermöglicht eine nahezu unbegrenzte Skalierbarkeit der Speicherkapazität, die allein durch das Volumen der Elektrolytlösungen begrenzt ist. Die Leistungsdichte der Batterie hängt hingegen von der Anzahl und Größe der Reaktionszellen ab, die in Zellstapeln zusammengeschaltet werden.^{43,130–132}

Das Funktionsprinzip einer FB basiert auf den Prinzipien eines galvanischen Elements.¹³³ Die Batterie besteht aus zwei Halbzellen, die durch eine Membran voneinander getrennt sind. In jedem Halbzellenraum befindet sich eine Elektrolytlösung, die die Redoxpaare enthält. In der Praxis kommen sowohl anorganische Säuren oder Basen als auch wässrige Lösungen von Leitsalzen und organische Lösungsmittel zum Einsatz.^{121,129} In **Abbildung 5** und **Abbildung 6** sind Entlade- und Ladevorgang am Beispiel einer V FB dargestellt. Während des Entladevorgangs wird an der Anode die Oxidation einer redoxaktiven Spezies durchgeführt, bei der Elektronen freigesetzt werden. Diese Elektronen fließen über einen externen Stromkreis zur Kathode, wo die Reduktion der Spezies erfolgt. Der Ladungsausgleich zwischen den Halbzellen wird durch die Diffusion von Ionen durch die Membran gewährleistet. Diese Membran ist semipermeabel, was bedeutet, dass sie Ionen zwischen den Halbzellen transportiert, jedoch die Durchmischung der Elektrolytlösungen verhindert, um eine Kreuzkontamination zu

vermeiden, die die Effizienz der Batterie verringern würde.^{43,120,128,134} Beim Ladevorgang findet dieser Vorgang mit umgekehrter Elektronenflussrichtung statt.

Die Speicherkapazität von FBn ist direkt vom Volumen der Elektrolytlösungen abhängig, während die Leistung durch die Größe und Anzahl der Reaktionszellen bestimmt wird.⁴³ Diese Eigenschaft macht FBn besonders geeignet für großflächige Anwendungen wie die stationäre Energiespeicherung, etwa zur Integration erneuerbarer Energiequellen in Stromnetzen. Die hohe Zyklenfestigkeit und die Möglichkeit, die Elektrolyte auszutauschen oder zu regenerieren, tragen zudem zur Langlebigkeit und Wirtschaftlichkeit der Technologie bei. Die Membran spielt dabei eine entscheidende Rolle: Die Membranmaterialien müssen niedrige Widerstände, mechanische Stabilität und chemische Inertheit aufweisen, um eine hohe Leistungsfähigkeit der Batteriezelle zu gewährleisten.^{121,133} In der Praxis werden häufig mikroporöse Separatoren oder ionische Austauschmembranen eingesetzt.¹²⁸

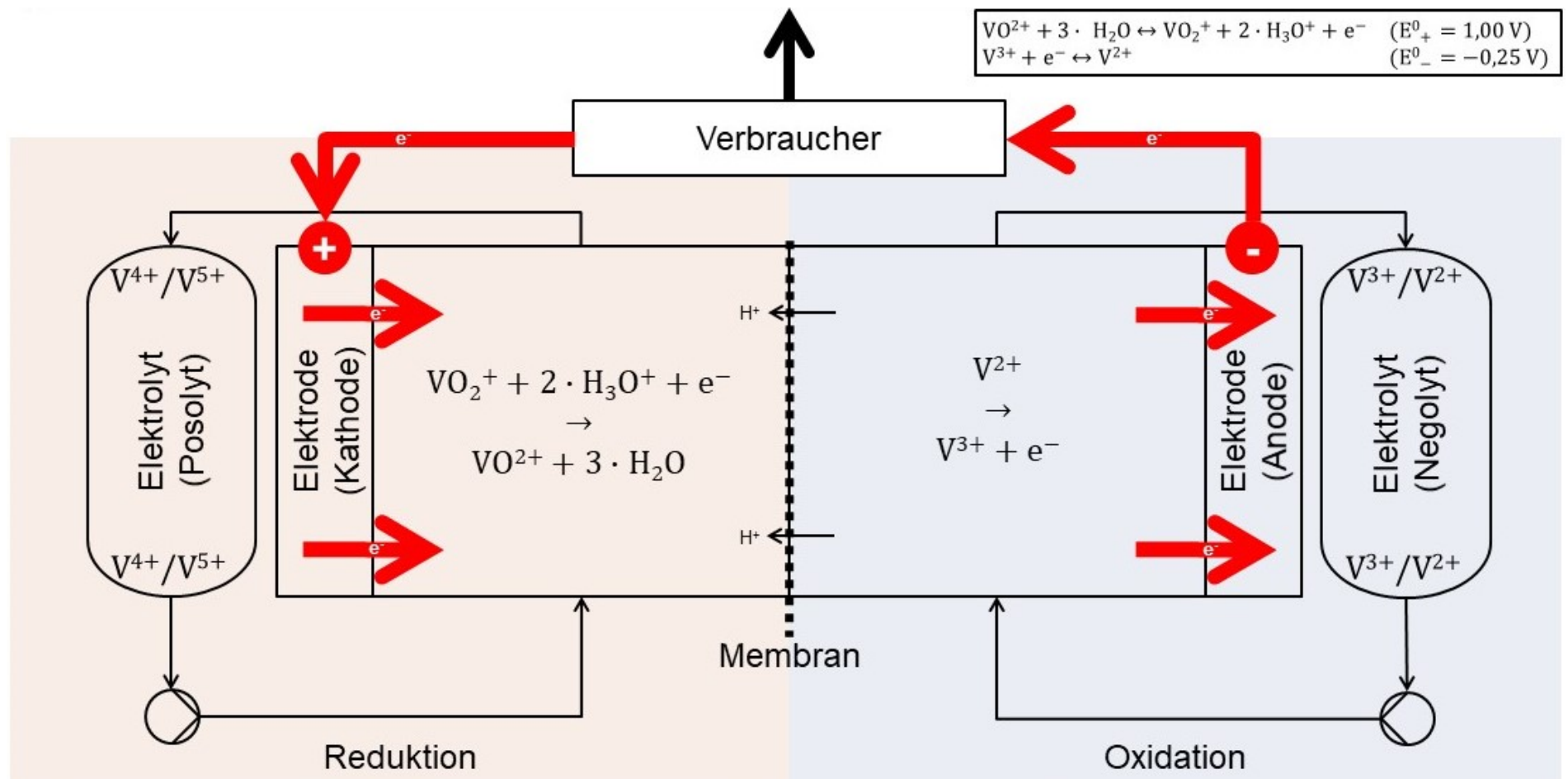


Abbildung 5. Funktionsprinzip von Durchflussbatterien am Beispiel einer Vanadium/Vanadium Durchflussbatterie beim Entladen.

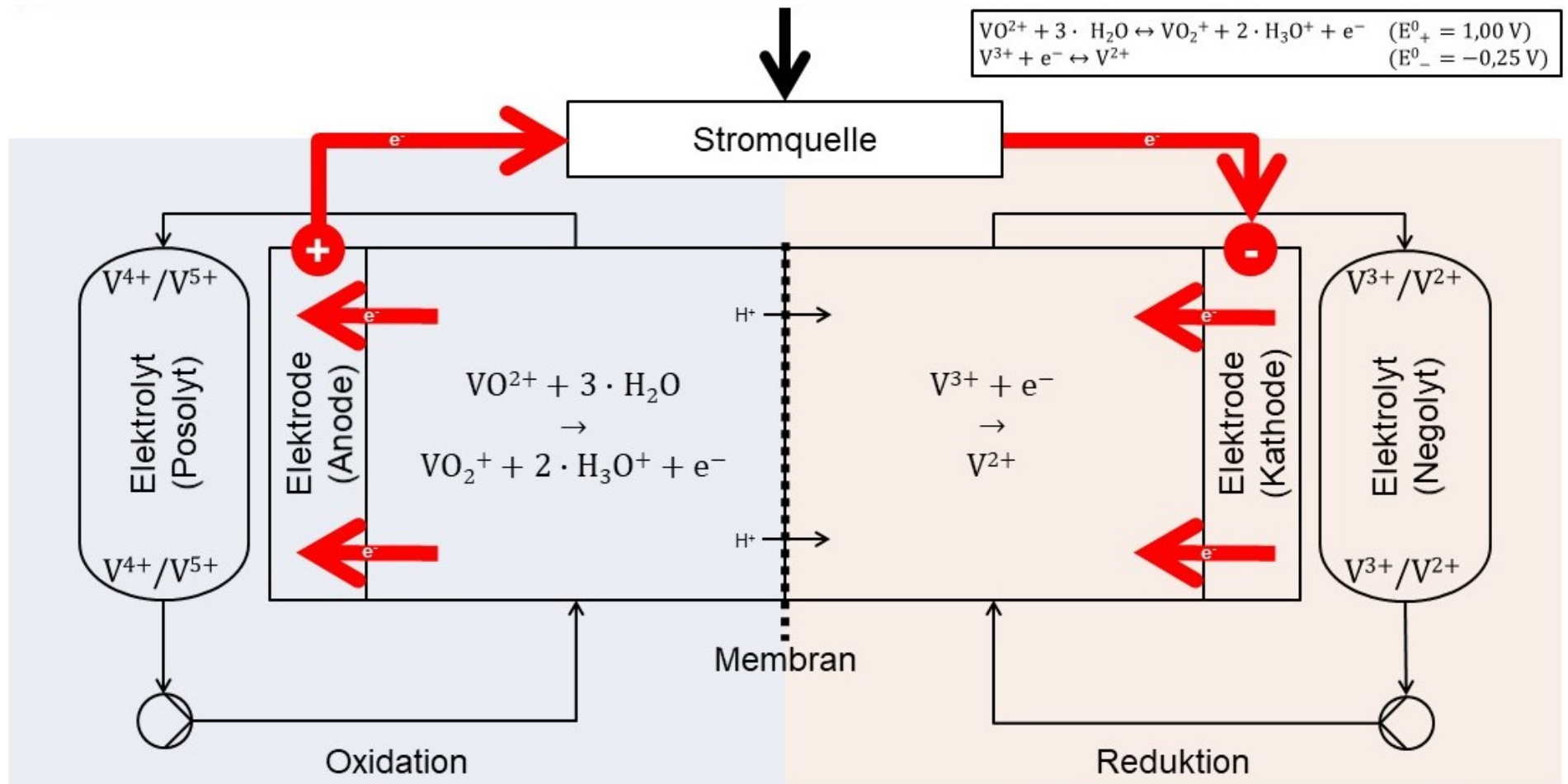


Abbildung 6. Funktionsprinzip von Durchflussbatterien am Beispiel einer Vanadium/Vanadium Durchflussbatterie beim Laden.

Konkret kann das Funktionsprinzip einer FB also analog zu einem galvanischen Element, als chemische Reaktion zwischen zwei Redoxpaaren beschrieben werden, die sich aus der Kombination der Oxidation und Reduktion der redoxaktiven Spezies in den jeweiligen Halbzellen ableitet.^{43,128,129,133} Da dieser Redoxprozess reversibel ist, kehrt sich bei der Rückreaktion die Polarität der Elektroden um, wobei die Elektrode, die während des Ladevorgangs als Anode fungierte, bei der Entladung die Funktion der Kathode übernimmt und umgekehrt. Um eine eindeutige Bezeichnung zu ermöglichen, die unabhängig von der Reaktionsrichtung ist, wird im Folgenden die positive Halbzelle als diejenige definiert, die die Elektrode mit dem positiveren Standardredoxpotential enthält, und die negative Halbzelle als diejenige mit der Elektrode mit dem negativeren Standardredoxpotential. Analog wird der Elektrolyt in der negativen Halbzelle Negolyt genannt, der Elektrolyt in der positiven Halbzelle Posolyt. Für die gesamte Zelle ergibt sich die allgemein formulierte elektrochemische Reaktion aus der Kombination der elektrochemischen Reaktionen der jeweiligen Halbzellen:

Positive Elektrode:	$A^x \rightleftharpoons A^{x+z} + z \cdot e^-$	E^0_+
Negative Elektrode:	$C^y + z \cdot e^- \rightleftharpoons C^{y-z}$	E^0_-
Zelle:	$A^x + C^y + z \cdot e^- \rightleftharpoons A^{x+z} + C^{y-z} + z \cdot e^-$	E^0_{Zelle}

3.2.2. Technische Grundlagen

In der Vergangenheit wurden verschiedene Arten von FBn untersucht, die sich hauptsächlich durch die verwendeten Redoxpaare unterscheiden. Grundsätzlich kann man die gängigsten FBn in anorganische FBn (Vanadium/Vanadium^{132,135}, Eisen/Eisen¹³⁶, Zink/Brom^{137,138}, Semi-Solid¹³⁹, Wasserstoff/Brom¹⁴⁰ usw.¹⁴¹) und O FBn (MV/TEMPOL²⁷, AQDS/BQDS¹¹⁶, AQS/BQDS^{15,115} usw.) unterteilen.

3.2.2.1. Vanadium/Vanadium FB (V FB)

Die V FB wurde in den 1980er Jahren von Skyllas Kazacos et al. an der University of New South Wales (UNSW) entwickelt^{135,142,143} und patentiert. Seitdem wurde sie intensiver untersucht als jede andere Durchflussbatterietechnologie, sowohl auf Zell- als auch auf Systemebene, weshalb sie in dieser Arbeit als Referenzsystem verwendet wird. In einer V FB werden die vier im Sauren löslichen Oxidationsstufen $V^{2+}(V^{II})$, $V^{3+}(V^{III})$, $VO^{2+}(V^{IV})$ und $VO^+(V^V)$ genutzt. In beiden Halbzellen wird somit das gleiche redoxaktive Material verwendet. Der Einsatz symmetrischer Elektrolyte hat den Vorteil, dass Kreuzkontaminationen verhindert werden, was potentiell höhere Energiedichten ermöglicht.^{114,120} In den beiden Halbzellen laufen die folgenden reversiblen Reaktionen ab (siehe **Abbildung 5** und **Abbildung 6**), die eine theoretische reversible Zellspannung von 1,25 V ergeben^{104,120,128}:

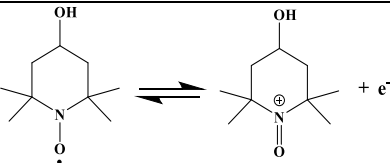
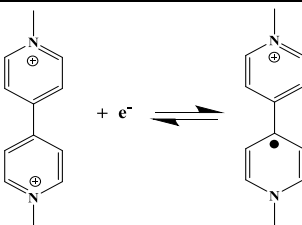
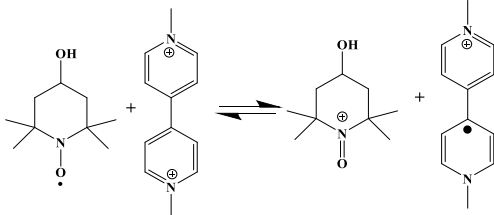
Positive Elektrode:	$VO^{2+} + H_2O \rightleftharpoons VO_2^+ + 2 H^+ + e^-$	E^0_+ $= +1,00 V^{128}$
Negative Elektrode:	$V^{3+} + e^- \rightleftharpoons V^{2+}$	E^0_- $= -0,25 V^{128}$
Zelle:	$VO^{2+} + V^{3+} + H_2O \rightleftharpoons VO_2^+ + V^{2+} + 2 H^+$	E^0_{Zelle} $= 1,25 V^{128}$

Trotz der langen Lebenszeit und Effizienzstabilität^{115,144} stellen die begrenzte Verfügbarkeit der Rohstoffe sowie der volatile Preis der aktiven Spezies ein Risiko dar, das eine langfristige Marktverdrängung anderer Energiespeichersysteme derzeit erschwert.^{27,115}

3.2.2.2. MV/TEMPOL FB

In dieser Arbeit wurde das TEMPO-Derivat 4-Hydroxy-2,2,6,6-Tetramethylpiperidin-1-oxyl (4-HO-TEMPO (TEMPOL)) als Aktivmaterial der positiven Halbzelle genutzt, das eine zusätzliche Hydroxygruppe an der 4-Position trägt. Es handelt sich dabei um ein stabiles heterozyklisches Nitroxid-Radikal, das reversible Redoxreaktionen mit einem Ein-Elektronen-Transfer eingeht.¹²¹ In der negativen Halbzelle wurde 1,1'-Dimethyl-4,4'-bipyridinium (Methylviologen (MV)) als redoxaktive Spezies genutzt werden, das ebenfalls durch einen Ein-Elektronen-Übertrag reversibel in eine radikalische Form umgewandelt wird, sodass dessen stabiles +2/+1 Redoxpaar genutzt werden kann.²⁷

Die Kombination beider Halbreaktionen ergibt eine theoretische reversible Zellspannung von 1,25 V, die derjenigen der V FB entspricht.²⁷

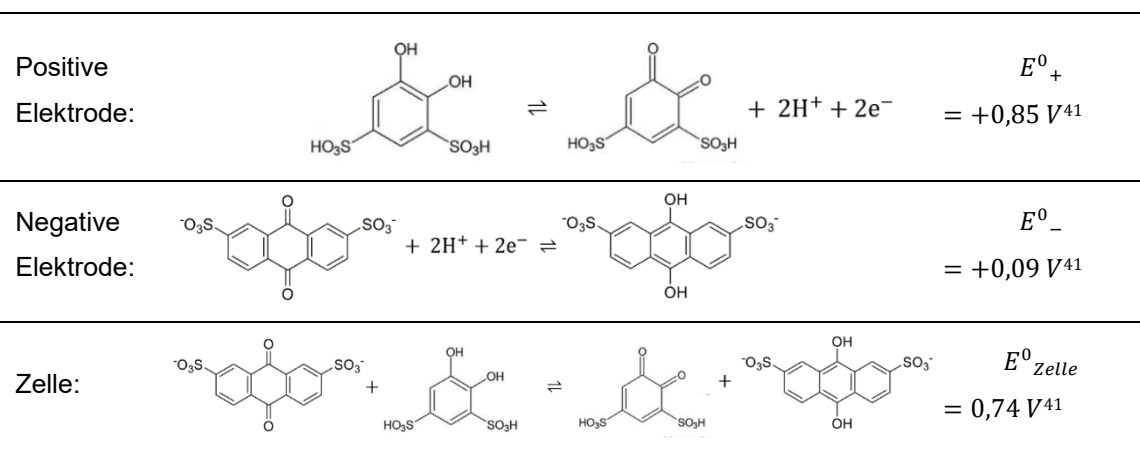
Positive Elektrode:		E^0_+ $= +0,80 V^{27}$
Negative Elektrode:		E^0_- $= -0,45 V^{27}$
Zelle:		E^0_{Zelle} $= +1,25 V^{27}$

Das MV/4-HO-TEMPOL-System wurde erstmals von Liu et al. in einer wässrigen FB im Labormaßstab untersucht.²⁷ Wie bei vielen O FBn stellt jedoch das Auftreten ungewollter Nebenreaktionen ein Hindernis für eine langfristige Nutzbarkeit dar. So kann bspw. TEMPOL durch den geladenen Zustand [4-HO-TEMPO]⁺ zu einer redoxinaktiven Spezies oxidiert werden¹²¹, oder eine Dimerbildung zweier MV⁺-Radikale kann letztlich zu einer Ausfällung der schwerlöslichen, zweifachreduzierten MV(0)-Spezies führen, was ebenfalls den Verlust der Redoxaktivität zur Folge hat.¹¹⁵

3.2.2.3. AQDS/BQDS FB

Trotz ihrer bekanntlich guten Redoxeigenschaften wurden organische Verbindungen auf Chinonbasis bisher nur selten für ESS im größeren Maßstab genutzt. 2009 untersuchten Xu und Wen eine wässrige FB auf der Basis von 1,2-Benzochinondisulfonsäure als positive Elektrolytlösung¹⁴⁵, und 2014 berichteten Huskinson et al. von Untersuchungen mit Anthrachinon-2,7-disulfonsäure als negative Elektrolytlösung⁴².

Im Rahmen dieser Arbeit wurde Anthrachinon-2,7-disulfonsäure (AQDS) als Aktivmaterial der negativen Halbzelle und 1,2-Dihydroxybenzochinon-3,5-disulfonsäure (BQDS) als Aktivmaterial der positiven Halbzelle verwendet. Dabei wurden die Natriumsalzformen dieser Chinone in wässrig-saurer Lösung eingesetzt. Chinone führen schnelle, protonengekoppelte Elektronentransferreaktionen durch, ohne dass hochenergetische Bindungen dissoziiert werden müssen. Mit ihren konjugierten Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen sowie Keto- und Enolgruppen ermöglichen Chinone die Delokalisierung und Umordnung ihrer Pi-Elektronen, wodurch sie Redoxtransformationen vergleichsweise leicht durchführen können.⁴¹ Diese Eigenschaft begünstigt grundsätzlich den Prozess des Ladungstransfers.



Im Gegensatz zu alkalischen Umgebungen, die häufig radikale Spezies hervorbringen, welche aufgrund ihrer Reaktivität zu unerwünschten Nebenreaktionen neigen, bieten saure Umgebungen bei Chinonen den Vorteil, dass die Reduktionsreaktion häufig durch einen konzertierten Protonen- und Elektronenübertragungsprozess erfolgt, ohne dass Radikale gebildet werden. Manchmal können die Mechanismen auch sequentielle Schritte der Protonierung und des Elektronentransfers umfassen.⁴¹

Auch für die Materialauswahl der Elektrode bringt diese Eigenschaft den Vorteil, dass leitfähige, metallfreie Elektroden mit großer Oberfläche, z. B. auf Rußbasis, ausreichen, um den Ladungstransferprozess zu unterstützen. Eine Protonenaustauschmembran mit hoher Ionenleitfähigkeit, wie Nafion, kann verwendet werden. In dieser Arbeit wurde jedoch aus Gründen des bestmöglichen technoökonomischen Vergleichs dieselbe Anionenaustauschmembran (FAP-450) wie in den anderen Systemen auch für die Chinone verwendet.

3.3. Technoökonomie

Um diese technischen Aspekte auch ökonomisch zu bewerten, müssen auch ökonomische Aspekte mit einbezogen werden. Technoökonomie bezeichnet die interdisziplinäre Analyse und Bewertung der wechselseitigen Beziehungen zwischen technologischer Entwicklung und ökonomischen Prozessen. Sie untersucht, wie technologische Innovationen wirtschaftliche Strukturen, Märkte, Produktionsprozesse und gesellschaftliche Entwicklungen beeinflussen – und umgekehrt, wie ökonomische Rahmenbedingungen technologische Innovationen fördern oder hemmen.^{146–151}

Dabei stützt sich die Technoökonomie auf Erkenntnisse aus der Volkswirtschaftslehre, Innovationsforschung, Technikfolgenabschätzung und Systemtheorie. Ziel ist es, technologische Entwicklungen im Kontext ökonomischer Effizienz, Wettbewerbsfähigkeit, Nachhaltigkeit und gesellschaftlicher Auswirkungen zu verstehen und zu gestalten.^{146,147,150,152}

Betrachtungsgegenstände sind dabei unter anderem:

- Technologiezyklen und wirtschaftliches Wachstum^{148,153,154}
- Innovationsdynamik und Marktstrukturen^{155,156}
- Technologiebewertung und Investitionsentscheidungen^{157,158}
- Digitalisierung und Strukturwandel^{159,160}
- Energie- und Umwelttechnologien in der Wirtschaft^{161,162}

Die Technoökonomie von Energiespeichersystemen untersucht ausgesuchte technologische Parameter systematisch und verknüpft diese mit ökonomischen Kennzahlen. Ziel ist es, Speichertechnologien nicht isoliert, sondern im Zusammenspiel mit Energieerzeugung, Netzdienstleistungen, Umweltwirkungen (z. B. CO₂-Bilanz) und regulatorischen Rahmenbedingungen zu bewerten, um wirtschaftliche und nachhaltige Entscheidungen zu unterstützen.^{163–168}

3.3.1. Ökonomische Grundlagen

Ökonomische Diskussionen über EES werden im industriellen Maßstab in der Regel auf Basis der Betrachtung der Lebenszykluskosten (englisch: Life Cycle Costs (*LCC*)) durchgeführt. In diesem Zusammenhang werden zunehmend auch Ökobilanzen solcher Systeme, die in der öffentlichen Diskussion immer mehr an Bedeutung gewinnen, berücksichtigt. Dies umfasst Inventarlisten aller Komponenten über den gesamten Lebenszyklus als Grundlage für ein Life Cycle Assessment (*LCA*), was auch für die Strommärkte von wachsendem Interesse ist¹⁶⁹.

LCC werden allgemein als alle monetarisierbaren Kosten definiert, die mit einem Produkt verbunden sind und die direkt von einem oder mehreren Akteuren im Lebenszyklus dieses Produkts getragen werden¹⁷⁰. Die methodischen Grundlagen solcher Lebenszykluskostenanalysen sind häufig national und international vorgegeben.^{171–174}

Die Kosten müssen in der Berechnung und Bewertung berücksichtigt werden, was in Deutschland ökologisch und ökonomisch auf drei DIN-Normen^{175–177} basiert.

Grundsätzlich sollten fünf Prinzipien beachtet werden:

1. Berücksichtigung des gesamten Lebenszyklus
2. Festlegung der Systemgrenzen/Definition des Systems
3. Berücksichtigung relevanter Kostenelemente
4. Erfassung der Kosten (akteursspezifisch)
5. Nutzenorientierung

Der Lebenszyklus umfasst im Wesentlichen die Phasen der Herstellung, Nutzung und Entsorgung. Der Untersuchungsgegenstand muss dabei eindeutig definiert und von seiner Umgebung abgegrenzt werden. Alle relevanten Kostenelemente sind zu berücksichtigen. Dies schließt bspw. im Fall von Herstellungs- oder Fertigungskosten nicht nur Materialkosten, sondern ggf. auch Personal- oder Energiekosten ein. Die akteursspezifische Kostenerfassung stellt sicher, dass alle Kosten aus einer klaren Perspektive erfasst werden. So können bspw. die Kosten aus der Perspektive des Produzenten oder des Nutzers gleichermaßen analysiert werden. Die Nutzenorientierung hilft dabei, die entstehenden Kosten in Relation zum Nutzen zu setzen, was eine Kennzahl ermöglicht, die Vergleiche zwischen verschiedenen Systemen erlaubt.

Dazu ist es notwendig, technoökonomische Kenndaten zu entwickeln, die technische Leistungsparameter mit den ökonomischen Betrachtungen der Kosten verknüpfen.

3.3.2. Technoökonomische Kenndaten

Die technoökonomischen Anforderungen an ESS hängen von der geplanten konkreten Anwendung ab. Je nach Anwendung müssen einzelne Fragestellungen unterschiedlich gewichtet werden, um das am besten geeignete ESS zu identifizieren.

Auswahlkriterien sind beispielsweise¹⁷⁸:

- Speicherkapazität
- Energiedichte (gravimetrisch oder volumetrisch)
- Reaktionszeit
- Zyklenfestigkeit
- Kosten für Bau und Betrieb
- Wirkungsgrad
- Speicherdauer

All diese Kriterien beeinflussen die Kosten des jeweiligen ESS, die wiederum dem Nutzen gegenübergestellt werden. In der Praxis wird üblicherweise der Kapitalwert als Kosten-Nutzen-Indikator verwendet (englisch: Net Present Value (*NPV*))^{134,179}. Dieser wird zeitdiskret nach der folgenden Gleichung berechnet:

$$NPV = \sum_{t=0}^n \frac{R_t}{(1+i)^t} \quad \text{Gl. 1}$$

Dabei sind R_t die Einnahmen im Jahr t , n die Lebensdauer des ESS in Jahren und i der Zinssatz. R_t errechnet sich als Differenz des jährlichen Ertrags E_t und der Kosten K_t (vgl. Gleichung Gl. 2).

$$R_t = E_t - K_t$$

Gl. 2

Zum Zeitpunkt $t=0$ gibt es noch keinen Nutzen, da das ESS noch nicht betrieben wird ($E_0 = 0$). Die Kosten entsprechen den Anfangsinvestitionen, die in dieser Arbeit für die betrachteten FBn vereinfacht als K_{FB} dargestellt sind (vgl. Gleichung **Gl. 15**). Diese Anfangsinvestitionen entsprechen den Capital Expenditures (*CAPEX*) der Labor-FBn.

Ein zweiter gängiger Kosten-Nutzen-Indikator sind die gewichteten Speicherkosten (englisch: Levelized Cost of Storage (*LCOS*)). Diese stellen das Verhältnis der entladenen Energie zu den aufgelaufenen Kosten über die Lebensdauer des ESS dar.

Im Rahmen dieser Arbeit werden die spezifischen Energieinhaltskosten in der Einheit Euro pro Wattstunde (€ Wh^{-1}) betrachtet, da der größte Nutzen der FBn, wie in Kapitel 1 beschrieben, in ihrer Funktion als Energiespeicher liegt.

den ökonomischen Betrachtungen der Kosten verknüpfen.

3.3.3. Technoökonomische Ansätze zur Modellierung von Durchflussbatterien

In der Literatur finden sich unterschiedliche Modellierungsansätze, die die Bandbreite der technoökonomischen Bewertung von Durchflussbatterien veranschaulichen. Diese reichen von generischen Kostenmodellen über marktorientierte Prognosen bis hin zu praxisnahen Anwendungen.

Ein grundlegendes Modell liefert die Studie von Noack et al. (2016), die einen detaillierten technoökonomischen Rahmen für Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien vorstellt.⁴³ Das Modell berücksichtigt zentrale Kostenkomponenten wie Zellstapel, Elektrolyt, Tanks und Peripherie, und verknüpft diese mit technischen Parametern wie Zellspannung und Stromdichte. Es bietet eine modulare Struktur, um sowohl stationäre als auch netzgekoppelte Anwendungen abzubilden.

Eine weiterführende, empirisch gestützte Analyse stammt von Poli et al. (2024).¹⁸⁰ Diese Arbeit basiert auf realen Markt- und Gerätedaten und fokussiert sich auf zukünftige Kostenentwicklungen. Die Autoren analysieren insbesondere den Einfluss von Skaleneffekten, Lernkurven sowie regulatorischen Rahmenbedingungen auf die Stromspeicherkosten (englisch: Levelized Cost of Storage (*LCOS*)). Ihre Ergebnisse verdeutlichen, dass Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien bei entsprechendem Markthochlauf kostentechnisch konkurrenzfähig zu anderen Speichertechnologien werden können.

Ergänzend hierzu liefert Resch et al. (2019) eine Anwendungsperspektive, in der Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien hinsichtlich ihrer technischen und wirtschaftlichen Eignung für netzunterstützende Dienstleistungen wie Frequenzregelung oder Eigenverbrauchsoptimierung untersucht werden.¹⁸¹ Die Studie integriert reale Betriebsdaten eines Demonstrationsprojekts in Deutschland und ermöglicht eine standortspezifische Bewertung.

Diese unterschiedlichen Studien verdeutlichen die Vielfalt technoökonomischer Ansätze im Bereich der Durchflussbatterien. Sie können eine Grundlage für

Technologieentwicklung, wirtschaftliche Bewertung sowie strategische Entscheidungsprozesse in der Energiewende bilden.

4. Modellierung

Die Modellierung der Durchflussbatterien wurde sowohl technisch als auch ökonomisch durchgeführt und in einem Gesamtmodell abgebildet.¹⁸² Entgegen der Methodik, bei der technisch-wirtschaftlichen (also technoökonomischen) Modellierung zumindest teilweise auf Literaturwerte zurückzugreifen^{16,22,183,184}, wurden für diese Studie V FBn^{43,45,120,185–187}, MV/TEMPOL FBn^{27,40,96,115,121,188} und AQDS/BQDS FBn^{15,189} im Labormaßstab gebaut. Dabei wurden Kosten- und Leistungsdaten gesammelt, um ein technoökonomisches Modell zu entwickeln, das die Grundlage für diese Arbeit mit einer Elektrolytvergleichsstudie bildete.

4.1. Technische Modellierung von Durchflussbatterien

Zur Beschreibung einer FB wurden die üblichen Leistungsparameter verwendet.^{39,43,46,95,190} Für eine Elektrolytlösung gibt die volumetrische Kapazität C die Ladungsmenge an, die in einem bestimmten Volumen gespeichert werden kann. Nach dem Faradayschen Gesetz (Gleichung Gl. 3) hängt dieser Wert von der Konzentration c des redoxaktiven Materials und der Anzahl der während des Redoxprozesses übertragenen Elektronen z ab. F steht für die Faraday-Konstante (96485 C mol^{-1}). Die Kapazität wird üblicherweise in der Einheit Ampèrestunden pro Liter (Ah L^{-1}) angegeben.

$$C = z \cdot F \cdot c \quad \text{Gl. 3}$$

Die Elektrolyte beeinflussen über die Standardelektrodenpotenziale (φ^0) die tatsächliche reversible Zellspannung (U_{rev}) im offenen Stromkreis (OCV) und damit auch die Leistung. Das Standardelektrodenpotenzial stellt sich unter Standardbedingungen ($T^0 = 298,15 \text{ K}$, $p^0 = 1 \text{ bar}$ und $a_i^0 = 1 \text{ mol kg}^{-1}$), wobei a_i das Maß der Aktivität ist, ein. Unter realen Bedingungen sind diese jedoch selten gegeben, weshalb das Elektrodenpotenzial mithilfe der Nernst-Gleichung (Gleichung Gl. 4) konzentrationsabhängig berechnet wird.

$$\varphi = \varphi^0 + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln\left(\frac{a_{ox}}{a_{red}}\right) \approx \varphi^0 + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln\left(\frac{c_{ox}}{c_{red}}\right) \quad \text{Gl. 4}$$

Neben der Temperatur T in Kelvin, a der Aktivität in mol m^{-3} und der Anzahl der bei der Zellreaktion umgesetzten Elektronen z beschreibt R die universelle Gaskonstante ($8,3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$) und c_{ox} bzw. c_{red} die molare Konzentration der oxidierenden bzw. reduzierenden Spezies in mol m^{-3} . Die übliche Einheit von φ ist Volt (V).

U_{rev} lässt sich aus den Standardelektrodenpotenzialen der jeweiligen Halbzellen (Anode und Kathode) berechnen (Gleichung Gl. 5).

$$U_{rev} = \varphi_{Kathode}^0 - \varphi_{Anode}^0 \quad \text{Gl. 5}$$

Was mithilfe der Quotientenregel für Rechnungen mit Logarithmen die Berechnung nach Gleichung Gl. 6 ergibt:

$$U_{rev} = (\varphi_{Kathode}^0 - \varphi_{Anode}^0) + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln\left(\frac{c_{Kathode,ox} \cdot c_{Anode,red}}{c_{Kathode,red} \cdot c_{Anode,ox}}\right) \quad \text{Gl. 6}$$

Das Produkt aus Gleichung Gl. 3 und Gleichung Gl. 6 ergibt die volumetrische Energiedichte E , die ein Maß dafür ist, wie viel Energie in einem gegebenen Volumen des Elektrolyten gespeichert werden kann und wird in Wattstunden pro Liter (Wh L^{-1}) angegeben.

$$E = U_{rev} C \quad \text{Gl. 7}$$

Die Stromdichte j , die den eingesetzten Strom I ins Verhältnis zur aktiven Elektrodenfläche $Fläche_{aktive}$ setzt, ist als Einflussgröße der zeitlichen Dauer des Entlade- und Ladevorgangs zu betrachten. Sie wird in der Einheit mA cm^{-2} quantifiziert.

$$j = \frac{I}{Fläche_{aktive}} \quad \text{Gl. 8}$$

Daraus ergibt sich die mittlere Leistungsdichte $\bar{P}$ über der gemessenen mittleren Spannung $\bar{U}$ in mW cm^{-2} .

$$\bar{P} = \frac{\bar{U} \cdot I}{Fläche_{aktive}} \quad \text{Gl. 9}$$

Daraus lässt sich die Leistung P über die bekannte aktive Elektrodenfläche berechnen.

$$P = \bar{P} \cdot Fläche_{aktive} \quad \text{Gl. 10}$$

Aus dem Strom I und der Lade- bzw. Entladezeit t kann auch die während des jeweiligen Lade- bzw. Entladevorgangs gespeicherte bzw. bereitgestellte Ladungsmenge Q berechnet werden. Diese wird in Ah angegeben.

$$Q = I \cdot t \quad \text{Gl. 11}$$

Diese Formeln beschreiben die wesentlichen technischen Leistungsparameter einer FB, die auch im technoökonomischen Modell dargestellt werden. Diese Leistungsparameter lassen sich weiter in Bereiche ordnen, was der grundsätzlichen Modellierung von FBn zuträglich ist (vgl. **Abbildung 8** und **Abbildung 9**).

Als einheitslose Vergleichsparameter können drei unterschiedliche Effizienzen herangezogen werden.

Das Verhältnis von während des Ladevorgangs eingetragener elektrischer Ladung zu der im darauffolgenden Entladevorgang zurückgewonnenen ergibt die Coulombeffizienz (CE) und errechnet sich unter Beachtung von Gleichung Gl. 11 nach Gleichung Gl. 12. Sie ist ein guter Indikator für irreversible Nebenreaktionen der aktiven Spezies bzw. des Elektrolyten und Kreuzkontaminationen zwischen den beiden Halbzellräumen.⁹⁶

$$CE = \eta_C = \frac{\int I_{Entladen} dt}{\int I_{Laden} dt} = \frac{Q_{Entladen}}{Q_{Laden}} \quad \text{Gl. 12}$$

Die Spannungseffizienz (VE) gibt das Verhältnis der mittleren Entlade- zur mittleren Ladespannung bei konstantem Strom an. Diese berechnet sich aus den Quotienten der jeweiligen Flächenintegrale unterhalb der Lade- bzw. Entladekurve und der entsprechenden Lade- bzw. Entladezeit (siehe Gleichung Gl. 13). Mit steigender Stromdichte sinkt die VE . Sie wird zudem von einer Vielzahl von Überpotenzialen, wie dem Diffusions-, Polarisations- oder ohmschen Überpotenzial, beeinflusst, sie sinkt also mit zunehmendem Widerstand.⁹⁶

$$VE = \eta_V = \frac{\int U_{Entladen} \cdot I_{Entladen} dt}{\int U_{Laden} \cdot I_{Laden} dt} = \frac{\frac{\int_0^{t_{Entladen}} U_{Entladen}(t) dt}{t_{Entladen}}}{\frac{\int_0^{t_{Laden}} U_{Laden}(t) dt}{t_{Laden}}} \quad \text{Gl. 13}$$

Das Produkt aus CE und VE ergibt die Energieeffizienz (EE), die ein Maß für die während des Ladevorgangs zugeführte Energie, die im Entladevorgang wiedererhalten wird, ist. Sie hängt besonders von der angelegten Stromdichte und der Materialqualität ab.⁹⁶ Rechnerisch ermittelt sich die EE aus dem Quotienten der nach Gleichung Gl. 14 mit Hilfe der mittleren Spannung bestimmbaren realen Energiedichten für den jeweiligen Lade- und Entladezyklus.

$$EE = \eta_C \eta_V = \frac{\bar{E}_{Entladen}}{\bar{E}_{Laden}} \quad \text{Gl. 14}$$

Da eine FB aus vielfältigen Komponenten besteht, die sowohl materiell als auch immateriell sind, wurden diese jeweils dem Bereich zugeordnet, in dem sie sich maßgeblich auswirken (vgl. **Abbildung 8**). Diese Modellierung bildet die im Labor genutzten FBn ab.

FBn in größeren industriellen Maßstäben sind weitaus komplexer, was sich durch weitere zu berücksichtigende Bereiche und auch zusätzliche Komponenten in den Bereichen niederschlägt. Diese sind in **Abbildung 9** dargestellt, dienen in dieser Arbeit aber nur dem grundsätzlichen Verständnis und werden nicht weiter untersucht.

4.1.1. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Energie zur technischen Modellierung

Für die Energiebereitstellung einer FB im Labormaßstab werden in erster Linie folgende Komponenten benötigt, die alle der chemischen Speicherung der Energie in den Elektrolyten dienen. Durch die Anpassung der Menge kann die Kapazität der FB einfach skaliert werden.

Der Negolytkreislauf stellt den Elektrolyten für die Halbzellen mit der negativen Elektrode bereit. Das bedeutet, dass beim Laden Elektronen chemisch absorbiert und beim Entladen der FB wieder freigesetzt werden. Der reversible Anteil dieses Zyklus ist beim Laden und Entladen jeweils entgegengesetzt. Das Redoxpotenzial ist dauerhaft negativ. In den Halbzellen mit positiver Elektrode übernimmt der Posolytkreislauf die gleiche Funktion, nur dass hier beim Entladen Elektronen chemisch absorbiert und beim Laden freigesetzt werden. Das Redoxpotenzial des Posolytkreislaufs ist dauerhaft positiv.

Die Tanks dienen als Reservoirs für die Elektrolyten, deren Volumen einfach skalierbar ist, wodurch in gleicher Weise die Kapazität skaliert wird. Da sie keine weiteren Funktionen erfüllen, können sie aus rein wirtschaftlichen Gesichtspunkten ausgewählt werden. Sie müssen lediglich chemisch stabil gegenüber dem Elektrolyten sein.

Sowohl der Negolyt als auch der Posolyt bestehen in der Regel aus einer Mischung aus einer aktiven Spezies, einem Lösungsmittel und in manchen Fällen einem oder mehreren Additiven. In dieser Arbeit wurden ausschließlich Elektrolyte in wässriger Lösung eingesetzt. Die aktiven Spezies ändern während des Lade- und Entladevorgangs ihren Oxidationszustand. Sie speichern die Elektronen des Stromflusses oder stellen diese zur Verfügung. Ein oder mehrere Additive ergänzen fehlende Eigenschaften des Elektrolyten, wodurch dessen Stabilität erhöht und der Ladungstransport unterstützt wird. Eine Anforderung an das Lösungsmittel ist es, die dauerhafte Pumpfähigkeit des Elektrolyten zu gewährleisten, also dessen Fließfähigkeit sicherzustellen. Dies ermöglicht auch die innere Kinetik für den Ladungsaustausch.

All diese Komponenten sind auch Bestandteil des Bereichs Energie im hierarchischen Komponentenmodell für Durchflussbatterien im industriellen Maßstab (vgl. **Abbildung 9**).

4.1.2. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Leistung zur technischen Modellierung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde zur Sicherstellung der Vergleichbarkeit der Laborergebnisse eine standardisierte Laborzelle weiterentwickelt, die – abgesehen von den untersuchten Elektrolyten – aus identischen Komponenten bestand (vgl. **Tabelle 12** und **Abbildung 7**). Dies gilt für alle Komponenten des Bereichs Leistung, die maßgeblich zur Energiebereitstellung der FB beitragen. Dazu gehören die Zellen, die in Zellstapeln zusammengefasst werden. Dieser Ansatz ermöglicht es, die unterschiedlichen Performanceparameter, die durch verschiedene Materialeigenschaften bedingt sind, zu eliminieren. Der standardisierte Teststand dient nicht nur als Grundlage für die technoökonomische Modellierung, sondern kann auch für zukünftige Untersuchungen zur Erweiterung des Modells verwendet werden.

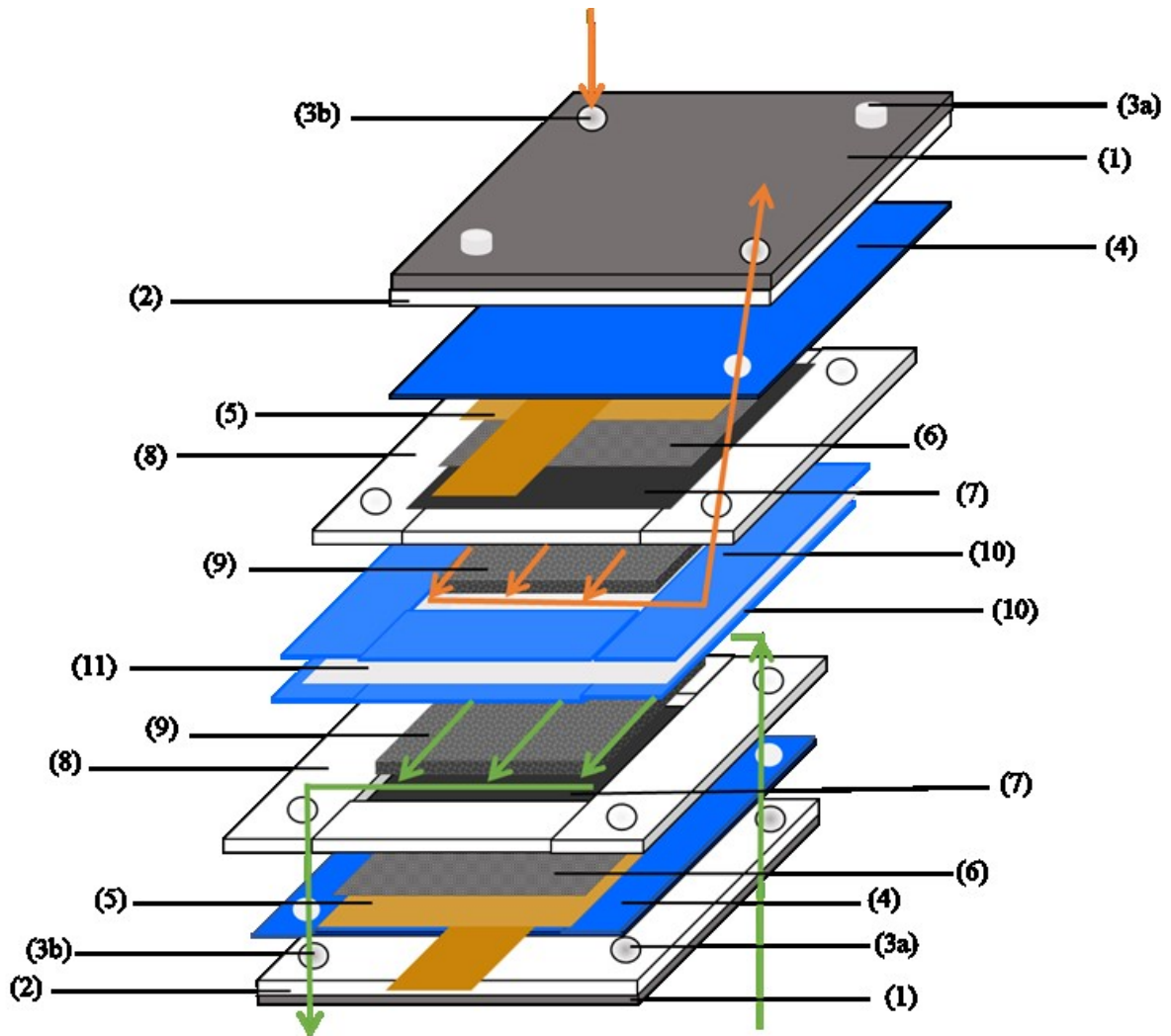


Abbildung 7. Schematische Darstellung des Aufbaus der standardisierten Laborzelle mit (1) Endplatten, (2) Isolationsplatten, (3a und b) Fittings und Rohrverschlusskappen, (4 und 10) Dichtungen, (5) Stromabnehmer, (6) Gasdiffusionsschicht, (7) Bipolarplatte, (8) Durchflussrahmen, (9) Elektrode und (11) Membran.

In den Anhängen befinden sich eine detaillierte Funktionsbeschreibung der Komponenten und die Auflistung der konkret eingesetzten Materialien (Anhang A) sowie eine fotodokumentierte Bauanleitung (Anhang B). Die wesentlichen Funktionen der Komponenten werden im Folgenden kurz zusammengefasst.

Die semipermeable Membran trennt die beiden Halbzellen und verhindert einen direkten Kontakt zwischen den aktiven Spezies im Elektrolyten (Negolyt und Posolyt), die durch die jeweilige Halbzelle gepumpt wird (grüne bzw. orange Pfeile). Gleichzeitig ermöglicht sie den Ionenfluss, der den Ladungsausgleich zwischen den Zellen gewährleistet. Eine hohe Permeabilität für die Leitsalzlösung ist erforderlich, während die Permeabilität für die Ladungszustände der aktiven Spezies gering gehalten werden sollte, um Kreuzkontaminationen^{191,192} zu minimieren. Die Membran muss zudem den physikalisch-chemischen Betriebsbedingungen der FB, wie pH-Wert, Druck und Temperatur, standhalten.

Die Elektrode ist entscheidend für die Durchführung der Elektronentransferreaktionen (Redox-Reaktionen) der aktiven Spezies im Elektrolyten.

Die Bipolarplatte gewährleistet die elektrische Verbindung zwischen den Zellen und trennt benachbarte Zellen. Sie muss einen niedrigen elektrischen Widerstand und eine hohe chemische Stabilität gegenüber dem Elektrolyten aufweisen. Die mechanische Stabilität der Bipolarplatte trägt zur strukturellen Integrität des Zellstapels bei.

Die Gasdiffusionsschicht unterstützt den Elektronentransfer zwischen der Bipolarplatte und der Elektrode und reduziert den elektrischen Übergangswiderstand.

Das Kupferband dient als Stromabnehmer und transportiert die Elektronen zum Stromabnehmer der anderen Halbzelle, wodurch der nutzbare Strom fließt.

Die Endplatte sorgt für die mechanische Stabilität des Zellstapels und besteht aus Aluminium.

Die Isolationsplatte schützt die FB vor Degradationsprozessen durch Elektrolytablagerungen. Zudem trennt sie den galvanisch aktiven Teil der Durchflussbatterie vom Gehäuse ab, das im Labor aus Metall besteht, und verhindert einen Kurzschluss zwischen beiden Halbzellen.

Der Durchflussrahmen stabilisiert den Zellstapel und dient der Befestigung der Schläuche für den Elektrolytzu- und -abfluss. Eine Dichtung verhindert das Austreten des Elektrolyten und muss chemisch stabil gegenüber diesem sein. Mit den Anschlüssen werden die Schläuche an die Zelle angeschlossen, wodurch der Kreislauf zwischen Zelle und Elektrolytentanks geschlossen wird.

Das Zusammenbauen all dieser Komponenten ist die finale Zell- und Stapelmontage.

Für FBn im industriellen Maßstab sind zusätzlich weitere Komponenten erforderlich (vgl. **Abbildung 9**), die durch Modellerweiterungen berücksichtigt werden können. Zur Regulierung der Elektrolytflüsse in den Zellstapeln sind Stellantriebe und Ventile notwendig.

4.1.3. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Steuerung und Verbindungen zur technischen Modellierung

Pumpen und Schläuche sind erforderlich, um einen kontinuierlichen Elektrolytfluss zu gewährleisten. Diese Komponenten müssen integriert werden, wobei die finale Batteriemontage zur Verbindung der Zellen oder Zellstapel mit den Tanks eine immaterielle darstellt, die jedoch im ganzheitlichen Modell berücksichtigt werden muss.

Im industriellen Maßstab sind über die genannten Komponenten hinaus zusätzliche Elemente erforderlich, da der Steuerungsaufwand bei komplexeren FBn deutlich steigt (vgl. **Abbildung 9**). Diese zusätzlichen Komponenten können durch Erweiterungen im Modell abgebildet werden.

Die elektrochemischen Redox-Reaktionen der Elektrolyte in FBn sind nur innerhalb eines begrenzten Temperaturbereichs möglich. Starke Temperaturschwankungen führen zu

erhöhten Degradationsraten, was technoökonomisch nachteilig ist.¹²⁸ Um dies zu vermeiden, werden Wärmetauscher und Leistungssteuerungen eingesetzt, die helfen, das Temperaturfenster aufrechtzuerhalten.

Das Batteriemanagementsystem (BMS) übernimmt darüber hinaus die Aufgabe, den Betrieb der Batterie während des Lade- und Entladevorgangs zu überwachen und zu regeln. Es verarbeitet Sensordaten und erfasst Parameter wie Spannung, Kapazität, Temperatur, Stromverbrauch, Ladezustand, Gesundheitszustand und Ladezyklen. Das BMS gewährleistet eine optimale Nutzung der in den Batteriezellen gespeicherten Energie und schützt die Zellen vor Tiefentladung und Überladung.^{193,194}

4.1.4. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Infrastrukturkosten

Infrastrukturkosten sind bei den Labor-FBn nicht angefallen.

Für FBn im industriellen Maßstab sind diese Kosten jedoch zu berücksichtigen (vgl. **Abbildung 9**). Dieser zusätzliche Bereich kann ebenfalls durch eine Erweiterung im Modell abgebildet werden. Dabei müssen die Komponenten Planung, Grundstückserwerb, Konstruktion und Betrieb berücksichtigt werden.

4.1.5. Beschreibung der Komponenten des Bereichs Finanzierungskosten

Auch Finanzierungskosten sind bei den Labor-FBn nicht angefallen.

Für FBn im industriellen Maßstab sind diese Kosten jedoch zu berücksichtigen (vgl. **Abbildung 9**). Auch dieser zusätzliche Bereich lässt sich durch eine Erweiterung im Modell abbilden. Bei den Finanzierungskosten wird grundsätzlich zwischen einmaligen Kosten und Betriebskosten unterschieden.

Bei den Betriebskosten ist darauf zu achten, dass keine Kosten doppelt erfasst werden, die bereits in den Infrastrukturkosten berücksichtigt wurden (vgl. Unterkapitel 4.1.4). Zu den Betriebskosten zählen insbesondere Zinsen und gegebenenfalls Überziehungsgebühren.

Die einmaligen Kosten entstehen bei der Aufnahme der Finanzierung und umfassen unter anderem Kreditgebühren, Bearbeitungsgebühren, Nicht-Personal-Kosten, Rückstellungszinsen, Disagio und etwaige Prämien.

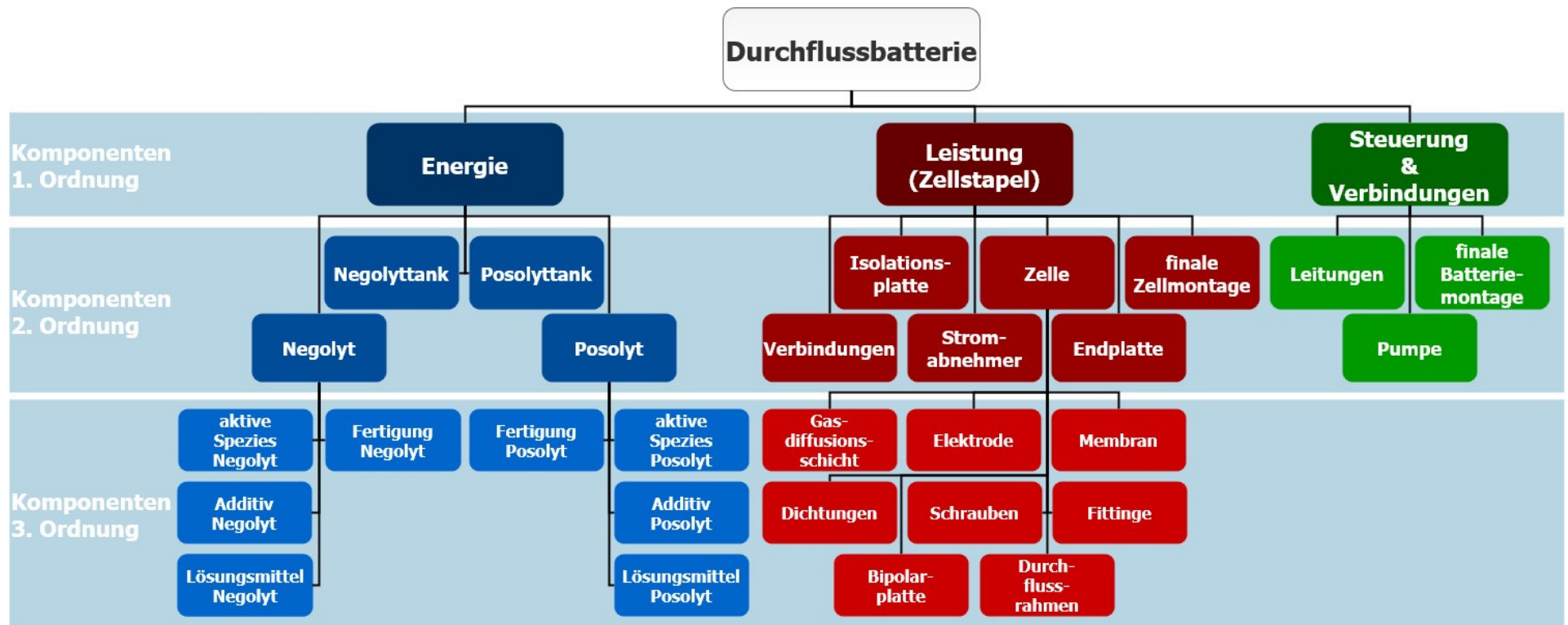


Abbildung 8. Hierarchisches Komponentenmodell für Durchflussbatterien im Labormaßstab mit den Bereichen Energie, Leistung und Steuerung und Verbindungen.

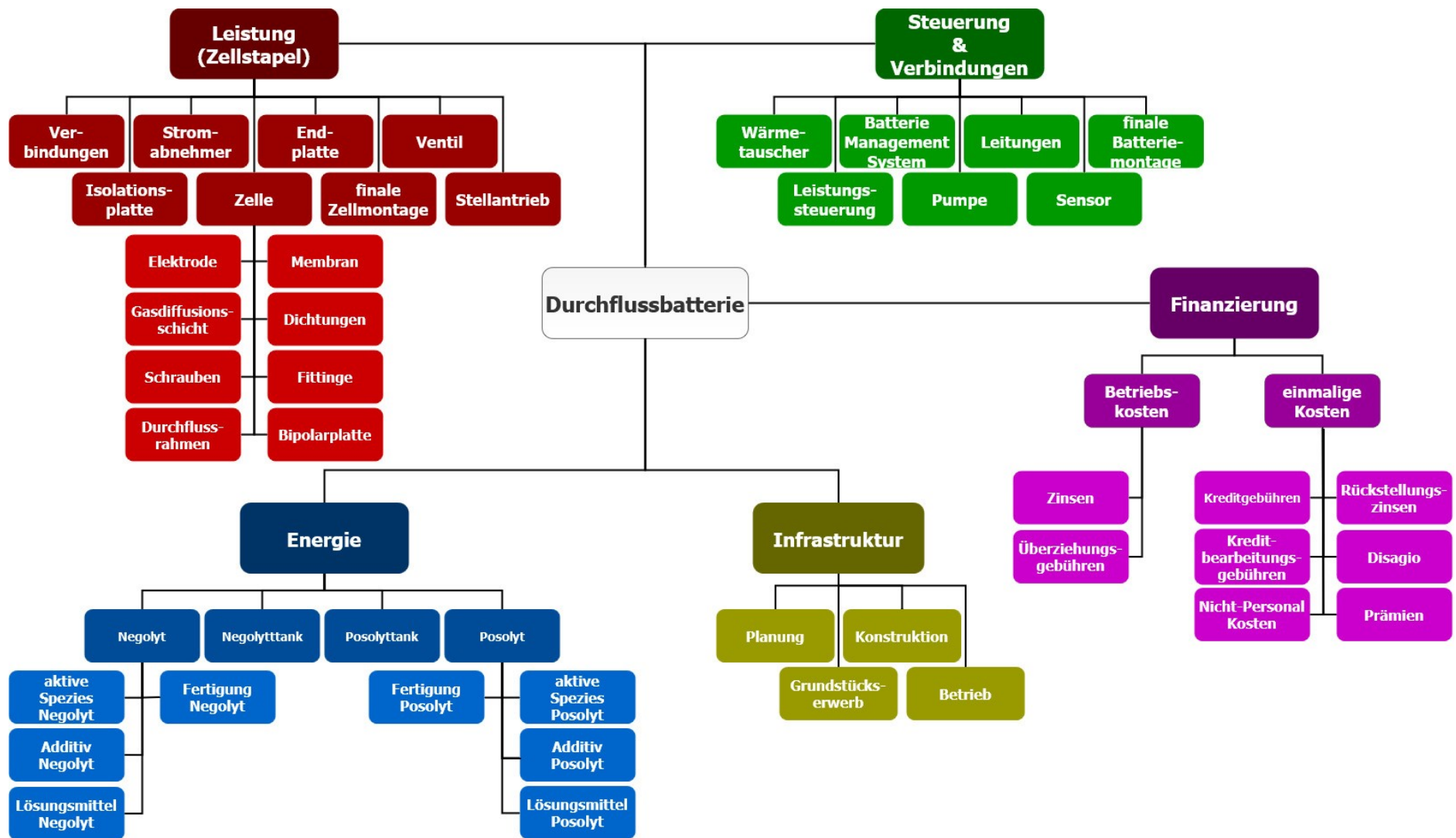


Abbildung 9. Hierarchisches Komponentenmodell für Durchflussbatterien im industriellen Maßstab mit den Bereichen Energie, Leistung, Steuerung und Verbindungen, Infrastruktur und Finanzierung.

4.2. Ökonomische Modellierung von Durchflussbatterien

4.2.1. Herstellungskosten

Die Herstellungskosten der standardisierten FBn im Labormaßstab sind in den folgenden Kostenverteilungen für die Bereiche Energie und Leistung (siehe **Abbildung 24**, **Abbildung 25**, **Abbildung 26**, **Abbildung 27**, **Abbildung 28**, **Abbildung 29**, **Abbildung 30**, **Abbildung 31** und **Abbildung 32**) detailliert aufgeführt. Dabei wurden sowohl die finanziellen Aufwendungen für den Erwerb der verschiedenen Komponenten als auch die Arbeitsstunden und der Stromverbrauch erfasst. Um diese Kosten in monetäre Ausdrücke zu überführen, wurden spezifische Kostensätze definiert und der Aufwand entsprechend umgerechnet.

Für die ökonomische Darstellung der FBn wurden im Anschluss Kostenfunktionen nach dem hierarchischen Komponentenmodell aufgestellt (vgl. **Abbildung 8**). Die Gesamtkosten der FBn im Labormaßstab (K_{FB}) ergeben sich dabei als Summe der Kosten in den Bereichen Energie ($K_{Energie}$), Leistung ($K_{Leistung}$) und Steuerung und Verbindungen ($K_{Steuerung\ und\ Verbindungen}$):

$$K_{FB} = K_{Energie} + K_{Leistung} + K_{Steuerung\ und\ Verbindungen} \quad \text{Gl. 15}$$

Die Kosten für den Bereich Energie ($K_{Energie}$) setzen sich zusammen aus den Elektrolytkosten sowie den Kosten der zugehörigen Tanks:

$$K_{Energie} = K_{Posolyt} + K_{Posolyttank} + K_{Negolyt} + K_{Negolyttank} \quad \text{Gl. 16}$$

Die Elektrolytkosten ($K_{Elektrolyt}$) für Posolyt und Negolyt ergeben sich aus der Summe der Kosten der jeweiligen Komponenten sowie der Herstellungskosten des Elektrolyten:

$$K_{Elektrolyt} = K_{aktive\ Spezies} + K_{Lösungsmittel} + K_{Additiv} + K_{Herstellung\ Elektrolyt} \quad \text{Gl. 17}$$

Die Kosten für den Bereich Leistung ($K_{Leistung}$) werden unter Berücksichtigung der Anzahl der Zellen (N_{Zelle}) gemäß der folgenden Gleichung ermittelt:

$$K_{Leistung} = K_{Stromabnehmer} + K_{Isolationsplatte} + K_{Endplatte} + K_{Verbindungen} + K_{finale\ Zellen- \& \ Stapelmontage} + N_{Zelle} \cdot K_{Zelle} \quad \text{Gl. 18}$$

Die Zellkosten (K_{Zelle}) sind als Summe der Kosten für die einzelnen Zellkomponenten definiert:

$$K_{Zelle} = K_{Membran} + K_{Elektrode} + K_{Bipolarplatte} + K_{Dichtung} + K_{Durchflussrahmen} + K_{Schrauben} + K_{Gasdiffusionsschicht} + K_{Fittinge} \quad \text{Gl. 19}$$

Für den Bereich Steuerung und Verbindungen ($K_{Steuerung\ und\ Verbindungen}$) werden entsprechend der gleichen Systematik die einzelnen Komponenten sowie die Endmontagekosten der gesamten FB addiert:

$$K_{\text{Steuerung und Verbindungen}} = K_{\text{Pumpe}} + K_{\text{Schläuche}} + K_{\text{Endmontage}}$$

Gl. 20

4.2.2. Modellierung der Betriebskosten der untersuchten Durchflussbatterien unter Berücksichtigung der Degradation der Elektrolyten

Die Degradation von Batterien spielt eine wesentliche Rolle bei den Betriebskosten von ESS^{43,114,190,195}, da dieser Verschleiß ihre Leistungsfähigkeit im Laufe der Zeit verringert. Dieser Degradationsprozess wird durch verschiedene Faktoren¹⁹⁶ wie Ladezyklen, Temperatur, Entladetiefe und Alterung beschleunigt. Die durch Degradation verursachten Kapazitätsrückgänge führen zu einem Effizienzverlust des ESS (vgl. Gleichungen Gl. 12, Gl. 13 und Gl. 14) und erhöhen somit die Betriebskosten.

Kapazitätsrückgänge haben in der praktischen Anwendung oft zur Folge, dass zusätzlich Energie aus dem Netz bezogen werden muss, um den Bedarf zu decken, was zusätzliche Kosten verursacht.

Ein weiterer negativer Effekt der Degradation ist die verkürzte Lebensdauer der Batterie, was zu häufigeren Austausch- oder Wartungskosten führt. Eine sorgfältige Planung und Überwachung des Batteriebetriebs kann diesen Kostenfaktor minimieren und die Lebensdauer der Batterien maximieren.^{197,198}

Die spezifischen Kosten sind die entscheidende Kenngröße für die technoökonomische Modellierung in dieser Arbeit. Dies können sowohl die spezifischen Energieinhaltskosten in [€ Wh⁻¹] als auch die spezifischen Kapazitätsdichtekosten in [€ L Ah⁻¹] sein. Die spezifischen Energieinhaltskosten wurden in umfangreichen Labormessungen für alle untersuchten FB-Typen erfasst und bilden die Grundlage für die technoökonomische Analyse. Die Labordaten stellen dabei den Anfangszustand des Systems dar, einschließlich der gesamten Herstellungskosten (englisch: Capital Expenditures (*CAPEX*)), wobei keine zusätzlichen Kosten für den Betrieb oder Erhalt der Laborbatterien während der Tests angefallen sind.

Die spezifischen Kapazitätsdichtekosten geben auf Grundlage der gemessenen Degradation und der zyklenabhängigen Alterung einen Hinweis auf den Betrieb einer solchen FB. Zur Berechnung der spezifischen Energieinhaltskosten werden die *CAPEX* ins Verhältnis zur gemessenen Energie der getesteten Batterie gesetzt (vgl. Gleichung Gl. 21):

$$SK_{\text{Energieinhalt}} = \frac{CAPEX}{\text{Energie}}$$

Gl. 21

Die *CAPEX* setzen sich bei den untersuchten Laborzellen aus den Kosten der Bereiche Energie und Leistung zusammen. Die Kosten für den Bereich Steuerung und Verbindungen wurden nicht berücksichtigt, da die hohen Kosten der Pumpe zu Verzerrungen in den Ergebnissen geführt hätten. Zudem ist die Pumpe unter den Laborbedingungen nicht verschleißanfällig, weshalb ihre Einbeziehung in die Kostenrechnung hier nicht zielführend war. Die spezifischen Energieinhaltskosten wurden gemäß Gleichung Gl. 22 berechnet:

$$SK_{\text{Energieinhalt}} = \frac{K_{\text{Energie}} + K_{\text{Leistung}}}{\text{Energie}} \quad \text{Gl. 22}$$

Da diese Herstellungskosten nicht in jedem Zyklus neu anfallen, sinken die mittleren spezifischen Energieinhaltskosten mit zunehmender Zyklenzahl, da sich die Herstellungskosten über alle Zyklen (n) verteilen (vgl. Gleichung Gl. 23):

$$\overline{SK_{\text{Energieinhalt}}} = \frac{SK_{\text{Energieinhalt}}}{n} \quad \text{Gl. 23}$$

Dieser Ansatz kann näherungsweise mit den üblichen *LCOS* verglichen werden.¹⁹⁹

Mit fortschreitender Nutzung kommt es jedoch, wie bereits erwähnt, zur Alterung der FB. In dieser Arbeit wird ausschließlich die Degradation der Elektrolyten berücksichtigt. Zudem wird davon ausgegangen, dass die Alterung des Elektrolyten, also die Degradation, in einem prozentualen Teil, der am Anfang des Zyklus verfügbaren aktiven Spezies stattfindet und somit eine prozentuale Degradationsrate (D) gemäß Gleichung Gl. 24 beschrieben werden:

$$D = \frac{\%}{\text{Zyklus}} \quad \text{Gl. 24}$$

Die Alterung wird durch die Funktion in Gleichung Gl. 25 modelliert, wobei n die Anzahl der Zyklen darstellt. **Abbildung 10** veranschaulicht das zyklusabhängige Verhalten dieser Funktion für verschiedene Degradationsraten:

$$f(n) = (1 - D)^n \quad \text{Gl. 25}$$

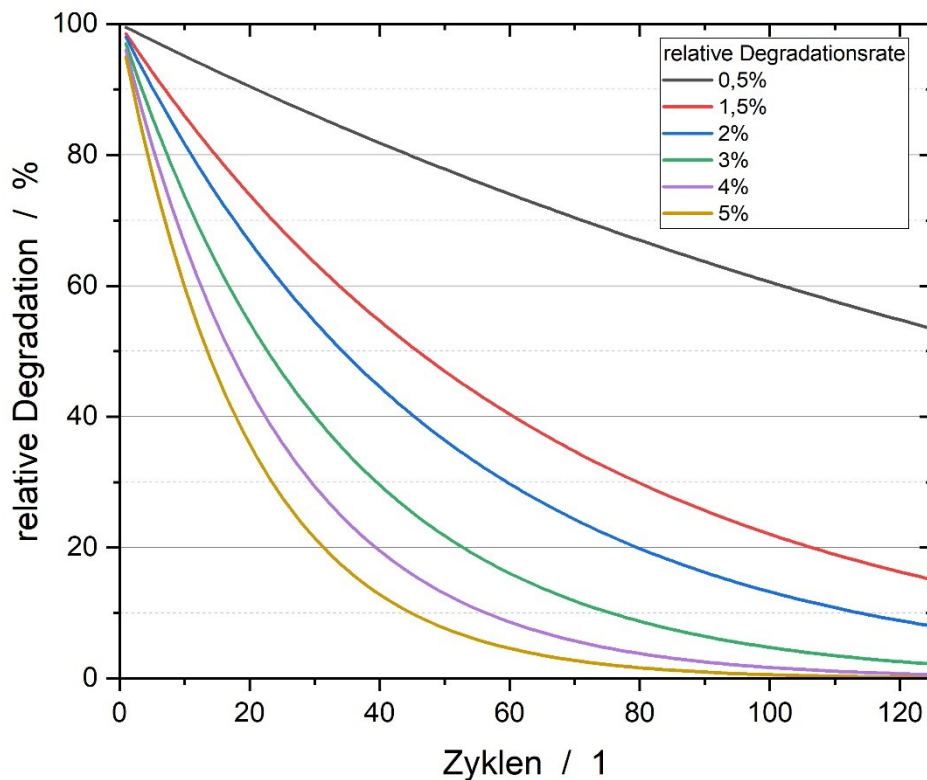


Abbildung 10. Darstellung des zyklusabhängigen Verhaltens der prozentualen Degradation für Degradationsraten zwischen 0,5% und 5% bei einer Degradationsfunktion der Form $f(n) = (1 - D)^n$.

Für die weiteren Betrachtungen wird angenommen, dass ein Elektrolytenaustausch bei einer Degradation von 50% erforderlich ist, d. h., wenn die Kapazität um 50% gesunken ist. Diese Annahme stellt eine vereinfachte Modellierung dar. In der praktischen Anwendung sind verschiedene Maßnahmen zur Mitigation der Degradation üblich. Dazu zählen insbesondere die kontinuierliche Elektrolytumwälzung, welche durch das gezielte Umpumpen des Elektrolyten realisiert wird, Additivzugaben, Temperaturmanagement oder auch partielle Regenerationsverfahren.^{200,201} Die Zyklenanzahl, bis eine solche Degradation erreicht wird, hängt von der Degradationsrate ab und kann gemäß Gleichung Gl. 26 ermittelt werden:

$$(1 - D)^n = 50\% \quad \text{Gl. 26}$$

Durch Anwendung des dritten Logarithmusgesetzes ergibt sich die Zyklenzahl n , bei der die Kapazität der FB auf 50% gesunken ist:

$$n = \frac{\log 50\%}{\log(1 - D)} \quad \text{Gl. 27}$$

Das Verhalten dieser Funktion in Abhängigkeit von der Degradationsrate (D) ist in **Abbildung 11** dargestellt.

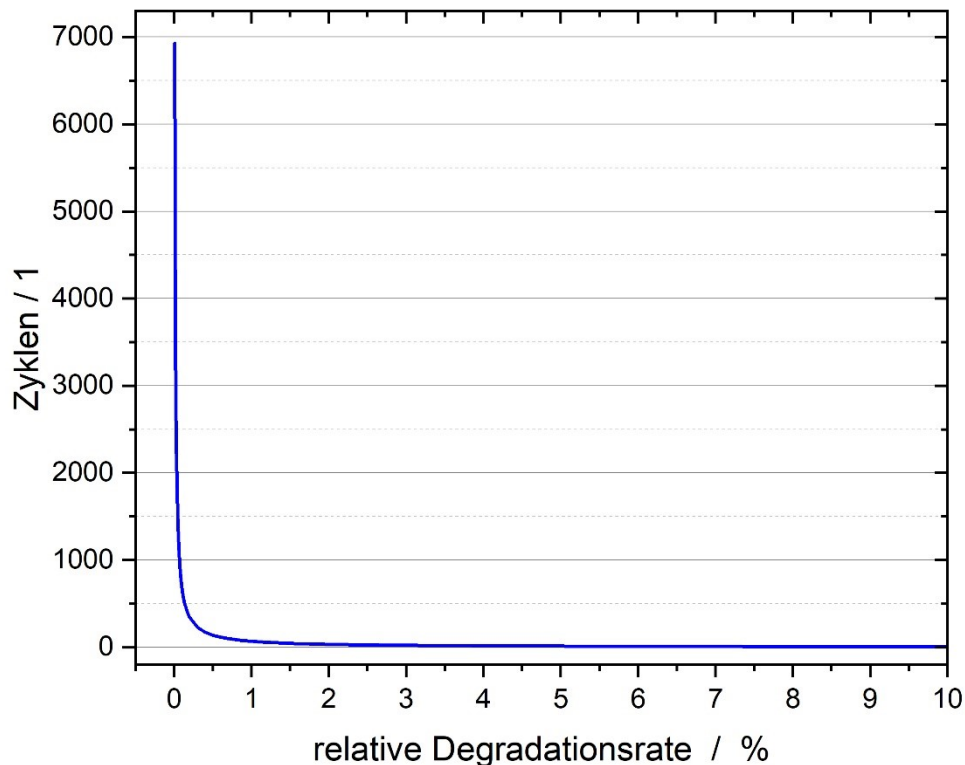


Abbildung 11. Darstellung der bis zu einer Degradation von 50% (Halbwertdegradation) erreichbaren Zyklen in Abhängigkeit einer relativen Degradationsrate zwischen 0,01% und 10%.

Hohe Zyklenzahlen zwischen den notwendigen Erneuerungen der Elektrolyten können nur bei niedrigen Degradationsraten erreicht werden. Eine Degradationsrate von 1% würde beispielsweise einen Austausch des Elektrolyten nach 69 Zyklen erforderlich machen.

Die Degradation führt über die Nutzungsdauer hinweg zu steigenden Betriebskosten, da sich die Gesamtkosten der FB (vgl. Gleichung Gl. 15) bei jedem Austausch des Elektrolyten um die entsprechenden Elektrolytkosten (vgl. Gleichung Gl. 17) erhöhen. In dieser Betrachtung werden jedoch zusätzliche Faktoren wie Entsorgungskosten für den Elektrolyten oder mögliche Erlöse aus dem Verkauf des degradierten Elektrolyten nicht berücksichtigt. Auch wird der Austausch anderer Komponenten der FB nach bestimmten Zyklen oder Nutzungszeiten nicht berücksichtigt.

$$N_{(FB)}(n) = K_{FB} + K_{Elektrolyt} \cdot \left\lfloor \frac{n}{n_{(HWDZ)}} \right\rfloor \quad \text{Gl. 28}$$

Die Nutzungsfunktion ($N_{(FB)}(n)$), die die Gesamtkosten der FB nach dem n -ten Zyklus beschreibt, berücksichtigt die Herstellungskosten der FB (K_{FB}) sowie die wiederkehrenden Kosten für den Elektrolyten ($K_{Elektrolyt}$). Diese werden jedes Mal berücksichtigt, wenn die Zyklenanzahl erreicht ist, nach der die Degradation 50% erreicht hat ($HWDZ$), und durch den abgerundeten Faktor $\left\lfloor \frac{n}{n_{(HWDZ)}} \right\rfloor$ abgebildet.

Ebenso ist mit der zyklenabhängigen Kapazität der FB $C_{(FB)}(n)$ zu verfahren, da diese nach jedem Elektrolytenaustausch wieder der Anfangskapazität $C_{FB}(0)$ entspricht (vgl. Gleichung Gl. 3).

$$C_{(FB)}(n) = C_{FB}(0) \cdot (1 - D)^n + C_{FB}(0) \cdot \lfloor \frac{n}{n_{(HWDZ)}} \rfloor \quad \text{Gl. 29}$$

Durch Ausklammern erhält man für $C_{(FB)}(n)$.

$$C_{(FB)}(n) = C_{FB}(0) \cdot ((1 - D)^n + \lfloor \frac{n}{n_{(HWDZ)}} \rfloor) \quad \text{Gl. 30}$$

Die kapazitätsmindernde Degradation der FB über ihre Nutzungsdauer, kombiniert mit der Nutzungsfunktion, ermöglicht es, die spezifischen Kapazitätsdichtekosten in [€ L Ah^{-1}] als zyklenabhängige Funktion $SK_{KapDichte}(n)$ darzustellen:

$$SK_{KapDichte}(n) = \frac{N_{(FB)}(n)}{C_{(FB)}(n)} \quad \text{Gl. 31}$$

4.3. Technoökonomische Modellierung

Auf Grundlage der im Labor erfassten Daten wurden die Bereiche Energie, Leistung, Steuerung und Verbindungen sowie die Herstellungskosten der FBn in das Modell integriert (vgl. **Abbildung 8**). Zunächst wurde ein Excel-basiertes Modell entwickelt, in dem jede Komponente zusammen mit den relevanten technischen und ökonomischen Eingangsgrößen abgebildet wurde. Um größere FBn, beispielsweise im mittleren bis industriellen Maßstab, zu modellieren, müsste das Modell ggf. um zusätzliche Komponenten und Bereiche erweitert werden (vgl. **Abbildung 9**).

Die Verbindung der technischen und ökonomischen Modellierung erfolgt durch die Eigenschaften der im Labor untersuchten FBn, welche die Abhängigkeiten zwischen den technischen Leistungsdaten und der Wirtschaftlichkeit abbilden. Diese Abhängigkeiten sind ebenfalls im Modell berücksichtigt.

So beeinflussen die effektive Zellspannung ($U_{Zelle\,eff}$), die mittlere Leistungsdichte ($\bar{P}$) und die Stromstärke des Zellstapels (I_{Stapel}) die Berechnung der benötigten Zellanzahl (N_{Zelle}) (siehe Gleichung Gl. 32). Diese Parameter fließen zudem in die Berechnung der CAPEX des Bereichs Leistung $K_{Leistung}$ ein (vgl. Gleichung Gl. 18).

$$N_{Cell} = \frac{\bar{P}}{I_{Stapel} \cdot U_{Zelle\,eff}} \quad \text{Gl. 32}$$

Zusätzlich wird das benötigte Elektrolytvolumen ($V_{Elektrolyt}$) aus der effektiven Zellspannung ($U_{Cell\,eff}$), der elektrischen Leistung des Elektrolyten ($W_{Elektrolyt}$), der Differenz zwischen dem niedrigsten und höchsten prozentualen Ladungszustand (SoC_{Range}) sowie der Ladungsdichte (ρ) berechnet. Letztere ergibt sich als Quotient der Faraday-Konstanten (F), der Ladungszahl (z), der Konzentration des Elektrolyts (c) und dem Umrechnungsfaktor 3600 von Sekunden auf Stunden (siehe Gleichung Gl. 33 und Gleichung Gl. 34). Das Elektrolytvolumen fließt in alle Summanden der

CAPEX-Berechnung des Bereichs Energie $K_{Energie}$ ein, da es sowohl das Tankvolumen als auch die Menge des Elektrolyten bestimmt (vgl. Gleichung Gl. 16).

$$V_{Elektrolyt} = \frac{W_{Elektrolyt}}{U_{Zelle\ eff} \cdot SoC_{Range} \cdot \rho} \quad \text{Gl. 33}$$

$$V_{Elektrolyt} = \frac{W_{Elektrolyte}}{U_{Zelle\ eff} \cdot SoC_{Range} \cdot \frac{F \cdot z \cdot c}{3600}} \quad \text{Gl. 34}$$

4.4. Überführung des Modells in eine Stand-Alone-Software (FLOTE)

Teile der Forschungsarbeit, die dieser Dissertation zugrunde liegen, fanden innerhalb des europäischen Forschungsprojekts SONAR (Modelling for the **S**earch **f**Or **N**ew **A**ctive materials for **R**edox flow batteries), finanziert durch die EU im Rahmen des Union's Horizon 2020 research and innovation programme unter dem Grant Agreement no. 875489, statt. Dort war es zusätzlich Aufgabe eine Stand-Alone-Software zu entwickeln.¹²⁷

Die Erstimplementierung dieses Modells erfolgte in Microsoft Excel, da es sich in der Konzeptionsphase als leicht zugängliches Werkzeug für strukturierte Berechnungen und manuelle Sensitivitätsanalysen eignete. In diesem Modell wurden alle Eingangsgrößen (vgl. Anhang D) manuell eingegeben, und die Optimierungsfragen wurden innerhalb festgelegter Grenzen in mehreren Zwischenschritten händisch bearbeitet. Auf diese Weise konnte eine hinreichende Auflösung der Graphen in den Sensitivitätsanalysen (vgl. Unterkapitel 7.2.1) erreicht werden.

Für die Berechnungen wurden zunächst zwischen 7 und 10 Zwischenmatrizen erstellt, die jeweils zwischen 70 und 150 Datenfelder zu den spezifischen Energieinhaltskosten enthalten. Auf Basis dieser Matrizen wurde dann die finale Matrix generiert, die wiederum zwischen 70 und 150 Datenfelder umfasste. Diese Matrizen bildeten die Grundlage für die Sensitivitätsanalysen, die im Unterkapitel 7.2.1.1 dargestellt sind.

Mit zunehmender Modelltiefe und wachsendem Datendurchsatz traten jedoch inhärente Grenzen tabellenbasierter Software zutage: mangelnde Automatisierungsmöglichkeiten, eingeschränkte Fehlerbehandlung, fehlende Versionierbarkeit, geringe Wiederverwendbarkeit sowie beschränkte Skalierbarkeit der Modelllogik.^{202–207}

Angeichts dieser Limitationen fiel die Entscheidung, das Excel-Modell in eine strukturierte, quelloffene Programmiersprache zu überführen, die sowohl eine umfassende Automatisierung als auch eine langfristig wartbare Softwarearchitektur erlaubt. Die Wahl fiel dabei begründet auf Python, das sich in den vergangenen Jahren zu einer führenden Programmiersprache in Wissenschaft, Datenanalyse und ingenieurwissenschaftlicher Modellierung entwickelt hat.

Im Wesentlichen sind zur Begründung der Auswahl sechs Punkte anzuführen:

1. Wissenschaftliche Etablierung und Community-Support^{208,209}
Python ist heute eine der am weitesten verbreitete Programmiersprache im Bereich der wissenschaftlichen Datenanalyse und technischen Simulation. Ihre

Popularität in wissenschaftlich-technischen Disziplinen beruht nicht nur auf ihrer offenen Lizenzstruktur und Plattformunabhängigkeit, sondern auch auf dem umfangreichen Ökosystem aus spezialisierter Softwarebibliotheken. Die Community-getriebene Weiterentwicklung sichert kontinuierliche Innovation und langfristige Wartbarkeit.

2. Automatisierung und Modularisierung^{209–213}

Python erlaubt durch seine strukturierte Syntax, objektorientierte Architektur und dynamische Datentypisierung eine saubere Trennung von Modullogik, Parametrisierung und Benutzeroberfläche. Damit kann das technoökonomische Modell als wiederverwendbares, anpassbares, modular aufgebautes Softwaresystem entwickelt werden, das leicht in verschiedene Forschungs- und Industrieszenarien integriert werden kann. Dies ermöglicht zukünftig insbesondere die Automatisierung komplexer Sensitivitätsanalysen sowie deren Integration in High-Throughput-Screeningprozesse.

3. Umfangreiche Bibliotheken für wissenschaftliches Rechnen^{214–219}

Python bietet unter anderem mit *NumPy*²¹⁴, *SciPy*²¹⁵, *pandas*^{216,217}, *matplotlib*²¹⁸ und *seaborn*²¹⁹ leistungsstarke Pakete für mathematische Modellierung, lineare Algebra, Optimierung und Datenvisualisierung. So können tabellarische Daten, wie sie zuvor in Excel gepflegt wurden, effizient verarbeitet und analysiert werden. Zusätzlich können numerische Optimierungen oder Parameteranpassung unterstützt werden. Damit werden manuelle Tabellenoperationen durch robuste, automatisierte und nachvollziehbare Rechenprozesse ersetzt.

4. Kompatibilität mit Excel und bestehender Infrastruktur^{220,221}

Ein weiterer Vorteil liegt in der Möglichkeit, vorhandene Excel-Strukturen über Bibliotheken wie *openpyxl*, *xlwings* oder *pandas.read_excel()* direkt in Python zu importieren. Damit können schrittweise Migrationen durchgeführt werden, ohne dass die ursprünglichen Datenformate vollständig aufgegeben werden muss. Gleichzeitig erlaubt *xlsxwriter* die Ausgabe strukturierter Ergebnisdateien im Excel-Format, so dass beide Modelle weiterhin zur Weiterentwicklung genutzt werden können.

5. Reproduzierbarkeit und Versionierbarkeit^{203,222}

Python-Projekte können über Versionskontrollsysteme wie Git dokumentiert und nachvollziehbar gespeichert werden, inklusive der verwendeten Bibliotheksversionen und Konfigurationsdateien. Dies ist in tabellenbasierten Umgebungen wie Excel kaum möglich und stellt einen zentralen methodischen Fortschritt dar.

6. Entwicklung grafischer Benutzeroberflächen und Stand-Alone-Software^{223–228}

Zusätzlich bietet Python mit Frameworks wie *tkinter*²²³, *PyQt*²²⁴, *streamlit*^{225–227} oder *Dash*²²⁸ verschiedene Werkzeuge zur Entwicklung grafischer Oberflächen, die es ermöglichen, komplexe Modelle benutzerfreundlich bedienbar zu machen.

Aus diesen Gründen wurde die python-basierte Stand-Alone-Software „FLOw Battery Techno-Economics (FLOTE)“ entwickelt.⁶⁵ Mit dieser Software können die für die Sensitivitätsanalysen erforderlichen Matrizen automatisiert erstellt werden. Die Anzahl der Datenfelder, die innerhalb der festgelegten Grenzen der Optimierungsfragen

(vgl. Unterkapitel 7.1.1) liegen, kann durch die Angabe der gewünschten Anzahl von Unterteilungsschritten für die Variablen flexibel angepasst werden. Das Produkt der Unterteilungsschritte der beiden Variablen ergibt dabei die Gesamtzahl der Datenfelder. Durch diese Automatisierung können Matrizen mit einer deutlich höheren Auflösung erzeugt werden, als dies mit vertretbarem Aufwand manuell möglich wäre. Die Matrizen, die mit dieser Software erstellt wurden, ermöglichten eine detailliertere Auswertung der Sensitivitätsanalysen, die im Unterkapitel 7.2.1.2 präsentiert wird.

4.5. Überblick über die Softwarearchitektur

In diesem Unterkapitel wird die verwendete Software FLOTE vorgestellt, die im Rahmen des SONAR Projekts entwickelt wurde, um Sensitivitätsanalysen durchzuführen. Die Software integriert alle im excelbasierten Modell entwickelten Parameter zur technoökonomischen Bewertung von Durchflussbatterien.

4.5.1. Sensitivitätsanalyse-Modul „MVF“

Das Modul MVF (Modell-Validierungs-Funktion) ist eine zentrale Komponente der Software FLOTE und ermöglicht die Durchführung von Sensitivitätsanalysen für verschiedene Redox-Flow-Batterie-Systeme. Dabei werden die Auswirkungen unterschiedlicher Eingangsparameter auf die Batterieleistung und die Kostenmodelle untersucht. Für die Vanadium-Redox-Flow-Batterien steht beispielsweise die Funktion `MVF_V_withMaskeddataDF_Proto` zur Verfügung, welche die Sensitivität der modellierten Systeme analysiert. Ähnliche Funktionen wurden für andere Batterietypen wie MV/TEMPOL und AQDS/BQDS entwickelt, um vergleichbare Analysen durchzuführen.

Die Sensitivitätsanalyse basiert auf zwei unabhängigen Variablen, beispielsweise Konzentration und Stromdichte, deren Wertebereiche und Skalierungen individuell definiert werden können. Hierbei lassen sich sowohl lineare als auch exponentielle Skalen für die Parameter wählen. Aus den gegebenen Eingaben generiert das Programm automatisiert Wertearrays, welche systematisch durchlaufen werden, um für jede Parameterkombination einen Sensitivitätswert zu berechnen. Diese Berechnung erfolgt mithilfe der Funktion SVF, welche ein Kostenmodell implementiert. Um die Aussagekraft der Analyse zu gewährleisten, werden bestimmte Bedingungen, wie negative Werte für kritische Parameter, automatisch erkannt und die entsprechenden Sensitivitätswerte als ungültig markiert. Die Ergebnisse werden in Form von Konturdiagrammen visualisiert und als Excel-Tabellen gespeichert, um eine weitere Auswertung zu ermöglichen.

4.5.2. Array-Generierungsmodul „Arrays“

Zur Unterstützung der Sensitivitätsanalysen stellt das Modul „Arrays“ eine Funktion bereit, die Wertearrays basierend auf vorgegebenen Parametern generiert. Die Funktion `arraygen` nimmt dabei minimale und maximale Werte sowie die Anzahl der gewünschten Schritte entgegen. Zudem kann ausgewählt werden, ob die Verteilung der Werte linear oder exponentiell erfolgen soll. Dies ermöglicht eine flexible Anpassung der Analyse an verschiedene Größenordnungen und Einflussfaktoren, was für die genaue Untersuchung der Batterieparameter essenziell ist. Das Ergebnis ist ein Array mit den definierten Werten, das in den weiteren Berechnungsschritten verwendet wird.

4.5.3. Kostenberechnungsmodul „datafile“

Im Zentrum der Kostenanalyse steht die Funktion SVF, die auf Basis zahlreicher Eingangsparameter die Kosten pro Energiekapazität einer Redox-Flow-Batterie berechnet. Diese Funktion berücksichtigt Materialkosten der verschiedenen Batteriebestandteile, Fertigungskosten sowie physikalisch-chemische Eigenschaften, die Einfluss auf die Batterieperformance und den Herstellungsaufwand haben. Dabei fließen unter anderem Kosten für Posolyte und Negolyte, Tanks, Stromsammler, Isolierplatten und weitere Komponenten in die Berechnung ein. Die SVF-Funktion ist so strukturiert, dass sie die Energiekosten und Leistungskosten separat berechnet, bevor diese zu den Gesamtkosten zusammengeführt werden. Im Anschluss erfolgt die Division durch die Energiekapazität, um die Kosten je gespeicherter Energieeinheit in Euro pro Wattstunde anzugeben.

Die zugrundeliegenden Daten basieren auf umfangreichen Laboruntersuchungen, bei denen für unterschiedliche Redox-Flow-Batterie-Systeme, wie Vanadium, MV/TEMPOL oder AQDS/BQDS, standardisierte und gemittelte Eingangsgrößen ermittelt wurden. Diese Datenbasis ermöglicht eine realitätsnahe und flexible Simulation verschiedenster Batteriekonzepte.

4.5.4. Visualisierungsmodul „sensitivity_plot“

Für die anschauliche Darstellung der Ergebnisse aus den Sensitivitätsanalysen wurde das Visualisierungsmodul sensitivity_plot implementiert. Dieses Modul erstellt aus den berechneten Daten Konturdiagramme oder Heatmaps, die die Zusammenhänge zwischen den untersuchten Parametern und den Sensitivitätswerten verdeutlichen. Dabei können sowohl die x- und y-Achsen als auch die Farbskala linear oder exponentiell skaliert werden, um den jeweiligen Datencharakter optimal abzubilden. Die Visualisierungen unterstützen eine intuitive Interpretation der Ergebnisse und bilden eine wichtige Grundlage für weiterführende Analysen und Entscheidungen im Rahmen der Materialentwicklung und Batteriekonzeption.

5. Durchführung der Experimente zur Bestimmung der Datenbasis für die Modellierung

Im Rahmen umfangreicher Tests wurden an verschiedenen FB-Typen galvanostatische Lade-Entlade-Zyklen durchgeführt. Vor Beginn der Messungen wurde ein Prüfplan erstellt, der die Abfolge der durchlaufenen Schritte (Laden, Entladen, Pause) sowie die Messparameter wie Stromstärke, Grenzspannung, Pausenzeit, Zyklenzahl und Sicherheitsabbruchkriterien festlegte. Dadurch konnten lange Zelltests automatisiert über Nacht durchgeführt werden.

Alle Messungen erfolgten unter Laborbedingungen bei einer Raumtemperatur von ca. 293 K und einem Luftdruck von ca. 100 kPa. Durch das kontinuierliche Spülen mit Stickstoff oder Argon als Inertgas wurde der Luftsauerstoff aus der Lösung verdrängt. Um eine Wasserelektrolyse im Elektrolyten zu verhindern, wurde die Zellspannung stets innerhalb der definierten Grenzspannungen gehalten. Für die V FBn lag dieser Bereich zwischen 0,8 V und 1,65 V, für die MV/TEMPOL FBn zwischen 0,5 V und 1,65 V, und für die AQDS/BQDS FBn zwischen 0,15 V und 0,8 V.

Gemäß dem galvanostatischen Verfahren²²⁹ wurde die Stromstärke während des Lade- und Entladevorgangs konstant gehalten. Die Klemmspannung der entsprechenden Zelle wurde dabei jede Sekunde aufgezeichnet. Auf dieser Grundlage wurden die Energie-, Spannungs- und Coulombeffizienz sowie die Leistungs- und Energiedichte der verschiedenen FB-Typen ermittelt. Diese Parameter flossen in das technoökonomische Modell ein und bildeten die Grundlage für die anschließenden Simulationen und Vergleiche.

Sowohl die Lade- als auch die Entladezyklen eignen sich zur Bestimmung dieser Effizienzkennzahlen (vgl. Gleichungen Gl. 12, Gl. 13 und Gl. 14). Da die Bereitstellung der Energie durch die Batterie in dieser Arbeit als zentrale Eigenschaft betrachtet wird, wurden die Daten der Entladezyklen für die Berechnungen herangezogen.

Die in den O FBn verwendeten Elektrolyte (MV, TEMPOL, AQDS und BQDS) wurden selbst hergestellt, während der Elektrolyt der V FBn industriell produziert wurde. Die Zusammensetzung der Elektrolyte ist in **Tabelle 5** aufgeführt.

Tabelle 5. Elektrolytenzusammensetzung der untersuchten Durchflussbatterien

Durchfluss-batterie	Komponente	Substanz	Konzentration [mol L ⁻¹]	Molekulargewicht [g mol ⁻¹]	Standardpotenzial E ⁰ [V]
Vanadium/Vanadium	0,3 M	Posolyt			1
		Aktive Spezies _{Posolyt}	Vanadium(III)-sulfat (53,3%)	0,3	50,942
		Lösungsmittel _{Posolyt}	Vanadylsulfat (46,7%)		
		Additiv _{Posolyt}	Schwefelsäure	0,68	98,079
			Phosphorsäure	0,01	97,994
	1,67 M	Negolyt			-0,25
		Aktive Spezies _{Negolyt}	Vanadium(III)-sulfat (53,3%)	0,3	50,942
		Lösungsmittel _{Negolyt}	Vanadylsulfat (46,7%)		
		Additiv _{Negolyt}	Schwefelsäure	0,68	98,079
			Phosphorsäure	0,01	97,994
MV/TEMPOL	0,1 M	Posolyt			0,8
		Aktive Spezies _{Posolyt}	4-Hydroxy-2,2,6,6-tetramethylpiperidinyloxyl	0,1	172,24
		Additiv _{Posolyt}	Natriumchlorid	1,5	58,44
		Negolyt			-0,45
		Aktive Spezies _{Negolyt}	1,1'-Dimethyl-4,4'-bipyridinium-dichlorid Hydrat	0,1	257,16
		Additiv _{Negolyt}	Natriumchlorid	1,5	58,44
	0,3 M	Posolyt			0,8
		Aktive Spezies _{Posolyt}	4-Hydroxy-2,2,6,6-tetramethylpiperidinyloxyl	0,3	172,24
		Additiv _{Posolyt}	Natriumchlorid	1,5	58,44
		Negolyt			-0,45
		Aktive Spezies _{Negolyt}	1,1'-Dimethyl-4,4'-bipyridinium-dichlorid Hydrat	0,3	257,16
		Additiv _{Negolyt}	Natriumchlorid	1,5	58,44
	0,5 M	Posolyt			0,8
		Aktive Spezies _{Posolyt}	4-Hydroxy-2,2,6,6-tetramethylpiperidinyloxyl	0,5	172,24
		Additiv _{Posolyt}	Natriumchlorid	1,5	58,44
		Negolyt			-0,45
		Aktive Spezies _{Negolyt}	1,1'-Dimethyl-4,4'-bipyridinium-dichlorid Hydrat	0,5	257,16
		Additiv _{Negolyt}	Natriumchlorid	1,5	58,44

Durchfluss-batterie	Komponente	Substanz	Konzentration [mol L ⁻¹]	Molekulargewicht [g mol ⁻¹]	Standardpotenzial E ₀ [V]
AQDS/BQDS	0,1 M	Posolyt			0,85
		Aktive Spezies _{Posolyt}	1,2-Dihydroxybenzol-3,5-Disulfonsäure-Dinatriumsalz-Monohydrat	0,1	332,23
		Lösungsmittel _{Posolyt}	Schwefelsäure	1	98,079
		Negolyt			0,09
		Aktive Spezies _{Negolyt}	Anthrachinon-2,7-disulfonsäure	0,1	412,30
		Lösungsmittel _{Negolyt}	Schwefelsäure	1	98,079
	0,2 M	Posolyt			0,85
		Aktive Spezies _{Posolyt}	1,2-Dihydroxybenzol-3,5-Disulfonsäure-Dinatriumsalz-Monohydrat	0,2	332,23
		Lösungsmittel _{Posolyt}	Schwefelsäure	1	98,079
		Negolyt			0,09
		Aktive Spezies _{Negolyt}	Anthrachinon-2,7-disulfonsäure	0,2	412,30
		Lösungsmittel _{Negolyt}	Schwefelsäure	1	98,079
	0,3 M	Posolyt			0,85
		Aktive Spezies _{Posolyt}	1,2-Dihydroxybenzol-3,5-Disulfonsäure-Dinatriumsalz-Monohydrat	0,3	332,23
		Lösungsmittel _{Posolyt}	Schwefelsäure	1	98,079
		Negolyt			0,09
		Aktive Spezies _{Negolyt}	Anthrachinon-2,7-disulfonsäure	0,3	412,30
		Lösungsmittel _{Negolyt}	Schwefelsäure	1	98,079

5.1. Ablauf eines 5x5-Zyklen Tests

Im Rahmen eines 5x5-Zyklen Tests wurde die FB fünfmal hintereinander bei konstanter Stromdichte zwischen definierten Spannungsabschaltungen geladen und entladen. Nach jedem Ladevorgang folgte eine Pause von bestimmter Dauer, bevor das Entladen begann. Ebenso wurde nach dem Entladen eine Pause eingelegt, bevor der nächste Zyklus gestartet wurde.

Dieser Ablauf wurde für jede Stromdichte fünfmal wiederholt, wodurch insgesamt fünf vollständige Zyklen pro Stromdichte durchgeführt wurden. Anschließend wurde die Stromdichte erhöht und der Testprozess für diese neue Stromdichte erneut fünfmal wiederholt. Insgesamt beinhalteten die 5x5 Zyklen fünf verschiedene Stromdichten, bei denen jeweils fünf Zyklen durchgeführt wurden, was zu insgesamt 25 Zyklen führte.

5.2. Ablauf der Degradationstests

Im Rahmen der Degradationstests wurde das Batteriesystem mehrfach bei konstanter Stromdichte zwischen definierten Spannungsabschaltungen geladen und entladen. Nach jedem Ladevorgang folgte eine Pause von bestimmter Dauer, bevor das Entladen begann. Ebenso wurde nach dem Entladen eine Pause eingelegt, bevor der nächste Ladezyklus gestartet wurde.

Es wurde eine Gesamtzahl von mehr als 50 Zyklen durchgeführt, um erste Hinweise auf die Langzeitstabilität der Zelleistung zu erhalten und gleichzeitig Daten zur Alterung der Elektrolyte zu sammeln.

6. Ergebnisse

6.1. Technische Leistungsdaten der im Labor getesteten organischen und anorganischen Durchflussbatterien

Auf Basis der 5x5-Zyklen Tests wurden die erforderlichen technischen Leistungsparameter der einzelnen FB-Typen für die Abbildung im Modell ermittelt. Dabei wurden unter anderem die Leistungs- und Energiedichte der getesteten FBn bestimmt. Zusätzlich wurden die Coulomb-, Spannungs- und Energieeffizienzen für jede FB berechnet (vgl. Gleichungen Gl. 12, Gl. 13 und Gl. 14). Diese Kenngrößen ermöglichten einen Vergleich der einzelnen FB-Typen und eine detaillierte Diskussion ihrer Eigenschaften.

6.1.1. 1,67 M Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien

Die für die V FBn verwendeten Stromdichten umfassten 25; 37,5; 50; 62,5 und 75 mA cm⁻², wobei die Spannungsgrenzwerte bei 0,5 V (Entladung) und 1,65 V (Ladung) lagen.

Die Ergebnisse für die 1,67 M V FBn wurden in Abhängigkeit von der Stromdichte aufgetragen und sind in **Tabelle 6** aufgeführt. Die Leistungs- und Energiedichte sind in **Abbildung 12** dargestellt. Die Spannungseffizienz ist in **Abbildung 13**, die Coulombeffizienz in **Abbildung 14** und die Energieeffizienz in **Abbildung 15** veranschaulicht.

Tabelle 6. Mittelwerte und Standardabweichungen der Leistungsdichte, Energiedichte, Spannungseffizienz, Coulombeffizienz und Energieeffizienz von 1,67 M V FBn bei unterschiedlichen Stromdichten.

V FBn 1,67 M					
Stromdichte [mA cm ⁻²]	Leistungs- dichte [mW cm ⁻²]	Energie- dichte [Wh L ⁻¹]	Spannungs- effizienz [%]	Coulomb- effizienz [%]	Energie- effizienz [%]
25	32,8 ± 0,28	21,85 ± 3,29	88,89 ± 1,18	97,60 ± 1,28	86,77 ± 1,87
37,5	47,28 ± 0,53	19,15 ± 2,92	83,34 ± 1,55	98,58 ± 0,14	82,15 ± 1,58
50	60,95 ± 2,95	16,21 ± 2,64	78,02 ± 1,78	98,91 ± 1,78	77,17 ± 1,77
62,5	71,52 ± 1,19	12,80 ± 2,54	72,70 ± 1,77	99,02 ± 0,23	71,99 ± 1,81
75	81,34 ± 1,93	9,09 ± 2,58	67,87 ± 2,17	99,01 ± 0,42	67,20 ± 2,22

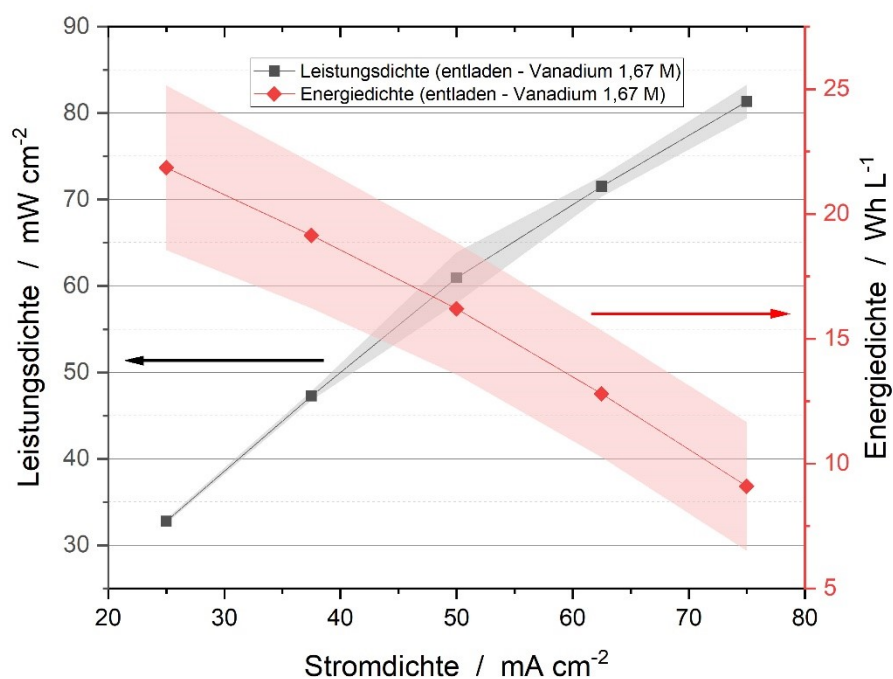


Abbildung 12. Mittelwert und Standardabweichung von Leistungs- und Energiedichten der getesteten standardisierten V FBn (1,67 M) basierend auf den Entladezyklen.

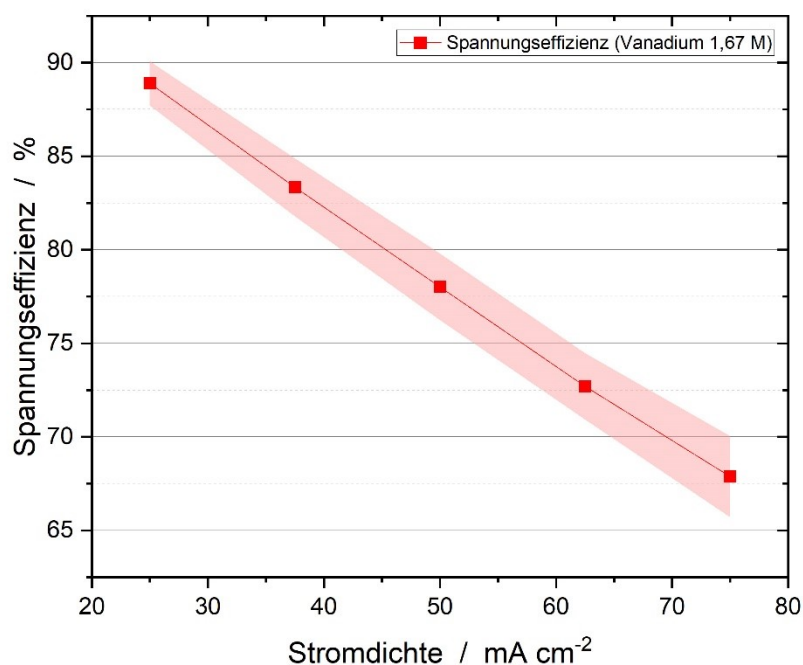


Abbildung 13. Mittelwert und Standardabweichung der Spannungseffizienzen der getesteten standardisierten V FBn (1,67 M) basierend auf den Entladezyklen.

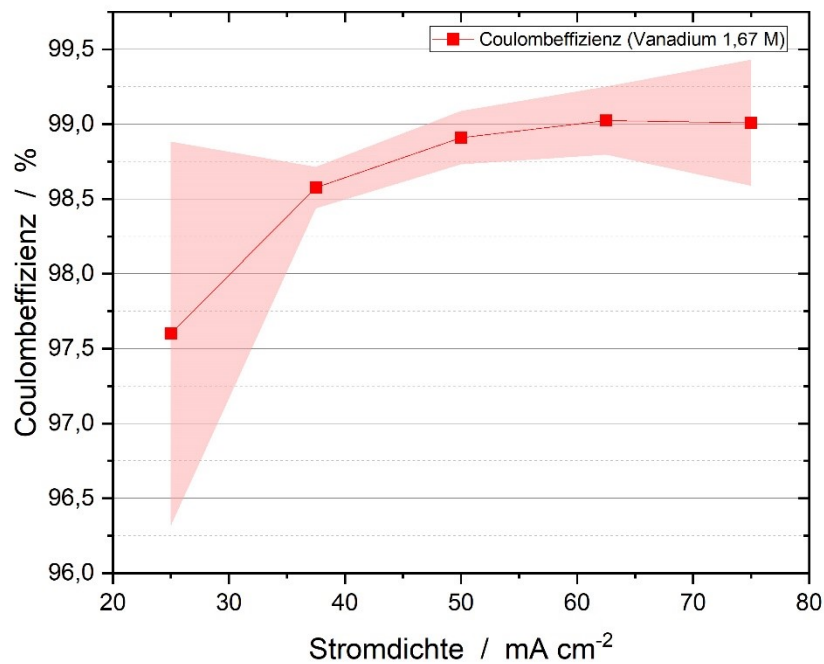


Abbildung 14. Mittelwert und Standardabweichung der Coulombeffizienzen der getesteten standardisierten V FBn (1,67 M) basierend auf den Entladezyklen.

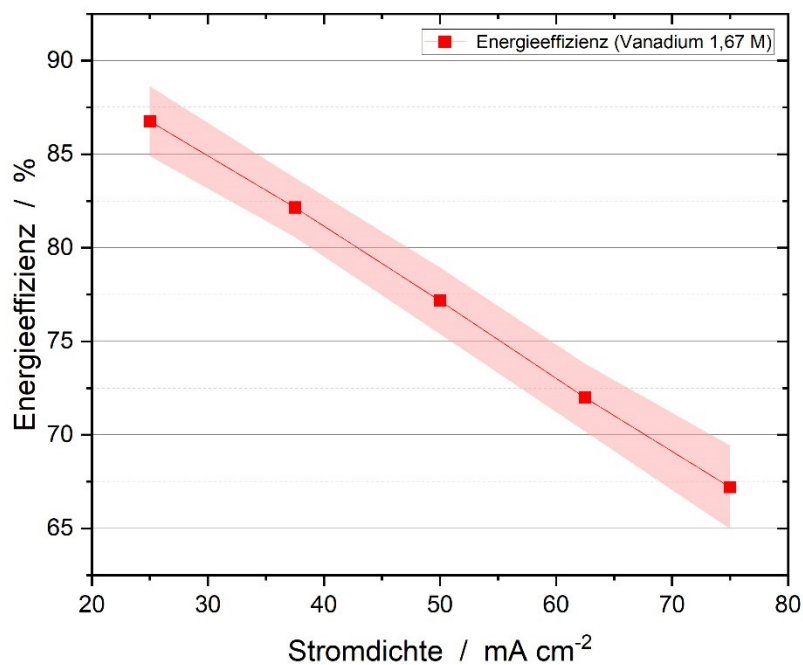


Abbildung 15. Mittelwert und Standardabweichung der Energieeffizienz der getesteten standardisierten V FBn (1,67 M) basierend auf den Entladezyklen.

Wie in **Abbildung 12** dargestellt, wiesen die V FBn bei Stromdichten zwischen 25; 37,5; 50; 62,5 und 75 mA cm⁻² Leistungsdichten im Mittel zwischen 32,8 mW cm⁻² und 81,34 mW cm⁻² auf. Der typische Verlauf einer nahezu linear ansteigenden Kurve ist darauf zurückzuführen, dass der Spannungsbereich, in dem die FBn während der jeweiligen Zyklen betrieben werden, konstant bleibt. Da die Leistungsdichte als Zeitintegral der Spannung über der Stromdichte berechnet wird, ist sie bei konstantem Spannungsbereich ohne signifikante Widerstandseinflüsse direkt proportional zur Stromdichte. Das beobachtete Verhalten der V FBn ist daher erwartungsgemäß und deutet darauf hin, dass im untersuchten Stromdichtebereich keine signifikanten Änderungen des inneren Widerstands auftreten.

Die Energiedichte sinkt bei steigender Stromdichte ab. Innerhalb des gleichen Stromdichtebereichs fällt die Energiedichte im Mittel von 21,85 Wh L⁻¹ auf 9,09 Wh L⁻¹. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die maßgebliche Grenzspannung, die das Ende des jeweiligen Zyklus markiert, bei höheren Stromdichten schneller erreicht wird. Dadurch steht dem System weniger Zeit zur Verfügung, um die an den Elektroden in Form von Elektronen bereitgestellte Energie in die aktiven Spezies des Elektrolyten zu übertragen.

Die Spannungseffizienz nimmt mit steigender Stromdichte ab. Im untersuchten Stromdichtebereich sank die Spannungseffizienz im Mittel von 88,89% auf 67,87% (vgl. **Abbildung 13**). Dies lässt sich zum einen durch den Anstieg der Ladespannung und den Abfall der Entladespannung bei höheren Stromdichten erklären. Zum anderen werden die Lade- und Entladezeiten bei höheren Stromdichten kürzer, da die Grenzspannungen schneller erreicht werden. Die Spannungseffizienz gibt Hinweise auf Ohmschen Verlust und Diffusions- und Polarisationsverluste während der Zyklen, da sie das Verhältnis zwischen der mittleren Entladespannung und der mittleren Ladespannung bei konstanter Stromdichte widerspiegelt. Da die Lade- und Entladezyklen bei konstanter Stromstärke durchgeführt wurden, ergibt sich gemäß Ohmschem Gesetz²³⁰ die Änderung der Spannung nur durch eine Änderung des inneren Widerstands, der wiederum durch die genannten Verluste bestimmt wird.

Die Coulombeffizienz stellt das Verhältnis der beim Entladen zurückgewonnenen elektrischen Ladung zur beim Laden zugeführten elektrischen Ladung dar. Mit steigender Stromdichte stieg die Coulombeffizienz der V FBn von im Mittel 97,60% auf 99,01% (vgl. **Abbildung 14**), wobei sie nahezu konstant blieb und stets auf einem sehr hohen Niveau von über 95% lag. Dies deutet darauf hin, dass während der Zyklen ausreichend Zeit für die Übertragung der elektrischen Ladung zur Verfügung stand, ohne dass zu viel Zeit für ungewollte Gleichgewichtsreaktionen, die insbesondere durch Diffusion verursacht werden und die Coulombeffizienz verringern, vorhanden war.

Als Produkt der Spannungs- und Coulombeffizienzen ist die Energieeffizienz direkt von diesen beiden Größen und ihrem Verhalten im untersuchten Stromdichtebereich abhängig. Bei den V FBn fiel die Energieeffizienz im Mittel von 86,77% auf 67,20% mit steigender Stromdichte (vgl. **Abbildung 15**). Das Verhalten der Energieeffizienz folgte fast identisch der Spannungseffizienz. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Coulombeffizienz auf einem hohen Niveau von über 95% lag, also annähernd 1, was impliziert, dass die Energieeffizienz nahezu der Spannungseffizienz entspricht.

6.1.2. 0,5 M und 0,1 M MV/TEMPOL Durchflussbatterien

Bei den MV/TEMPOL FBn wurde zu Beginn ein ungewöhnliches Verhalten beobachtet: Die direkte Durchführung galvanostatischer Zyklen war nicht möglich, da die anfänglichen ohmschen Widerstände des Systems sehr hoch waren und in der Größenordnung von etwa $1\ \Omega$ lagen. Solche hohen ohmschen Widerstände hätten mit einer Klemmenspannung von über 1,7 V sofort die Bedingung für die Beendigung des Zyklus erfüllt, was zu einer einzigen Spannungsspitze und somit zu keinem vollständigen Zyklus geführt hätte. Es wurde jedoch festgestellt, dass der ohmsche Widerstand des MV/TEMPOL-Systems, nachdem es über einen längeren Zeitraum einer sehr geringen Stromdichte von $0,25\ \text{mA cm}^{-2}$ ausgesetzt wurde, deutlich abnahm und mit dem Widerstand der V FBn vergleichbar wurde. Dieser Ladevorgang mit niedriger Stromdichte konnte als Aktivierungszyklus interpretiert werden, da er vor jedem Experiment notwendig war, um den Elektrolyten zu aktivieren. Solche initialen Zyklen mit niedriger Stromdichte sind auch bei anderen Batteriesystemen erforderlich, wie etwa bei Lithium-Ionen-Batterien, bei denen zu Beginn ein Formationszyklus notwendig ist, um eine stabile Festkörperelektrolytinterphase (englisch: Solid Electrolyte Interphase (SEI)) zu bilden.²³¹ Obwohl sich FBn grundlegend von Lithium-Ionen-Batterien unterscheiden und die genaue Ursache für die Notwendigkeit eines solchen Anfangszyklus unbekannt ist, könnte dieser auf die Bildung einer stabilisierenden Schicht über den Elektroden während des Aktivierungszyklus zurückzuführen sein. Aus diesem Grund wurden alle MV/TEMPOL FBn einem ersten Aktivierungszyklus unterzogen, nach dem ihre ohmschen Widerstände im brauchbaren Bereich lagen. Anschließend wurden galvanostatische Zyklen mit Stromdichten von 1,25; 2,5; 6,25; 12,5; 25 und $37,5\ \text{mA cm}^{-2}$ durchgeführt. Die gleichen Spannungsabschaltungen wie bei den V FBn wurden für die galvanostatischen Zyklen verwendet.

Untersucht wurden MV/TEMPOL FBn mit zwei unterschiedlichen Molaritäten (0,5 M und 0,1 M) (siehe **Tabelle 7**), deren Leistungs- und Energiedichten in **Abbildung 16** dargestellt sind. Die Spannungseffizienz (**Abbildung 17**), die Coulombeffizienz (**Abbildung 18**) und die daraus abgeleitete Energieeffizienz (**Abbildung 19**) sind ebenfalls über die Stromdichte aufgetragen.

Tabelle 7. Mittelwerte und Standardabweichungen der Leistungsdichte, Energiedichte, Spannungseffizienz, Coulombeffizienz und Energieeffizienz von 0,5 M MV/TEMPOL FBn und 0,1 M MV/TEMPOL FBn bei unterschiedlichen Stromdichten.

MV/TEMPOL FBn 0,5 M					
Stromdichte [mA cm ⁻²]	Leistungs- dichte [mW cm ⁻²]	Energie- dichte [Wh L ⁻¹]	Spannungs- effizienz [%]	Coulomb- effizienz [%]	Energie- effizienz [%]
2,5	2,81 ± 0,01	4,78 ± 0,58	94,79 ± 1,15	73,73 ± 4,29	69,92 ± 4,74
6,25	7,02 ± 0,01	3,63 ± 0,17	94,05 ± 0,07	90,49 ± 2,20	85,11 ± 2,02
12,5	13,62 ± 0,01	3,18 ± 0,07	89,05 ± 0,11	95,59 ± 0,46	85,12 ± 0,46
25	24,35 ± 0,14	2,06 ± 0,24	75,64 ± 1,11	97,79 ± 0,49	73,97 ± 1,05

MV/TEMPOL FBn 0,1 M					
Stromdichte [mA cm ⁻²]	Leistungs- dichte [mW cm ⁻²]	Energie- dichte [Wh L ⁻¹]	Spannungs- effizienz [%]	Coulomb- effizienz [%]	Energie- effizienz [%]
1,25	1,44 ± 0,04	1,86 ± 0,45	95,45 ± 2,28	66,93 ± 3,53	63,82 ± 2,08
2,5	2,86 ± 0,07	1,18 ± 0,07	94,31 ± 1,95	87,08 ± 8,33	82,26 ± 9,40
6,25	9,11 ± 0,01	1,04 ± 0,01	91,61 ± 0,10	97,34 ± 0,38	89,18 ± 0,36
12,5	13,84 ± 0,28	0,95 ± 0,02	86,01 ± 1,96	91,38 ± 7,88	78,46 ± 5,12
25	25,43 ± 1,09	0,80 ± 0,02	73,89 ± 4,06	92,66 ± 6,14	68,24 ± 0,95
37,5	34,50 ± 2,51	0,65 ± 0,04	62,96 ± 6,14	92,55 ± 6,29	57,93 ± 1,85

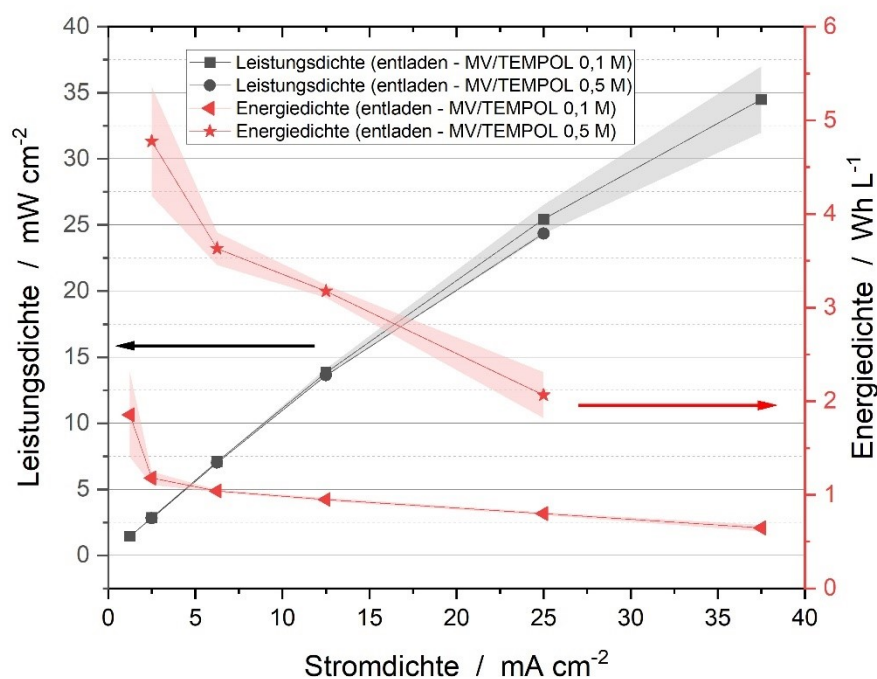


Abbildung 16. Mittelwert und Standardabweichung von Leistungs- und Energiedichten der getesteten standardisierten MV/TEMPOL FBn (0,1 M und 0,5 M) basierend auf den Entladezyklen.

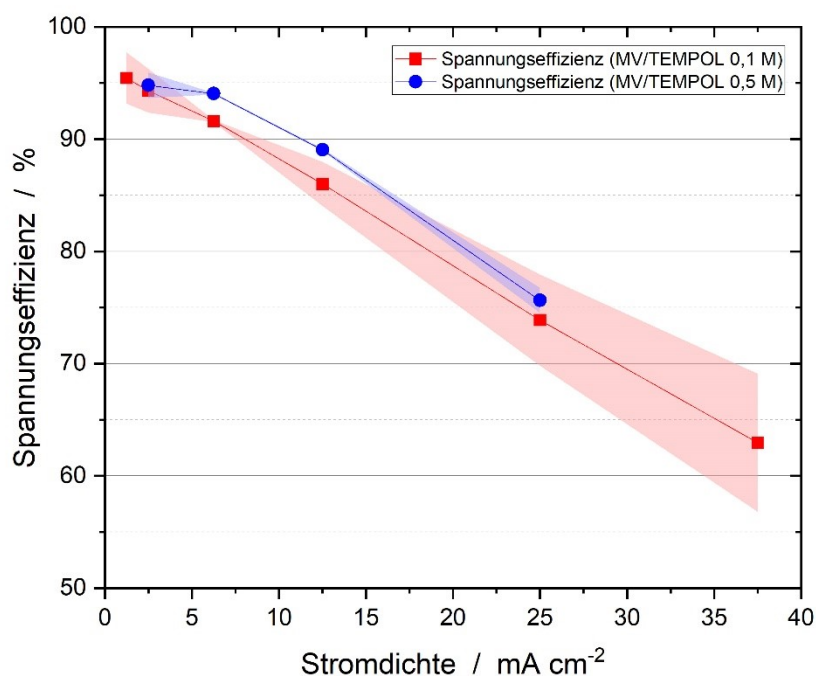


Abbildung 17. Mittelwert und Standardabweichung der Spannungseffizienzen der getesteten standardisierten MV/TEMPOL FBn (0,1 M und 0,5 M) basierend auf den Entladezyklen.

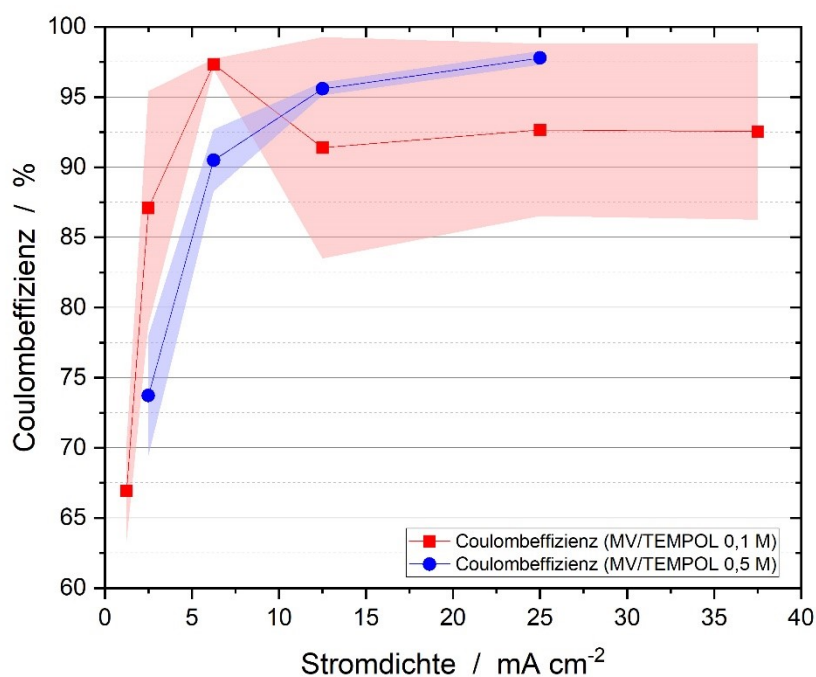


Abbildung 18. Mittelwert und Standardabweichung der Coulombeffizienzen der getesteten standardisierten MV/TEMPOL FBn (0,1 M und 0,5 M) basierend auf den Entladezyklen.

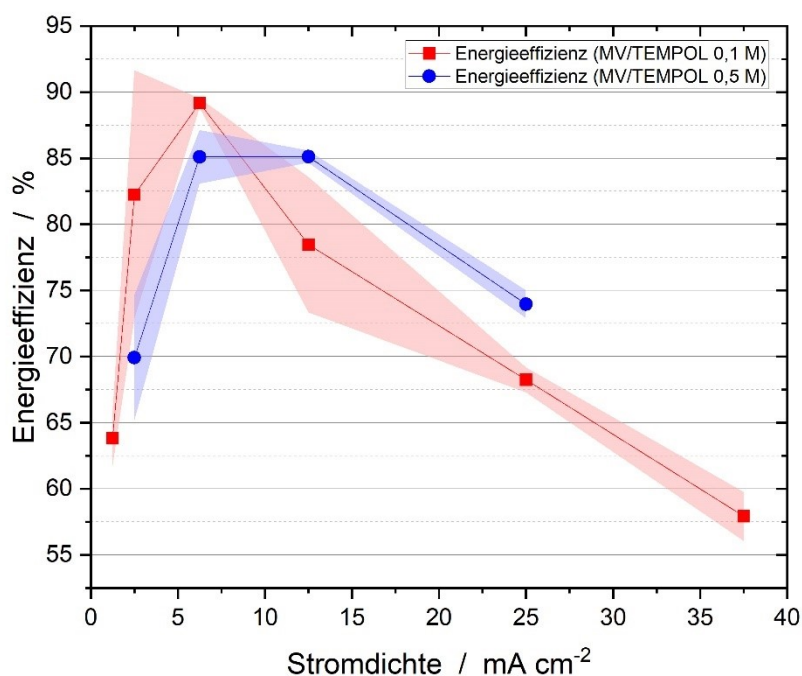


Abbildung 19. Mittelwert und Standardabweichung der Energieeffizienzen der getesteten standardisierten MV/TEMPOL FBn (0,1 M und 0,5 M) basierend auf den Entladezyklen.

Nicht alle untersuchten MV/TEMPOL FBn wurden über sämtliche oben genannten Stromdichten getestet. Durchflussbatterien mit höherer Konzentration der aktiven Spezies (*Konzentration_{aktive Spezies}*) hatten bei höheren Stromdichten instabiles Verhalten, was auf unerwünschte Nebenreaktionen hindeutet. Daher wurden für diese Durchflussbatterien keine Tests oberhalb von 25 mA cm^{-2} durchgeführt. Diese wurden mit den Stromdichten zwischen $2,5 \text{ mA cm}^{-2}$ und 25 mA cm^{-2} , die Durchflussbatterien niedrigerer *Konzentration_{aktive Spezies}* zwischen $1,25 \text{ mA cm}^{-2}$ und $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$ berücksichtigt. Die erhobenen Daten (siehe **Tabelle 7**) stammen aus den 5x5-Zyklus-Tests mehrerer FBn. Die Leistungs- und Energiedichten sind in **Abbildung 16** dargestellt.

Auch bei den 0,5 M und 0,1 M MV/TEMPOL FBn bestätigt sich das bekannte Verhalten, dass mit steigenden Stromdichten die Leistungsdichte zunimmt. Die 0,5 M MV/TEMPOL FBn erzielten im Mittel Leistungsdichten zwischen $2,81 \text{ mW cm}^{-2}$ und $24,35 \text{ mW cm}^{-2}$, während die 0,1 M MV/TEMPOL FBn Werte zwischen $1,44 \text{ mW cm}^{-2}$ und $34,5 \text{ mW cm}^{-2}$ erreichten. Bei den identischen Stromdichten von $2,5 \text{ mW cm}^{-2}$, $6,25 \text{ mW cm}^{-2}$, $12,5 \text{ mW cm}^{-2}$ und 25 mW cm^{-2} sind die mittleren Leistungsdichten der 0,1 M MV/TEMPOL FBn durchgehend etwas höher als die der 0,5 M MV/TEMPOL FBn bei derselben Stromdichte. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die höhere *Konzentration_{aktive Spezies}* den inneren Widerstand leicht erhöht, was die Leistungsdichte negativ beeinflusst. Mit weiter steigender Stromdichte ist mit einem weiteren Anstieg der Leistungsdichte zu rechnen, da mehr elektrische Leistung pro Flächeneinheit umgesetzt wird. Ab einem kritischen Punkt jedoch führen zunehmende ohmsche Verluste, Aktivierungsüberspannungen und insbesondere Konzentrationspolarisationen zu einem Spannungsabfall, wodurch die Leistungsdichte ein Maximum erreicht und bei weiterer Stromsteigerung wieder absinkt.^{118,232} Dieser Effekt begrenzt den effektiven Betriebsbereich von Durchflussbatterien deutlich unterhalb der maximal möglichen Stromdichte und ist für Durchflussbatterien mit verschiedensten Elektrolytenpaaren dokumentiert.²³³ Zusätzlich kann eine zu hohe Stromdichte verstärkte Nebenreaktionen, Gasentwicklung und thermische Belastungen hervorrufen, was sich negativ auf Effizienz und Lebensdauer des Systems auswirkt.²⁰¹

Die Energiedichten nehmen mit steigender Stromdichte ab. Bei den 0,1 M MV/TEMPOL FBn sind aufgrund der niedrigeren *Konzentration_{aktive Spezies}* die Energiedichten durchweg niedriger als bei den 0,5 M MV/TEMPOL FBn. Die 0,1 M MV/TEMPOL FBn erzielten mittlere Energiedichten zwischen $1,86 \text{ Wh L}^{-1}$ und $0,65 \text{ Wh L}^{-1}$, während die 0,5 M MV/TEMPOL FBn Werte zwischen $4,78 \text{ Wh L}^{-1}$ und $2,06 \text{ Wh L}^{-1}$ erreichten. Im Vergleich der Energiedichten bei gleichen Stromdichten wird deutlich, dass die 0,1 M MV/TEMPOL FBn zwischen $2,5 \text{ mA cm}^{-2}$ und 25 mA cm^{-2} aufsteigend zwischen 24,69%, 28,65%, 29,87% und 38,83% der Energiedichte der 0,5 M MV/TEMPOL FBn erreichen. Dieser Unterschied lässt sich nicht allein durch den Konzentrationsunterschied von 20% erklären. Der höhere innere Widerstand der 0,5 M MV/TEMPOL FBn hat ebenfalls einen negativen Einfluss auf die Energiedichte, wobei dieser Effekt bei höheren Stromdichten stärker ausgeprägt ist, was sich in der prozentualen Energiedichte widerspiegelt.

Die Spannungseffizienz der untersuchten MV/TEMPOL FBn nimmt mit steigender Stromdichte ab (siehe **Abbildung 17**). Die 0,5 M MV/TEMPOL FBn wiesen zwischen $2,5 \text{ mA cm}^{-2}$ und 25 mA cm^{-2} Spannungseffizienzen von 94,79% bis 75,64% auf, während die 0,1 M MV/TEMPOL FBn bei Stromdichten von $1,25 \text{ mA cm}^{-2}$ und $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$ Spannungseffizienzen zwischen 95,45% und 62,96% erreichten. Diese

Werte liegen bei identischen Stromdichten in ähnlichen Bereichen, sind jedoch im Vergleich zu den V FBn um 15% bis 20% niedriger.

Die Coulombeffizienzen der MV/TEMPOL FBn steigen zunächst mit zunehmender Stromdichte an, nehmen jedoch bei mittleren Stromdichten wieder ab (siehe **Abbildung 18**). Für die 0,5 M MV/TEMPOL FBn wurden mittlere Werte zwischen 73,73% und 97,79%, für die 0,1 M MV/TEMPOL FBn Werte zwischen 66,93% und 92,55% ermittelt. Das Verhalten bei niedrigen Stromdichten ist darauf zurückzuführen, dass der Einfluss der Diffusion in diesem Bereich stärker ausgeprägt ist, was die Coulombeffizienz verringert. Die Lade- und Entladezeiten sind so lang, dass vermehrt Gleichgewichtsreaktionen durch Diffusion auftreten, die die Lade- bzw. Entladereaktion negativ beeinflussen. Bei höheren Stromdichten wurden durchschnittliche Coulombeffizienzen von über 90% gemessen. Die 0,5 M MV/TEMPOL FBn verhalten sich analog zu den V FBn, bei denen die Coulombeffizienz mit steigender Stromdichte auf über 95% ansteigt. Auch bei den 0,1 M MV/TEMPOL FBn steigen die Coulombeffizienzen mit zunehmender Stromdichte, allerdings treten hier stärkere Effekte durch zunehmenden ohmschen Widerstand der Elektroden, des Elektrolyten und der Membran auf. Dies führt zu einer erhöhten Varianz der Messwerte und im Durchschnitt zu Coulombeffizienzen im Bereich von etwa 90% bis 92%. Diese höhere Varianz bei den 0,1 M MV/TEMPOL FBn ist auf die geringere *Konzentration_{aktive Spezies}* und die geringere übertragene Kapazität pro Zyklus zurückzuführen, was bereits bei kleineren Störungen zu größeren Schwankungen führt. Die übertragene Kapazität bei den 0,1 M MV/TEMPOL FBn lag zwischen 0,07 Ah und 0,1 Ah, während die 0,5 M MV/TEMPOL FBn Kapazitäten zwischen 0,24 Ah und 0,49 Ah übertrugen.

Im Vergleich zu den V FBn wiesen die MV/TEMPOL FBn deutlich geringere Energieeffizienzen auf. Die 0,5 M MV/TEMPOL FBn erreichten mittlere Energieeffizienzen zwischen 69,92% und 85,12%, während die 0,1 M MV/TEMPOL FBn zwischen 63,82% und 89,18% lagen (siehe **Abbildung 19**). Die im Vergleich zu den V FBn niedrigeren Werte sind auf die höheren Widerstände des Elektrolyten und mögliche irreversible Nebenreaktionen zurückzuführen.

6.1.3. 0,3 M, 0,2 M und 0,1 M AQDS/BQDS Durchflussbatterien

Für die in dieser Arbeit hergestellten AQDS/BQDS FBn wurde eine maximale Molarität von 0,3 mol L⁻¹ ermittelt, die in der gewählten 1 M H₂SO₄ eine optimale Leistung erzielt. Bei einer höheren Molarität bildete sich während des Entladezyklus eine feste Ablagerung innerhalb der Kohlenstofffilzelektrode. Da nur wenige Studien die stabilen Stromdichten und Spannungsbereiche für AQDS/BQDS FBn untersucht haben, wurden eigene Experimente durchgeführt, um diese stabilen Betriebsbereiche zu ermitteln. Die stabilen Stromdichten wurden auf 2,5, 5, 7,5, 10 und 12,5 mA cm⁻² festgelegt, und als Spannungsgrenzen wurden 0,15 V (Entladung) und 0,9 V (Ladung) gewählt.

Die AQDS/BQDS FBn wurden in drei unterschiedlichen Molaritäten (0,3 M, 0,2 M und 0,1 M) untersucht (siehe **Tabelle 8**). Die Leistungs- und Energiedichten sind in **Abbildung 20** dargestellt. Ebenso sind die Spannungseffizienz (**Abbildung 21**), die Coulombeffizienz (**Abbildung 22**) und die daraus berechnete Energieeffizienz (**Abbildung 23**) über die Stromdichte aufgetragen.

Tabelle 8. Mittelwerte und Standardabweichungen der Leistungsdichte, Energiedichte, Spannungseffizienz, Coulombeffizienz und Energieeffizienz von 0,3 M AQDS/BQDS FBn, 0,2 M AQDS/BQDS FBn und 0,1 M AQDS/BQDS FBn bei unterschiedlichen Stromdichten.

AQDS/BQDS FBn 0,3 M					
Stromdichte [mA cm ⁻²]	Leistungs- dichte [mW cm ⁻²]	Energie- dichte [Wh L ⁻¹]	Spannungs- effizienz [%]	Coulomb- effizienz [%]	Energie- effizienz [%]
2,5	1,17 ± 0,02	1,27 ± 0,05	81,38 ± 0,55	96,61 ± 1,07	78,62 ± 0,43
5	2,12 ± 0,02	1,08 ± 0,02	68,94 ± 0,56	98,55 ± 0,50	67,94 ± 0,40
7,5	2,82 ± 0,03	0,88 ± 0,03	56,64 ± 0,51	99,21 ± 0,30	56,19 ± 0,41
10	2,97 ± 0,50	0,52 ± 0,22	42,92 ± 5,53	99,59 ± 0,61	42,72 ± 5,31
12,5	2,68 ± 0,56	0,25 ± 0,16	29,94 ± 5,12	100 ± 13,41	30,18 ± 6,92

AQDS/BQDS FBn 0,2 M					
2,5	1,18 ± 0,01	0,93 ± 0,03	83,08 ± 0,49	95,63 ± 0,15	80,47 ± 0,40
5	2,19 ± 0,01	0,83 ± 0,01	71,65 ± 0,30	97,65 ± 0,37	70,64 ± 0,33
7,5	3,03 ± 0,02	0,74 ± 0,01	61,92 ± 0,47	98,32 ± 0,56	61,39 ± 0,40
10	3,59 ± 0,02	0,60 ± 0,01	52,15 ± 0,43	98,49 ± 1,14	51,84 ± 0,34
12,5	3,94 ± 0,03	0,47 ± 0,01	42,94 ± 0,44	98,49 ± 1,48	42,72 ± 0,31

AQDS/BQDS FBn 0,1 M					
Stromdichte [mA cm ⁻²]	Leistungs- dichte [mW cm ⁻²]	Energie- dichte [Wh L ⁻¹]	Spannungs- effizienz [%]	Coulomb- effizienz [%]	Energie- effizienz [%]
2,5	1,21 ± 0,01	0,51 ± 0,02	85,62 ± 0,18	97,02 ± 1,52	83,07 ± 1,15
5	2,25 ± 0,01	0,45 ± 0,004	75,41 ± 0,11	98,94 ± 0,70	74,61 ± 0,62
7,5	3,18 ± 0,01	0,41 ± 0,002	66,94 ± 0,16	99,17 ± 0,74	66,38 ± 0,45
10	3,98 ± 0,01	0,37 ± 0,003	59,09 ± 0,26	99,30 ± 0,77	58,68 ± 0,36
12,5	4,56 ± 0,03	0,29 ± 0,01	51,11 ± 0,53	99,34 ± 1,03	50,77 ± 0,40

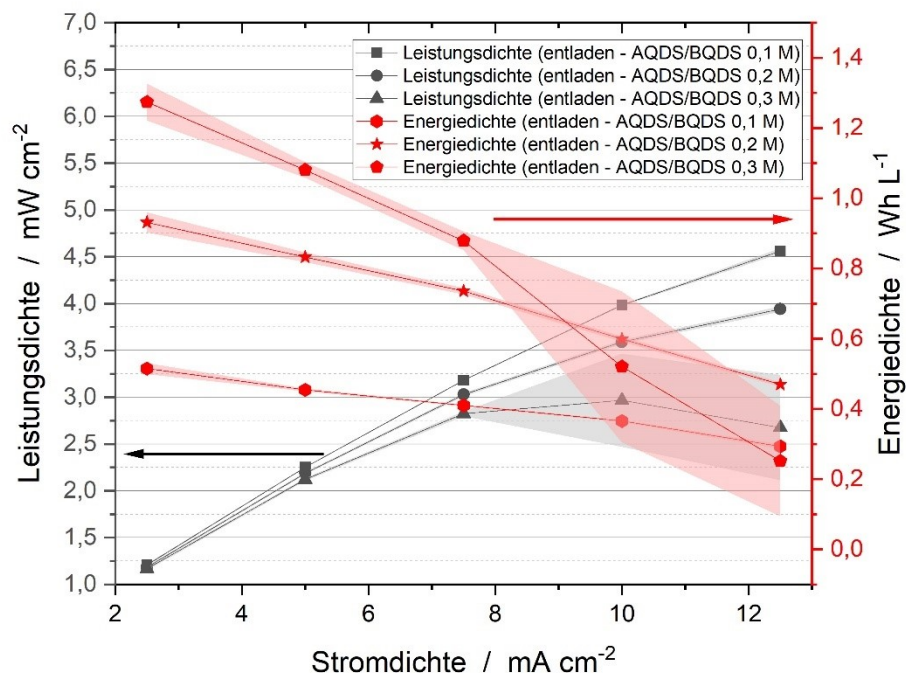


Abbildung 20. Mittelwert und Standardabweichung von Leistungs- und Energiedichten der getesteten standardisierten AQDS/BQDS FBn (0,1 M, 0,2 M und 0,3 M) basierend auf den Entladezyklen.

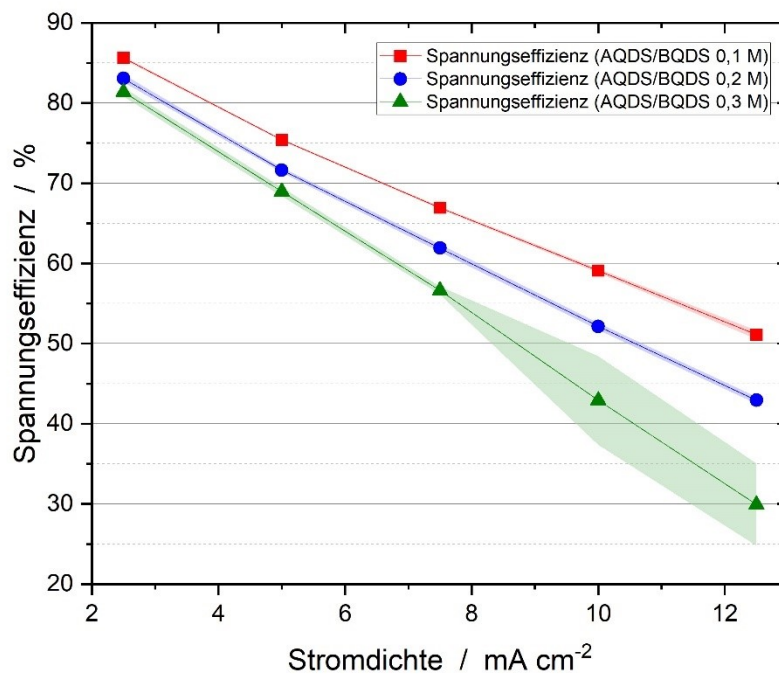


Abbildung 21. Mittelwert und Standardabweichung der Spannungseffizienzen der getesteten standardisierten AQDS/BQDS FBn (0,1 M, 0,2 M und 0,3 M) basierend auf den Entladezyklen.

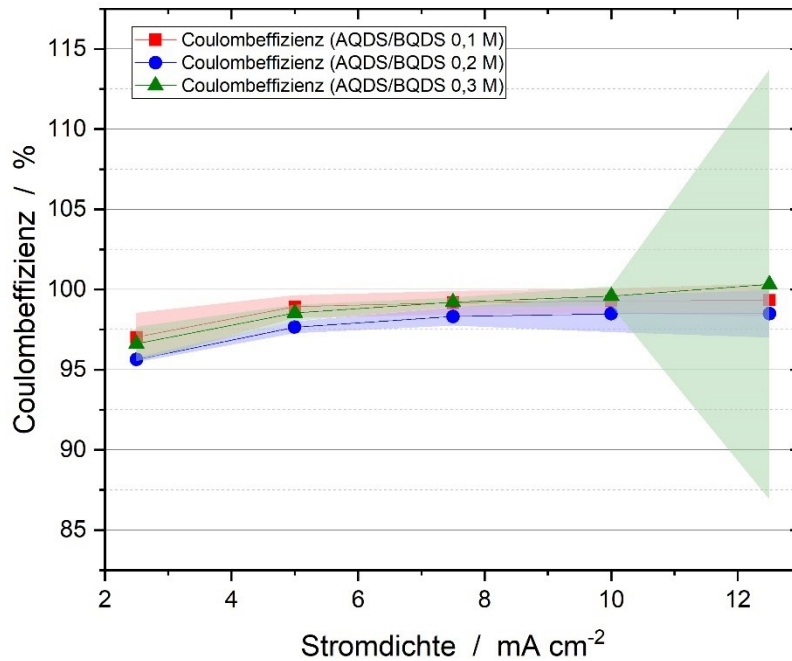


Abbildung 22. Mittelwert und Standardabweichung der Coulombeffizienzen der getesteten standardisierten AQDS/BQDS FBn (0,1 M, 0,2 M und 0,3 M) basierend auf den Entladezyklen.

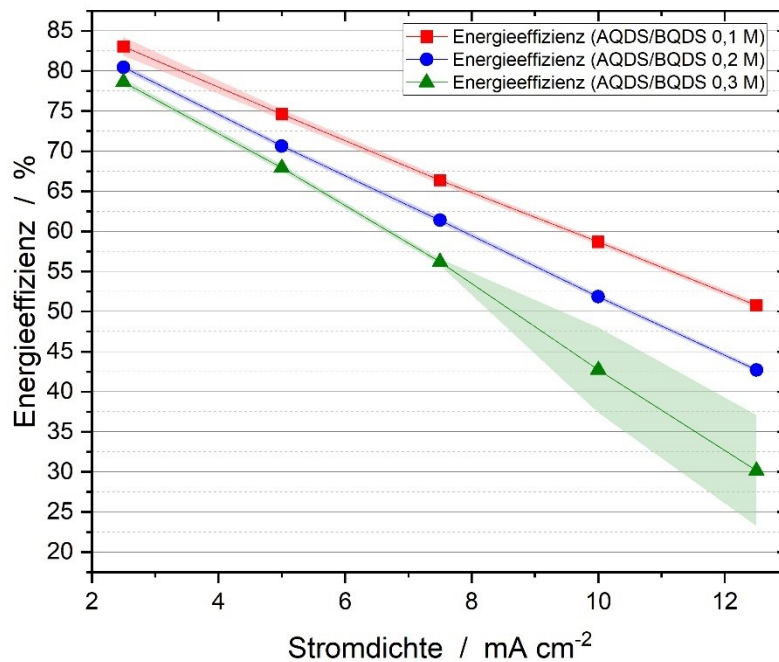


Abbildung 23. Mittelwert und Standardabweichung der Energieeffizienzen der getesteten standardisierten AQDS/BQDS FBn (0,1 M, 0,2 M und 0,3 M) basierend auf den Entladezyklen.

Die in dieser Arbeit untersuchten AQDS/BQDS FBn wurden in drei unterschiedlichen *Konzentration_{aktive Spezies}* (0,3 M, 0,2 M und 0,1 M) über denselben Stromdichtebereich getestet. Dieser lag zwischen $2,5 \text{ mA cm}^{-2}$ und $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$, was niedriger war als die Maximalwerte der Stromdichten bei den V FBn und MV/TEMPOL FBn. Die 0,3 M AQDS/BQDS FBn, die am höchsten konzentrierten, wiesen jedoch bereits innerhalb dieses Bereichs bei steigender Stromdichte erhöhte Varianzen auf. Dies wurde auf eine noch nicht optimierte Zusammensetzung des Elektrolyten sowie auf eine unzureichende Abstimmung der Elektroden- und Membrankomponenten zurückgeführt. Daher wurde eine weitere Erhöhung der Stromdichte vermieden, um die Zuverlässigkeit der Ergebnisse zu gewährleisten, da größere Varianzen die Aussagekraft der Messungen negativ beeinflussen würden.

Analog zu den anderen FBn ist bei den AQDS/BQDS FBn mit steigender Stromdichte eine Erhöhung der Leistungsdichte erkennbar (siehe **Abbildung 20**). Für die 0,3 M FBn wurden mittlere Werte zwischen $1,17 \text{ mW cm}^{-2}$ und $2,68 \text{ mW cm}^{-2}$ erreicht, für die 0,2 M FBn zwischen $1,18 \text{ mW cm}^{-2}$ und $3,94 \text{ mW cm}^{-2}$, und für die 0,1 M FBn zwischen $1,21 \text{ mW cm}^{-2}$ und $4,56 \text{ mW cm}^{-2}$. Die gemessenen Energiedichten verringerten sich mit steigender Stromdichte. Für die 0,3 M FBn lag die Energiedichte zwischen $1,27 \text{ Wh L}^{-1}$ und $0,25 \text{ Wh L}^{-1}$, für die 0,2 M FBn zwischen $0,93 \text{ Wh L}^{-1}$ und $0,47 \text{ Wh L}^{-1}$, und für die 0,1 M FBn zwischen $0,51 \text{ Wh L}^{-1}$ und $0,29 \text{ Wh L}^{-1}$. Interessanterweise hatten die 0,1 M AQDS/BQDS FBn bei den niedrigeren Stromdichten bereits etwa 54,84% der Energiedichte der 0,2 M AQDS/BQDS FBn, was mehr als der Hälfte der maximal erreichbaren Energiedichte entspricht. Im Vergleich zu den 0,3 M AQDS/BQDS FBn lag dieses Verhältnis bei 40,16% – höher als das erwartete Verhältnis von 33,33% basierend auf der Konzentration. Bei der höchsten Stromdichte erreichten die 0,1 M AQDS/BQDS FBn sogar 116% der Energiedichte der 0,3 M AQDS/BQDS FBn. Das Verhältnis der 0,1 M zu den 0,2 M FBn ist gegenüber dem Verhältnis bei der niedrigsten Stromdichte sogar um 21,54% gestiegen.

Auch die Spannungseffizienz der AQDS/BQDS FBn folgt dem bekannten Muster eines Abfalls bei steigenden Stromdichten (siehe **Abbildung 21**). Zwischen $2,5 \text{ mA cm}^{-2}$ und $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ wurden für die 0,3 M FBn Mittelwerte von 81,38% bis 29,94%, für die 0,2 M FBn von 83,08% bis 42,94%, und für die 0,1 M FBn von 85,62% bis 51,11% erzielt. Die Analyse ergab, dass mit zunehmender *Konzentration_{aktive Spezies}* die Spannungseffizienz bei gleichen Stromdichten abnahm, was auf einen höheren Widerstand des Elektrolyten zurückzuführen ist. Im Vergleich zu den MV/TEMPOL FBn waren die Spannungseffizienzen bei den AQDS/BQDS FBn bei gleichen Stromdichten durchweg niedriger. So lag die Spannungseffizienz bei den 0,1 M und 0,5 M MV/TEMPOL FBn bei ähnlichen Werten von etwa 94,79% zu 94,31% (bei $2,5 \text{ mA cm}^{-2}$) und 89,05% zu 86,01% (bei $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$). Der Abfall der Spannungseffizienz war bei den 0,5 M FBn mit 6,10% und bei den 0,1 M FBn mit 8,80% vergleichsweise moderat. Bei den AQDS/BQDS FBn betrug der Abfall bei den 0,3 M FBn jedoch 63,21%, bei den 0,2 M FBn 48,31% und bei den 0,1 M FBn 40,31%. Dieser signifikante Abfall deutet auf die Notwendigkeit hin, die Elektrolytenzusammensetzung weiter zu optimieren, um die Widerstandswerte zu reduzieren und eine stabilere Leistung über einen größeren Stromdichtebereich hinweg zu erzielen.

Die Coulombeffizienzen der AQDS/BQDS FBn stiegen mit zunehmender Stromdichte (siehe **Abbildung 22**). Die 0,3 M FBn erreichten mittlere Werte von 96,61% bis 100%, die 0,2 M FBn von 95,63% bis 98,49%, und die 0,1 M FBn von 97,02% bis 99,34%. Alle AQDS/BQDS FBn erreichten ähnliche oder höhere Coulombeffizienzen als die

untersuchten V FBn und übertrafen die MV/TEMPOL FBn. Unter den untersuchten Elektrolytenpaaren konnten die AQDS/BQDS FBn die Kapazität am effizientesten speichern und abgeben.

Die Energieeffizienzen der AQDS/BQDS FBn nahmen mit steigender Stromdichte ab (siehe **Abbildung 23**). Die 0,3 M FBn erreichten Werte zwischen 78,62% und 30,18%, die 0,2 M FBn zwischen 80,47% und 42,72%, und die 0,1 M FBn die höchsten Werte zwischen 83,07% und 50,77%. Bei niedrigen Stromdichten waren die Energieeffizienzen der AQDS/BQDS FBn vergleichbar mit denen der 0,1 M MV/TEMPOL FBn. Bei höheren Stromdichten fielen die Werte jedoch deutlich stärker ab als bei den MV/TEMPOL FBn. So war die Energieeffizienz der 0,1 M AQDS/BQDS FBn um 35,29%, die der 0,2 M AQDS/BQDS FBn um 45,55% und die der 0,3 M AQDS/BQDS FBn um 61,53% geringer im Vergleich zu den entsprechenden MV/TEMPOL FBn. Diese Abnahme ist auf höhere Widerstände des Elektrolyten sowie auf ungewollte irreversible Nebenreaktionen zurückzuführen.

Das Elektrolytenpaar AQDS/BQDS durchläuft typischerweise zwei Elektronentransferreaktionen, die entweder gleichzeitig oder schrittweise stattfinden.²³⁴ Im letzteren Fall wird ein Semichinon-Zwischenprodukt¹⁵ gebildet, das unter bestimmten Bedingungen stabil genug sein kann, um nicht weiter zu reagieren, was den Elektronentransfer auf ein einziges Elektron beschränkt. Die Ergebnisse der AQDS/BQDS FBn deuten darauf hin, dass bei den getesteten Systemen in den 5x5-Zyklen und den Degradationstests nur ein Elektronentransfer stattfand. Um den Transfer von zwei Elektronen zu erreichen, müsste das System in einem größeren Potenzialbereich betrieben werden, was derzeit aufgrund der instabilen Zusammensetzung des Elektrolyten nicht möglich ist. Um größere Potenzialbereiche und eine stabilere Leistung zu erreichen, wären weitergehende Untersuchungen bezüglich der Zusammensetzung des Elektrolyten notwendig.

6.1.4. Vergleichende Diskussion der konzentrationsbezogenen relativen Energiedichten der untersuchten Durchflussbatterietypen

Für die Nutzung der FBn als ESS ist die Energiedichte von besonderer Bedeutung. Da die elektrochemisch gespeicherte Energiemenge direkt von der *Konzentration_{aktive Spezies}* im Elektrolyten abhängt, führt eine Erhöhung dieser Konzentration zu einer proportionalen Steigerung der theoretischen Energiedichte. Dies liegt darin begründet, dass die Redoxreaktionen, welche die Speicherung und Freisetzung elektrischer Energie ermöglichen, ausschließlich durch die in Lösung befindlichen aktiven Spezies getragen werden. Bei Annäherung an die Löslichkeitsgrenze dieser Spezies im Lösungsmittel verliert dieser Effekt jedoch an Wirksamkeit, da mit zunehmender Konzentration auch Einschränkungen in der Löslichkeit, Viskosität und elektrochemischen Stabilität auftreten können.^{121,233}

Um eine bessere Vergleichbarkeit zu ermöglichen, wurden die erreichten Energiedichten auf eine Konzentration von 0,1 mol L⁻¹ der aktiven Spezies normiert. Aufgrund der zuvor erläuterten Abhängigkeiten zur verwendeten Stromdichte (vgl. Kapitel 6.1.1, 6.1.2 und 6.1.3) beschränkte sich die vergleichende Diskussion der Ergebnisse auf Werte bei gleichen Stromdichten.

Bei einer Stromdichte von 25 mA cm^{-2} hatten die V FBn mit einer *Konzentration_{aktive Spezies}* von $1,67 \text{ mol L}^{-1}$ die höchste relative Energiedichte pro $0,1 \text{ M}$ mit $1,31 \text{ Wh L}^{-1}$. Die $0,5 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn erreichten eine relative Energiedichte von $0,41 \text{ Wh L}^{-1}$ pro $0,1 \text{ M}$, und die $0,1 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn $0,8 \text{ Wh L}^{-1}$. Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass die weniger konzentrierten MV/TEMPOL FBn eine höhere relative Energiedichte aufwiesen, was als Indiz für erhöhte Widerstände interpretiert werden kann, die vermutlich auf die Zusammensetzung des Elektrolyten zurückzuführen sind, da alle anderen Komponenten identisch waren. Der industriell hergestellte und optimierte Elektrolyt der V FBn erzielte somit eine um $64,74\%$ höhere relative Energiedichte im Vergleich zu den $0,1 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn.

Bei einer Stromdichte von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ wiesen die MV/TEMPOL FBn relative Energiedichten von $0,64 \text{ Wh L}^{-1}$ pro $0,1 \text{ M}$ bei den $0,5 \text{ M}$ FBn und $0,95 \text{ Wh L}^{-1}$ bei den $0,1 \text{ M}$ FBn auf. Die AQDS/BQDS FBn erreichten relative Energiedichten von $0,08 \text{ Wh L}^{-1}$ pro $0,1 \text{ M}$ bei den $0,3 \text{ M}$ FBn, $0,23 \text{ Wh L}^{-1}$ bei den $0,2 \text{ M}$ FBn und $0,29 \text{ Wh L}^{-1}$ bei den $0,1 \text{ M}$ FBn. Auch hier war festzustellen, dass bei den niedrigeren *Konzentration_{aktive Spezies}* die relative Energiedichte höher ausfiel. Auch das bekannte Verhalten des steigenden Widerstandes bei einer höheren *Konzentration_{aktive Spezies}* ist bei den $0,3 \text{ M}$ AQDS/BQDS FBn gegenüber der $0,1 \text{ M}$ FBn desselben Typs erkennbar, da diese nur $27,59\%$ der Energiedichte erreichte.

Bei der geringeren Stromdichte von $2,5 \text{ mA cm}^{-2}$ waren die Auswirkungen der Widerstände erwartungsgemäß am geringsten. Die $0,1 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn erreichten eine relative Energiedichte von $1,18 \text{ Wh L}^{-1}$ pro $0,1 \text{ M}$ und die $0,5 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn von $0,96 \text{ Wh L}^{-1}$. Die AQDS/BQDS FBn erzielten bei dieser Stromdichte relative Energiedichten von $0,42 \text{ Wh L}^{-1}$ bei den $0,3 \text{ M}$ FBn, $0,47 \text{ Wh L}^{-1}$ bei den $0,2 \text{ M}$ FBn und $0,51 \text{ Wh L}^{-1}$ bei den $0,1 \text{ M}$ FBn. Der Einfluss des höheren Widerstands bei den $0,3 \text{ M}$ AQDS/BQDS FBn war hier deutlich geringer, sodass diese noch $82,35\%$ der relativen Energiedichte der $0,1 \text{ M}$ FBn erreichten.

Im Gegensatz zur Energiedichte zeigt die Leistungsdichte eine deutlich geringere Abhängigkeit von der *Konzentration_{aktive Spezies}* im Elektrolyten. Stattdessen wird sie maßgeblich durch die elektrochemische Reaktionskinetik sowie die summierten Widerstandskomponenten der Durchflussbatterie bestimmt. Dazu zählen insbesondere die Aktivierungsverluste an den Elektroden (abhängig von der katalytischen Aktivität und der Reaktionsgeschwindigkeit), die ohmschen Verluste durch Ionenleitfähigkeit von Membran und Elektrolyt sowie elektrische Kontaktwiderstände, und schließlich Konzentrationsverluste, die durch limitierte Massentransportprozesse auftreten können.^{95,233} Die Leistungsdichte wird folglich durch ein komplexes Zusammenspiel von Materialien, Zellarchitektur und Betriebsbedingungen bestimmt. Eine isolierte Betrachtung der Konzentration der aktiven Spezies als Leistungsdeterminante wäre daher nicht zielführend. Aus diesem Grund wurde auf eine vergleichende Diskussion der Leistungsdichten in Abhängigkeit von der *Konzentration_{aktive Spezies}* verzichtet.

6.2. Ökonomische Daten der verschiedenen im Labor getesteten organischen und anorganischen Durchflussbatterien in Form der Herstellungskosten

Alle untersuchten FBn wurden im Labor eigenständig zusammengebaut, wobei die entsprechenden Komponenten käuflich erworben wurden. Auf diese Weise konnte die Datengrundlage für die bereichsspezifische Kostenberechnung (vgl. Gleichungen Gl. 15, Gl. 16, Gl. 17, Gl. 18, Gl. 19 und Gl. 20) durchgehend mit selbst ermittelten Werten hinterlegt werden.

Die Kosten werden in Sunburst-Diagrammen hierarchisch dargestellt, wobei die Kosten der einzelnen Komponenten von außen nach innen summiert werden. Diese Struktur entspricht dem Hierarchischen Komponentenmodell (vgl. **Abbildung 8**). In **Abbildung 25** beispielsweise setzt sich der Gesamtpreis des Negolyten (28,80 €) aus den Kosten der Komponenten aktive Spezies_{Negolyt} (28,00 €), Lösungsmittel_{Negolyt} (0,11 €) und Additiv_{Negolyt} (0,69 €) zusammen.

6.2.1. Leistungsbezogene Herstellungskosten

Die Kosten im Bereich Leistung sind für alle im Labor getesteten Zellen identisch, was auf die weitgehende Standardisierung der untersuchten FBn zurückzuführen ist. Unterschiede traten lediglich bei den verwendeten Elektrolyten auf, was den Bereich der Energie betrifft.

Die verwendeten Komponenten sowie die hierarchische Struktur, bei der sich die Kosten der Zelle aus der Summe der verwendeten Komponenten ergeben, orientieren sich an der in **Abbildung 8** dargestellten Struktur.

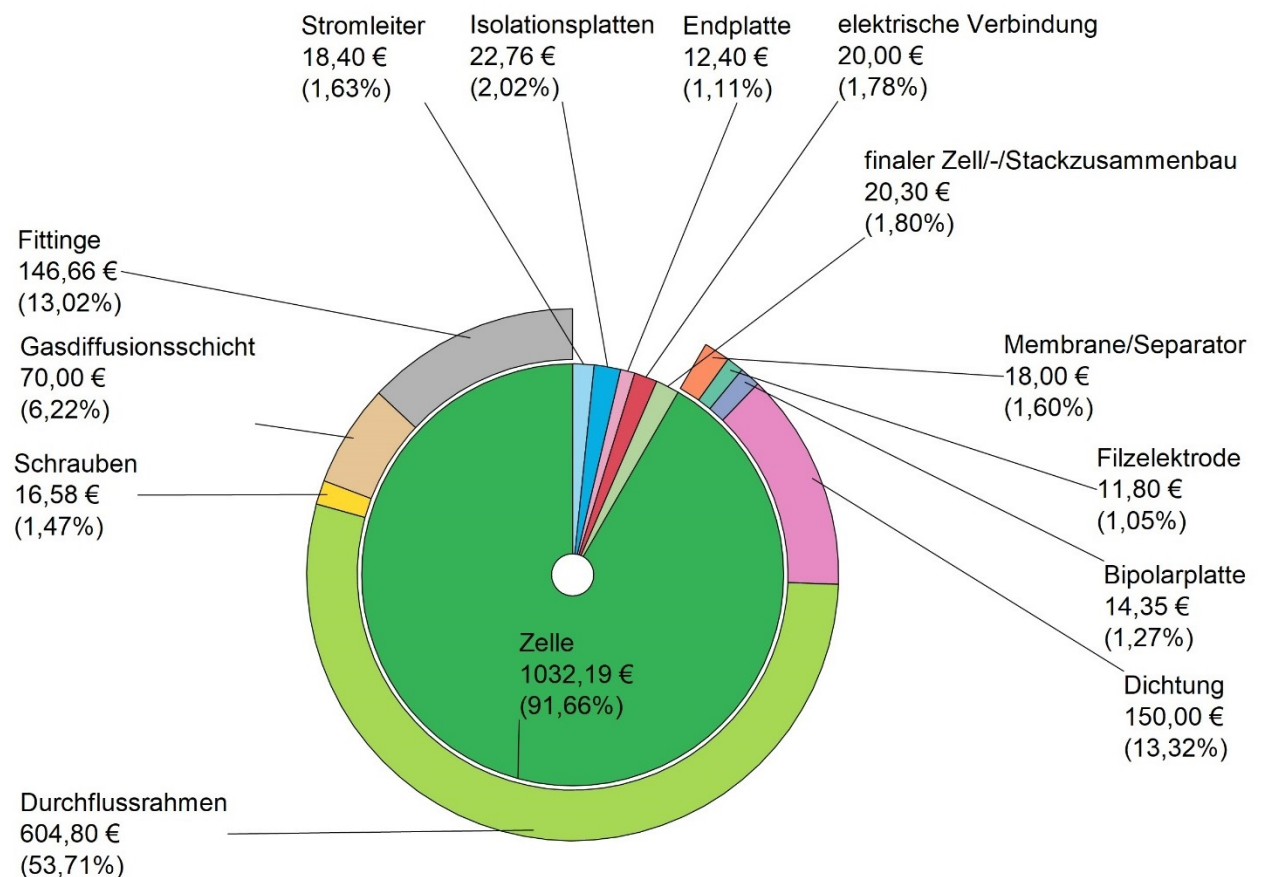


Abbildung 24. Kostenverteilung der leistungsbezogenen Herstellungskosten der untersuchten Durchflussbatterien gemäß dem standardisierten Aufbau (vgl. Anhänge A und B).

Die ermittelten Gesamtkosten der leistungsbezogenen Herstellungskosten betrugen für alle FBn jeweils 1126,05 €. Der größte Anteil entfiel mit 53,71% auf die Kosten des Durchflussrahmens. Die Kosten für Fittinge und Dichtungen, die den zweit- und drittgrößten Anteil ausmachten, lagen jeweils bei etwa 13% und waren somit deutlich geringer. Der niedrigste Kostenanteil, etwa 1%, entfiel auf die verwendeten Filzelektroden. Diese Kostenverteilungen gelten ausschließlich für den im Labor verwendeten Aufbau und sind nicht auf eine kommerzielle Batterie übertragbar. Für eine kommerzielle Batterie müssten die Kosten- und Leistungswerte der jeweiligen Zelle in das Modell integriert werden. Dies wird auch durch den Vergleich mit einer strukturell ähnlich aufgebauten V FB⁴³ mit 10 kW und 120 kWh deutlich: Bei dieser Batterie entfällt nur 6% der leistungsbezogenen Kosten auf den Durchflussrahmen, Fittinge tragen nahezu keinen Anteil bei, während Dichtungen 32% und Filzelektroden 21% der Kosten ausmachen.

6.2.2. Energiebezogene Herstellungskosten von 1,67 M und 0,3 M V Durchflussbatterien

Die V FBn verwendeten denselben Elektrolyten in beiden Halbzellen, was die symmetrische Kostenverteilung in **Abbildung 25** und **Abbildung 26** erklärt. Sie wurden für 5x5-Zyklen Tests sowie Degradationstests eingesetzt und in zwei unterschiedlichen Konzentrationen (1,67 mol L⁻¹ und 0,3 mol L⁻¹) hergestellt.

Die V FBn mit der niedrigeren Konzentration von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ wurden ausschließlich zur Untersuchung des Alterungsverhaltens verwendet, um eine *Konzentration_{aktive Spezies}* zu erhalten, die mit der der untersuchten O FBn vergleichbar ist.

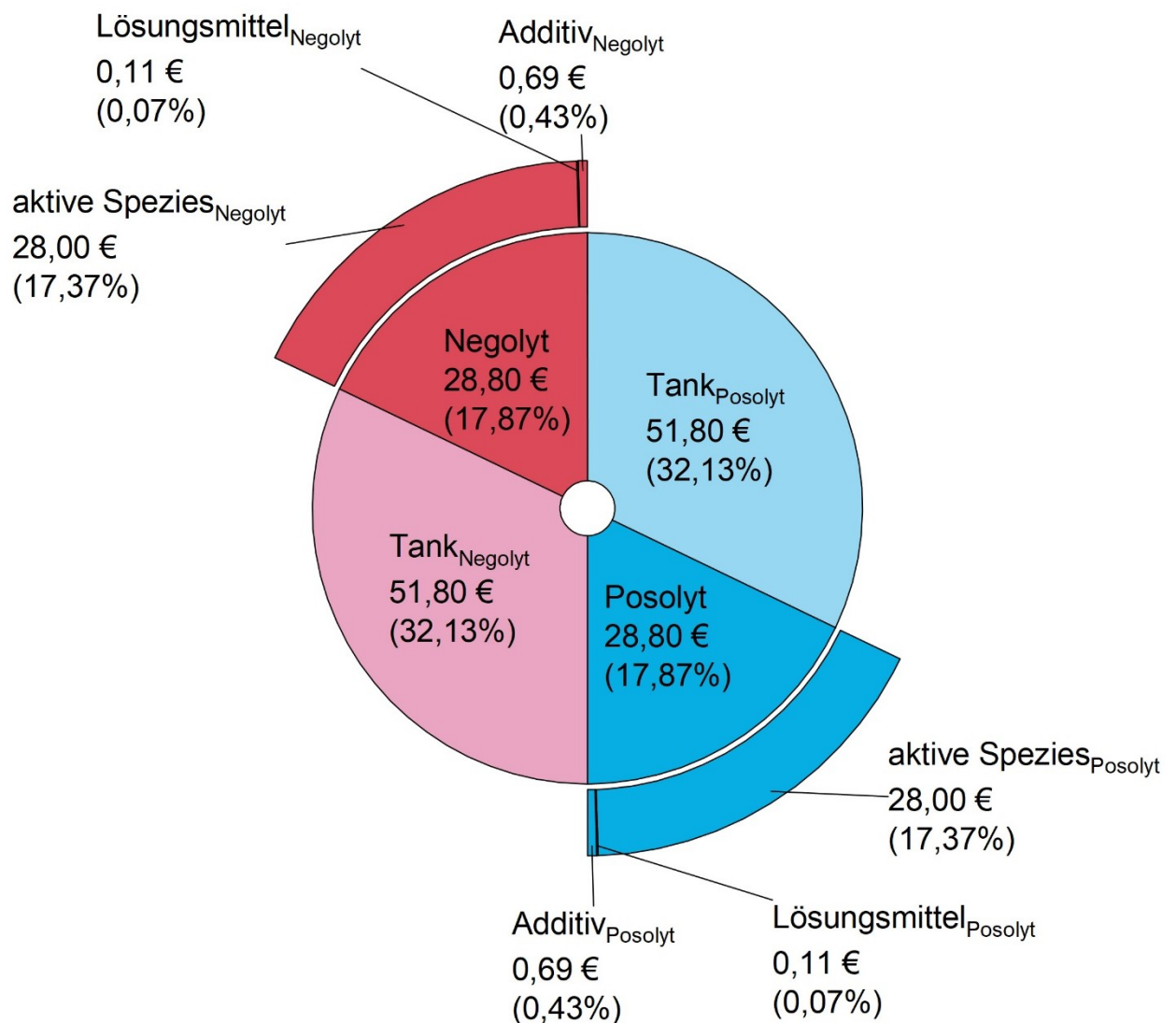


Abbildung 25. Kostenverteilung der energiebezogenen Herstellungskosten der untersuchten V Durchflussbatterien mit einer Konzentration von $1,67 \text{ mol L}^{-1}$ gem. den technoökonomischen Modellierungsdaten (vgl. Anhang D.i).

Mit Gesamtkosten von 161,20 € waren die 1,67 M V FBn die kostengünstigsten im Bereich Energie. Dies ist vor allem darauf zurückzuführen, dass der verwendete Elektrolyt industriell gefertigt wurde (DegraBat-II Vanadiumelektrolyt der Firma GfE - Gesellschaft für Elektrometallurgie mbH) und bereits zur Verfügung stand. Dadurch konnten industrielle Skaleneffekte berücksichtigt werden, die auch bei der Herstellung der anderen Elektrolyte in deutlich größeren Maßstäben zu erwarten sind.

Die Kosten verteilten sich insgesamt zu 35,74% auf den Elektrolyten und zu 64,26% auf die Tanks. Beim Elektrolyten entfiel der größte Kostenanteil auf die aktive Spezies. Auch hier sind die unterschiedlichen Skaleneffekte bei einer großindustriellen Produktion sichtbar: Sowohl das Additiv (H_3PO_4) als auch das Lösungsmittel (H_2SO_4) werden in

wesentlich größeren Mengen produziert als die aktive Spezies und sind daher deutlich günstiger.

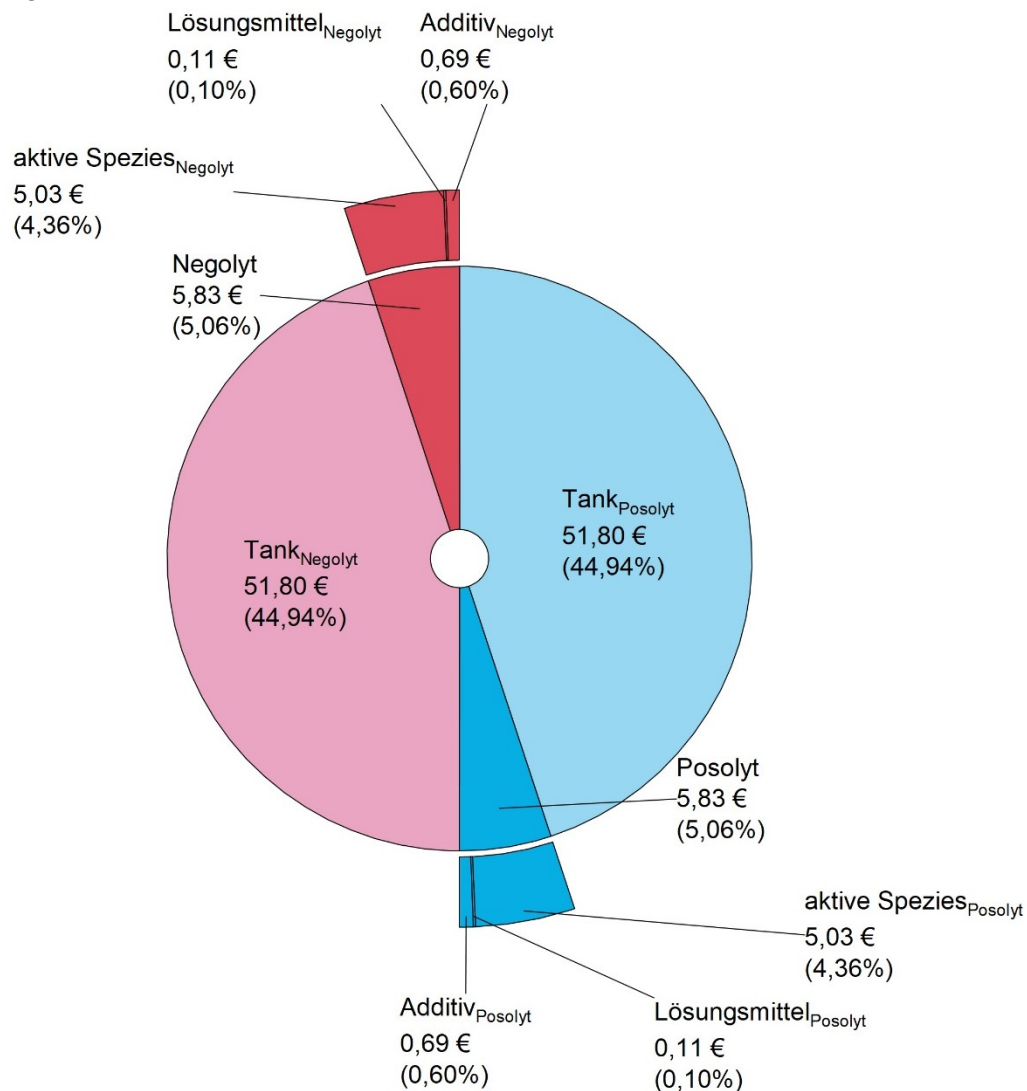


Abbildung 26. Kostenverteilung der energiebezogenen Herstellungskosten der untersuchten V Durchflussbatterien mit einer Konzentration von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ gem. den technoökonomischen Modellierungsdaten (vgl. Anhang D.i).

Mit Gesamtkosten von 115,26 € war die 0,3 M V FB die kostengünstigste im Bereich Energie.

Durch die Reduzierung der *Konzentration_{aktive Spezies}* verschoben sich die Kostenanteile im Vergleich zu den 1,67 M V FBn zugunsten der Tanks. Diese blieben im Labor unverändert, da weiterhin die gleichen 2 Gewindeflaschen (DURAN GL 45) wie bei allen FBn verwendet wurden. Insgesamt entfielen 10,12% der Kosten auf den Elektrolyten, während der größte Anteil von 89,88% auf die Tanks entfiel. Der Kostenanteil der aktiven Spezies betrug 8,72%, was den größten Teil der Elektrolytkosten ausmachte.

6.2.3. Energiebezogene Herstellungskosten von 0,5 M, 0,3 M und 0,1 M MV/TEMPOL Durchflussbatterien

Bei den MV/TEMPOL FBn wird in jeder der beiden Halbzellen ein unterschiedlicher Elektrolyt verwendet (Negolyt und Posolyt), was sich in der asymmetrischen Kostenverteilung in **Abbildung 27**, **Abbildung 28** und **Abbildung 29** widerspiegelt.

Auch mit diesen O FBn wurden 5x5 -Zyklen Tests sowie Degradationstests durchgeführt. Hierbei kamen insgesamt drei verschiedene Konzentrationen zum Einsatz ($0,5 \text{ mol L}^{-1}$, $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ und $0,1 \text{ mol L}^{-1}$). Die $0,3 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn wurden ausschließlich für Degradationstests verwendet, während mit den beiden anderen Konzentrationen beide Testarten durchgeführt wurden.

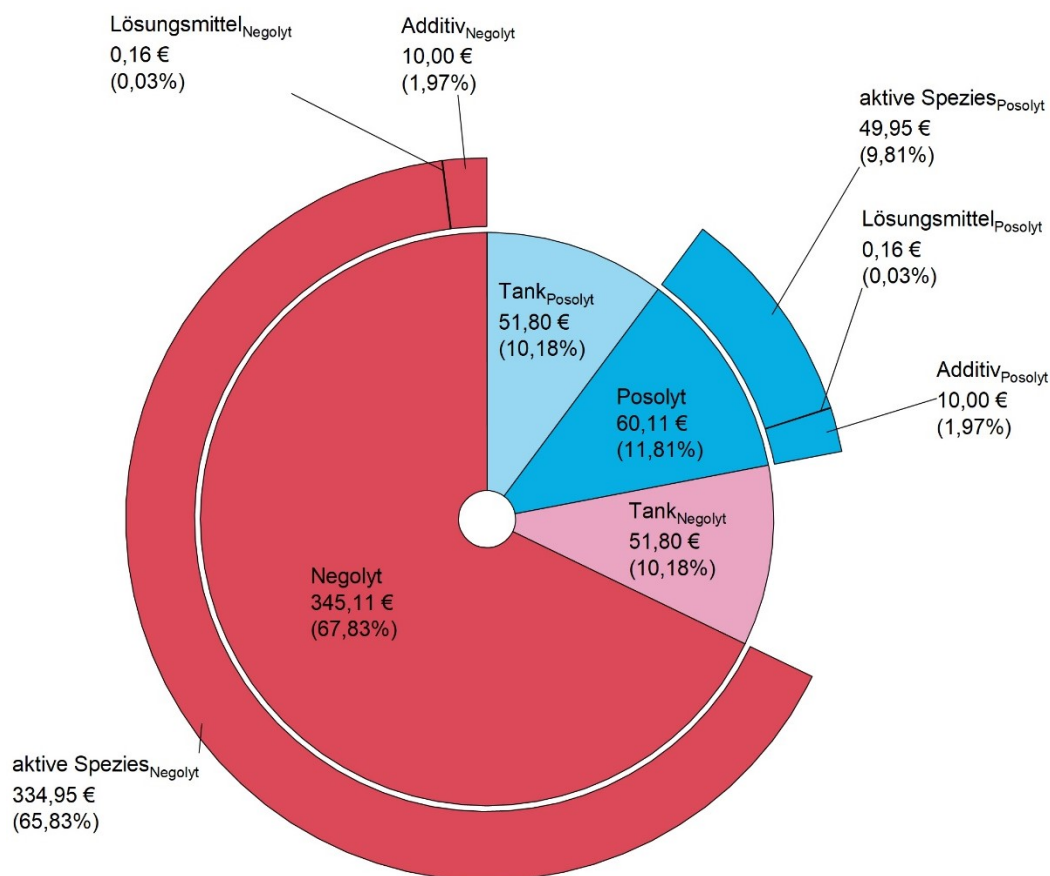


Abbildung 27. Kostenverteilung der energiebezogenen Herstellungskosten der untersuchten MV/TEMPOL Durchflussbatterien mit einer Konzentration von $0,5 \text{ mol L}^{-1}$ gem. den technoökonomischen Modellierungsdaten (vgl. Anhang D.ii).

Die Gesamtkosten im Bereich Energie für die $0,5 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn beliefen sich auf 508,82 €. Der erhebliche Einfluss des Kostenanteils der aktiven Spezies des Negolyten ist bei dieser Konzentration besonders deutlich.

Der Kostenanteil der beiden Tanks betrug lediglich 20,36%, während der Anteil des 1,1'-Dimethyl-4,4'-bipyridinium mit 65,83% der höchste aller untersuchten MV/TEMPOL FBn war. Die hohen spezifischen Kosten von 6699 € L^{-1} führten zu spezifischen Kosten des Negolyten von $6712,25 \text{ € L}^{-1}$. Aufgrund der hohen Molarität und

dem damit verbundenen größten Bedarf an aktiver Spezies bei diesem Typ von FBn sind hier im Vergleich die größten Skaleneffekte zu erwarten. Der Kostenanteil des Negolyten an den Gesamtkosten der FBn betrug mit 67,83% etwa das Sechsfache des Anteils des Posolyten, der bei 11,81% lag. Lösungsmittel und Additiv trugen mit jeweils 2% zum Kostenbeitrag bei, wobei das Additiv mit 1,97% den deutlich größeren Anteil hatte. Insgesamt war der Kostenbeitrag dieser beiden Komponenten jedoch vernachlässigbar.

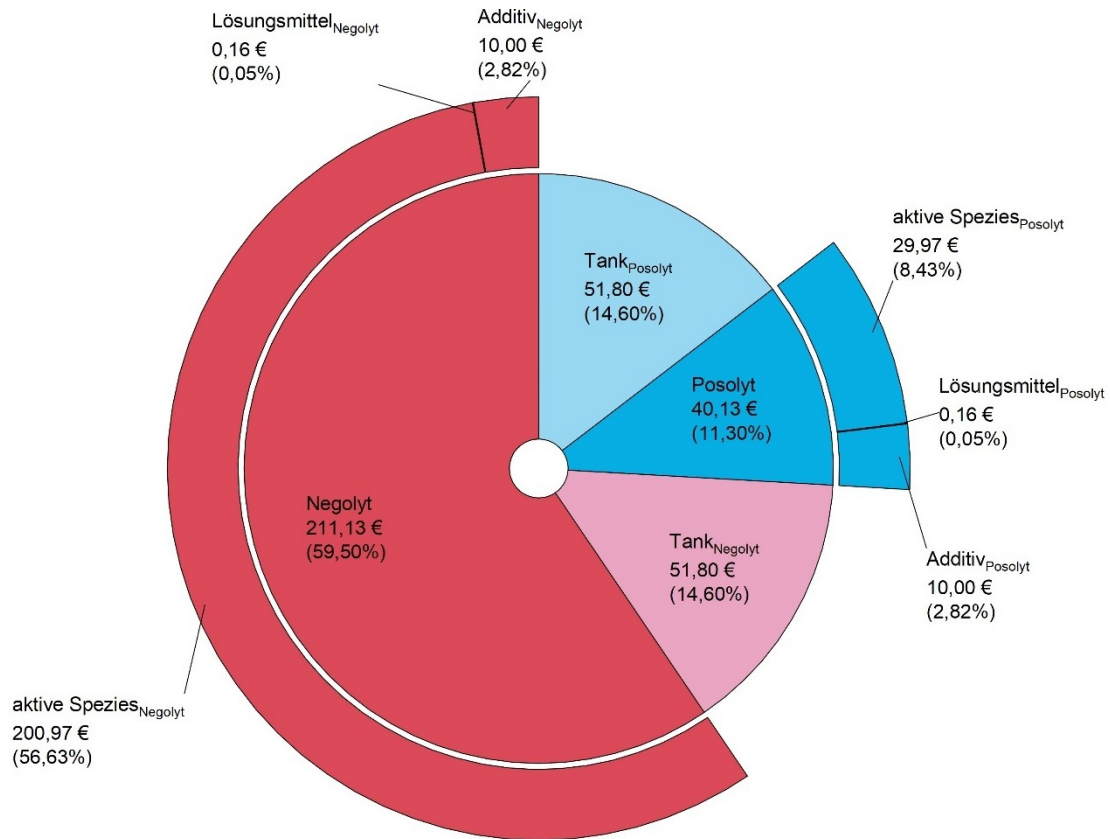


Abbildung 28. Kostenverteilung der energiebezogenen Herstellungskosten der untersuchten MV/TEMPOL Durchflussbatterien mit einer Konzentration von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ gem. den technoökonomischen Modellierungsdaten (vgl. Anhang D.ii).

Bei den $0,3 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn betrugen die Gesamtkosten im Bereich Energie $354,86 \text{ €}$. Der mit Abstand größte Kostenanteil entfiel auf den Negolyten, mit $59,50\%$. Davon war die aktive Spezies allein für $56,63\%$ der Gesamtkosten der FB verantwortlich, was den höchsten Anteil aller Einzelkomponenten darstellt, bedingt durch die bereits erwähnten sehr hohen spezifischen Kosten. Der Negolytenanteil an den Gesamtkosten war deutlich mehr als die Hälfte, während der Posolyt nur $11,30\%$ der Kosten ausmachte. Somit war der Kostenanteil des Negolyten etwa fünfmal so hoch wie der des Posolyten.

Das Lösungsmittel hatte bei beiden Elektrolyten vernachlässigbare Kostenanteile, und das Additiv trug mit jeweils unter 3% ebenfalls keinen signifikanten Anteil bei. Die Tanks, deren absolute Kosten mit jeweils $51,80 \text{ €}$ bei allen FBn identisch waren, hatten einen relativen Anteil von $29,20\%$, also etwa ein Drittel, an den Gesamtkosten.

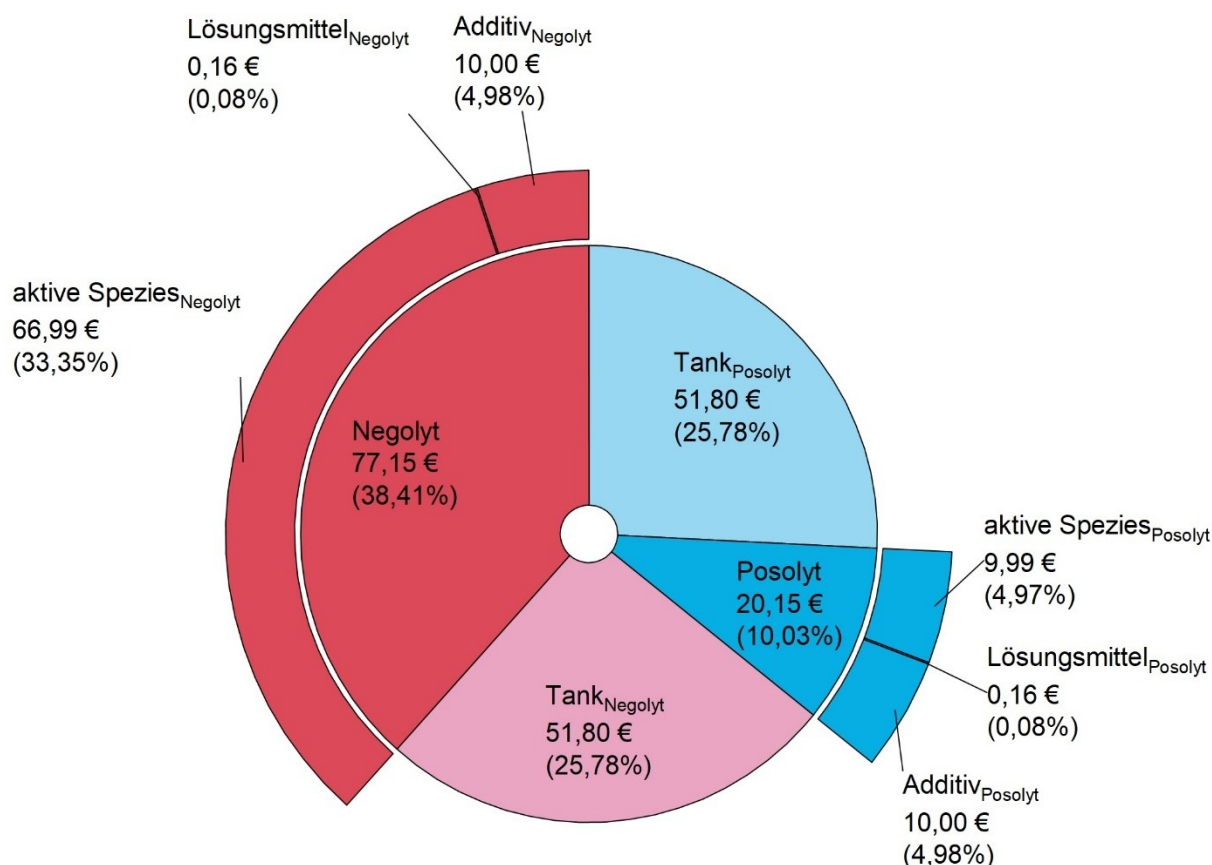


Abbildung 29. Kostenverteilung der energiebezogenen Herstellungskosten der untersuchten MV/TEMPOL Durchflussbatterien mit einer Konzentration von $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ gem. den technoökonomischen Modellierungsdaten (vgl. Anhang D.ii).

Die $0,1 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn weisen im Bereich Energie Gesamtkosten von $200,90 \text{ €}$ auf, was trotz der niedrigeren *Konzentration*_{aktive Spezies} teurer ist als die $1,67 \text{ M V}$ FBn. Da die Kosten für die Tanks identisch sind, resultiert der Großteil des Kostenunterschieds aus dem Elektrolyten. Auch bei dieser Konzentration entfiel der größte Teil der Kosten, mit $33,35\%$, auf die aktive Spezies des Negolyten, der insgesamt $38,41\%$ der Kosten der FB ausmachte. Der Posolyt war mit $10,03\%$ etwa ein Viertel so kostenintensiv wie der Negolyt. Bei beiden Elektrolyten waren die Kostenanteile des Lösungsmittels vernachlässigbar, und auch das Additiv hatte mit jeweils $4,98\%$ einen relativ geringen Anteil, wobei es beim Posolyten immerhin die Hälfte der Kosten ausmachte.

Auf die Tanks entfielen bei diesen FBn mit $51,56\%$ mehr als die Hälfte der Gesamtkosten.

6.2.4. Energiebezogene Herstellungskosten von $0,3 \text{ M}$, $0,2 \text{ M}$ und $0,1 \text{ M}$ AQDS/BQDS Durchflussbatterien

Die AQDS/BQDS FBn weisen, wie die MV/TEMPOL FBn, eine asymmetrische Kostenverteilung auf, was ebenfalls auf die Verwendung unterschiedlicher Elektrolyte in den jeweiligen Halbzellen zurückzuführen ist (vgl. **Abbildung 30**, **Abbildung 31** und **Abbildung 32**). Diese FBn wurden in drei verschiedenen Konzentrationen ($0,3 \text{ mol L}^{-1}$,

0,2 mol L⁻¹ und 0,1 mol L⁻¹) für 5x5-Zyklen Tests und Degradationsuntersuchungen eingesetzt.

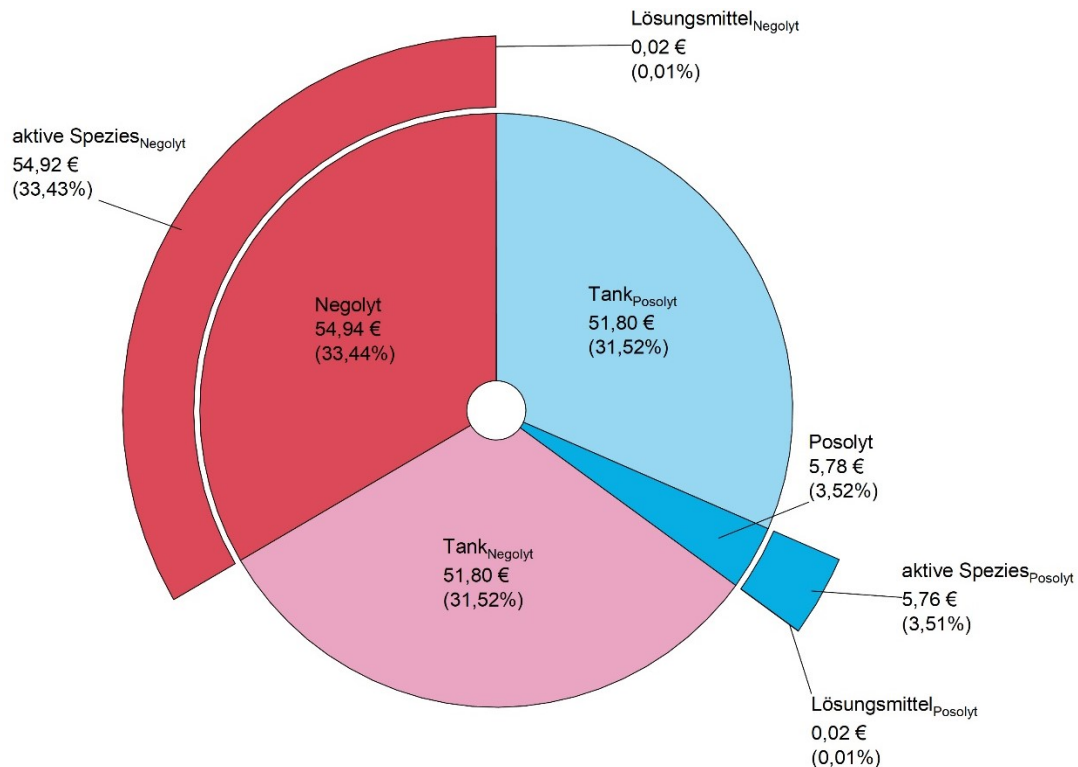


Abbildung 30. Kostenverteilung der energiebezogenen Herstellungskosten der untersuchten AQDS/BQDS Durchflussbatterien mit einer Konzentration von 0,3 mol L⁻¹ gem. den technoökonomischen Modellierungsdaten (vgl. Anhang D.iii).

Die Gesamtkosten der 0,3 M AQDS/BQDS FBn von 164,32 € setzten sich aus den Kosten für beide Tanks (jeweils 51,80 €), die einen Anteil von insgesamt 63,04% ausmachen, den Kosten des Posolyten (5,78 € bzw. 3,52%) und dem etwa zehnmal höheren Beitrag des Negolyten (54,94 € bzw. 33,44%) zusammen. Auch bei diesem FB-Typ war der Negolyt (Anthrachinon-2,7-disulfonsäure) verhältnismäßig teurer als der Posolyt (1,2-Dihydroxybenzochinon-3,5-disulfonsäure). Allerdings waren die spezifischen Kosten im Labormaßstab um eine Dimension niedriger als bei den MV/TEMPOL FBn. Der Negolyt hatte bei der 0,3 M FB spezifische Kosten von etwa 696 € L⁻¹, der Posolyt von etwa 82 € L⁻¹.

Das Lösungsmittel hatte bei beiden Elektrolyten einen vernachlässigbaren Anteil an den Kosten, die nahezu ausschließlich durch die aktiven Spezies bestimmt wurden. Auch bei diesen O FBn sind Skalierungseffekte zu erwarten, die bei industrieller Produktion zu deutlich niedrigeren spezifischen Kosten führen würden.

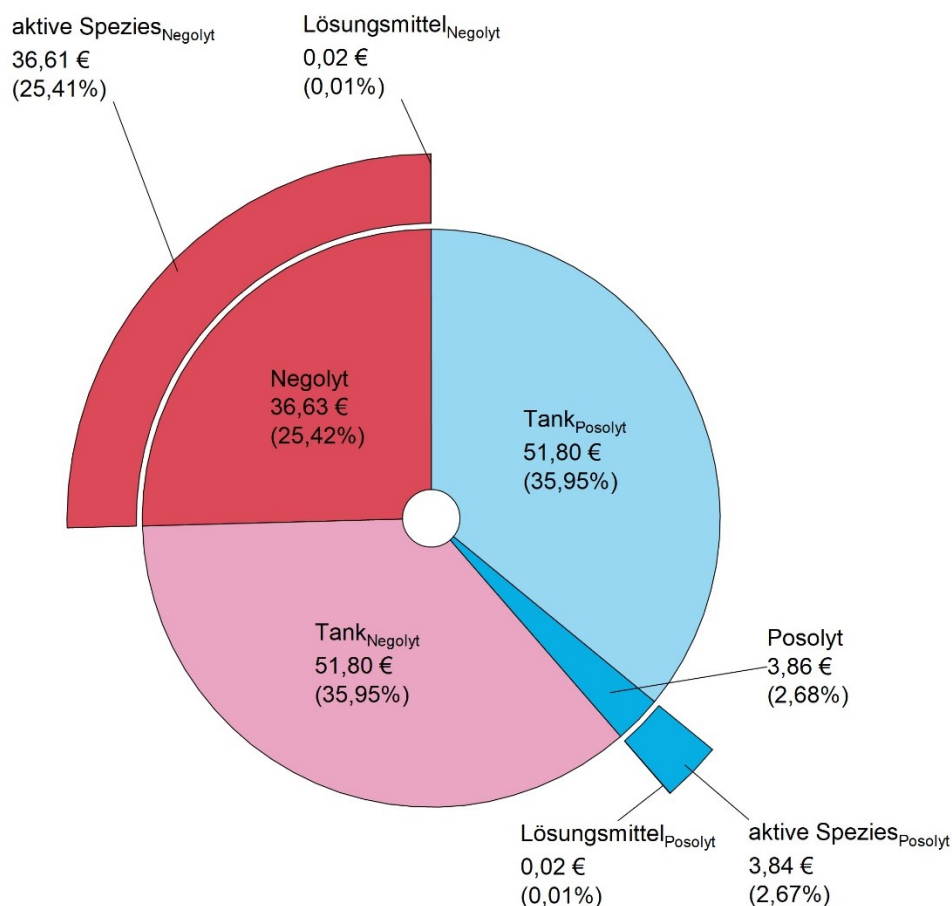


Abbildung 31. Kostenverteilung der energiebezogenen Herstellungskosten der untersuchten AQDS/BQDS Durchflussbatterien mit einer Konzentration von $0,2 \text{ mol L}^{-1}$ gem. den technoökonomischen Modellierungsdaten (vgl. Anhang D.iii).

Bei der $0,2 \text{ M}$ AQDS/BQDS FB lagen die Gesamtkosten im Bereich Energie bei $144,09 \text{ €}$. Mehr als zwei Drittel der Gesamtkosten, genau $71,90\%$, entfielen auf die beiden Tanks. Der Negolyt hatte mit etwa $25,42\%$ einen ähnlich hohen Anteil wie bei der $0,3 \text{ M}$ FB, wobei er rund zehnmal höhere Kosten verursachte als der Posolyt. Auch hier hatte das Lösungsmittel bei beiden Elektrolyten nur einen vernachlässigbaren Beitrag, sodass nahezu ausschließlich die aktiven Spezies für die Kosten des jeweiligen Elektrolyten verantwortlich waren.

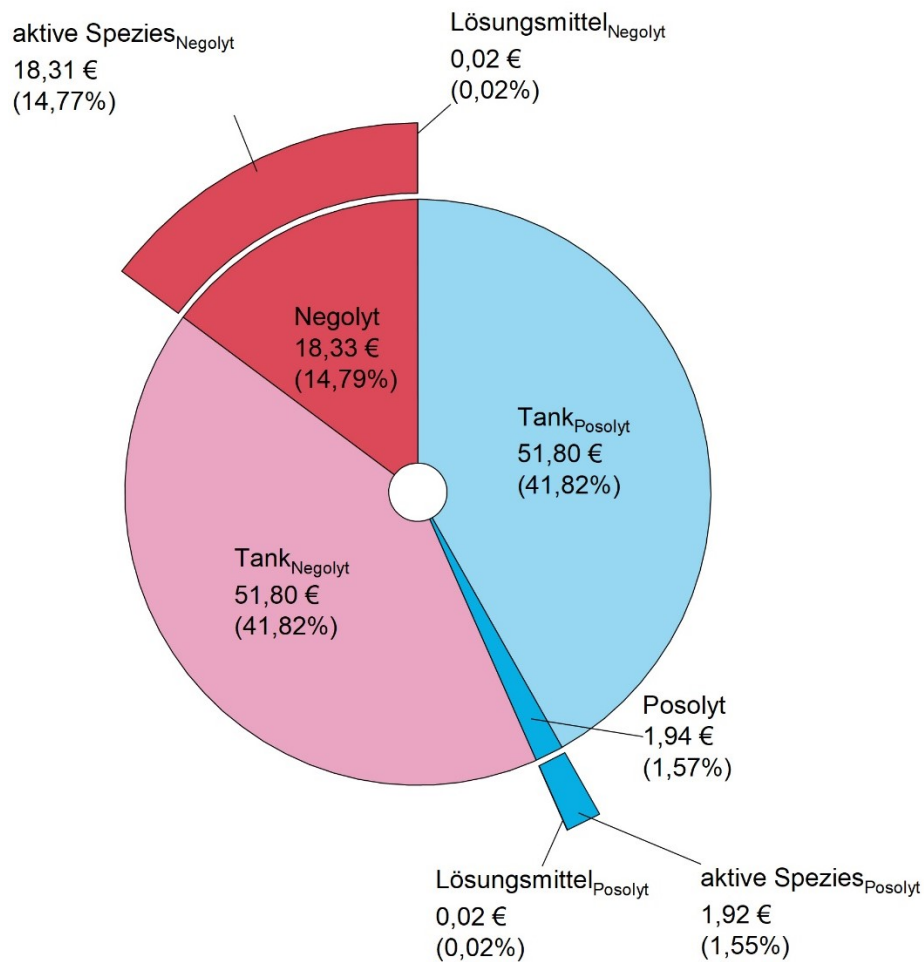


Abbildung 32. Kostenverteilung der energiebezogenen Herstellungskosten der untersuchten AQDS/BQDS Durchflussbatterien mit einer Konzentration von $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ gem. den technoökonomischen Modellierungsdaten (vgl. Anhang D.iii).

Die Gesamtkosten im Bereich Energie für die $0,1 \text{ M}$ AQDS/BQDS FBn beliefen sich auf $123,87 \text{ €}$. Wie in **Abbildung 32** deutlich zu sehen, entfiel der überwiegende Anteil von $83,64\%$, also mehr als drei Viertel der Kosten, auf die Tanks. Auch bei dieser Konzentration war der Kostenanteil des Negolyten mit $14,79\%$ etwa zehnmal größer als der des Posolyten mit $1,57\%$. Der Kostenanteil des Elektrolyten wurde vor allem durch die aktive Spezies bestimmt, da die Anteile des Lösungsmittels, wie bei den anderen Konzentrationen, vernachlässigbar sind.

6.3. Degradation verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien im Labor

Mithilfe der Degradationstests (vgl. Kapitel 5.2) wurden die verschiedenen FB-Typen untersucht, um Degradationsfunktionen in Bezug auf die Kapazitätsdichte abzuleiten. Da das Elektrolytvolumen über die untersuchten Zyklen hinweg konstant blieb, können diese Funktionen auch als Degradationsfunktionen hinsichtlich der Kapazitätsdichte interpretiert werden. Die Degradationsfunktionen wurden in Form von Fitfunktionen ermittelt, für die die üblichen statistischen Kenngrößen zur Güte der Funktionen angegeben werden. Durch die Degradationsfunktion lässt sich auch die Zyklenanzahl bis zum Erreichen der Halbwertsdegradation (vgl. Gleichung Gl. 27) bestimmen.

6.3.1. Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien

Die Degradationstests bei den V FBn wurden bei unterschiedlichen Molaritäten ($1,67 \text{ mol L}^{-1}$ und $0,3 \text{ mol L}^{-1}$) sowie verschiedenen Stromdichten (50 mA cm^{-2} und $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$) durchgeführt.

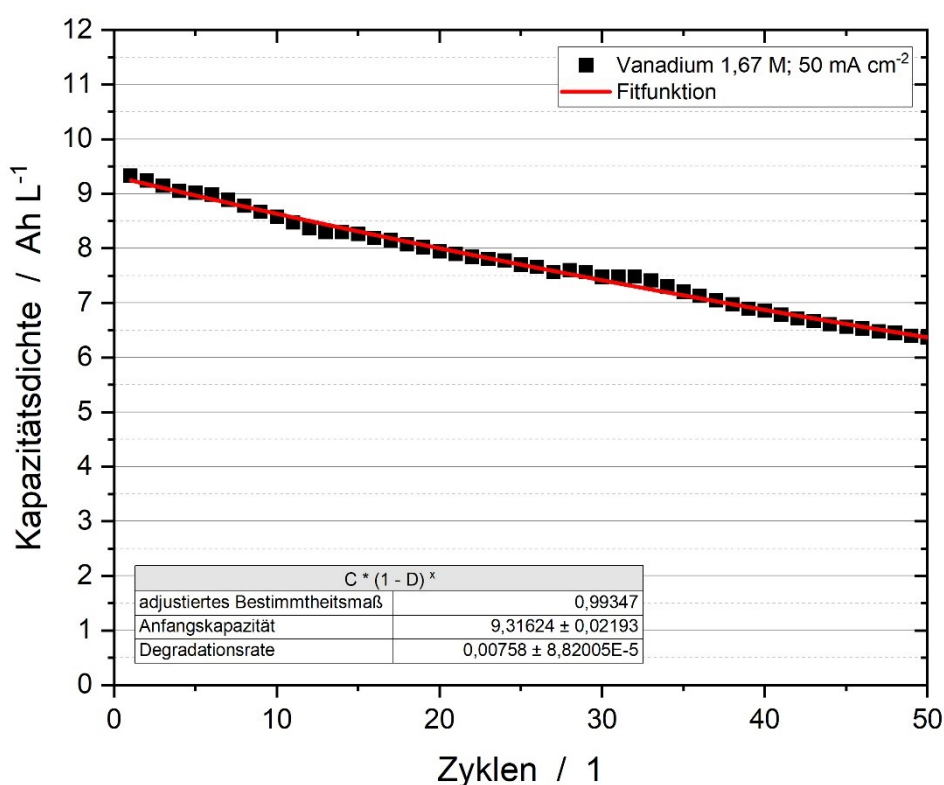


Abbildung 33. Gemessene Degradation der Kapazitätsdichte einer V FB mit einer Konzentration der aktiven Spezies von $1,67 \text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 50 mA cm^{-2} , einschließlich der exponentiellen Fitfunktion der Form $C*(1-D)^x$.

In **Abbildung 33** sind die Kapazitätsdichten der Entladezyklen einer $1,67 \text{ M V FB}$ bei einer konstanten Stromdichte von 50 mA cm^{-2} zwischen dem ersten und dem 50. Zyklus

dargestellt. Es wurde ein kontinuierlicher Abfall der Kapazitätsdichte von 9,33 Ah L⁻¹ auf 6,36 Ah L⁻¹ mit zunehmender Zyklenzahl gemessen.

Auf Basis dieser Messdaten wurde die folgende Fitfunktion für die Kapazitätsdichte KD im jeweiligen Zyklus n ermittelt (vgl. Kapitel 4.2.2):

$$KD_{(V1,67;50)}(n) = 9,31624 \cdot (1 - 0,00758)^n \quad \text{Gl. 35}$$

Diese Funktion erzielte ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 99,35%.

Die aus der Fitfunktion abgeleitete relative Degradationsrate dieser FB in Bezug auf die exponentielle Fitfunktion beträgt im Mittel $0,76 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$, was etwa 90 Zyklen bis zum Erreichen der halben Anfangskapazität entspricht (vgl. Gleichung Gl. 27).

Die Reduzierung der Kapazitätsdichte bei diesem FB-Typ unter den genannten Betriebsbedingungen ist vorwiegend durch irreversible Nebenreaktionen verursacht. Das hohe Bestimmtheitsmaß legt nahe, dass die Degradation zuverlässig durch die abgeleitete Degradationsfunktion (siehe Gleichung Gl. 35) modelliert werden kann.

Ein bedeutender Beitrag zur beobachteten Degradation in V FBn ist auf den Crossovereffekte des Elektrolyten zurückzuführen, bei dem gelöste Vanadium-Ionen infolge eingeschränkter Ionenselektivität der Membran von einer Halbzelle in die andere diffundieren. Dieser Prozess führt zu einer asymmetrischen Verteilung der elektrochemisch aktiven Spezies in den beiden Elektrolytreservoirs und damit zu einer schrittweisen Verringerung der reversibel umsetzbaren Kapazität.^{235,236} Im Fall von V FBn mit identischen Vanadiumelektrolyten in beiden Halbzellen, also einem symmetrischen Elektrolytsystem, lässt sich diese Art der Degradation jedoch weitgehend reversibel durch einfaches Umpumpen der Elektrolyte ausgleichen. Dabei werden die Konzentrationsunterschiede durch Mischung reduziert und das ursprüngliche elektrochemische Gleichgewicht wiederhergestellt.^{235,237}

Im Gegensatz dazu sind andere Degradationsprozesse wie chemische Zersetzung der Vanadiumspezies, z. B. durch Disproportionierungsreaktionen oder irreversible Oxidation bei Grenzspannungen, meist nicht reversibel. Solche Prozesse führen zur Bildung inaktiver oder unlöslicher Nebenprodukte und damit zu einem dauerhaften Verlust aktiver Spezies.^{236,238–240} Weitere irreversible Mechanismen umfassen die chemische und mechanische Alterung der Ionenaustauschmembran unter Einfluss von oxidativen Spezies wie $VO^+(V^V)$, was zu einer Reduktion der Ionenselektivität und erhöhtem Crossover führt.^{241,242} Auch die elektrochemische Alterung der porösen Kohlenstoffelektroden infolge von Adsorption, Strukturänderungen oder elektrochemischer Korrosion trägt zur Langzeitdegradation bei.²⁴³

Die in dieser Arbeit beobachtete Degradation lässt sich durch geeignetes Rebalancing der Elektrolyte insbesondere bei gleichartigen Elektrolyten minimieren. Dadurch ließe sich ein substanzieller Anteil der Verluste, der durch Crossovereffekte hervorgerufen wird, reversibel ausgeglichen. Diese Mitigationsmöglichkeiten sind bei einer Hochskalierung der Degradationsergebnisse zu berücksichtigen, da sie vergleichsweise einfach Kapazitätsverluste minimieren und die Lebensdauer solcher Durchflussbatterien verlängern.

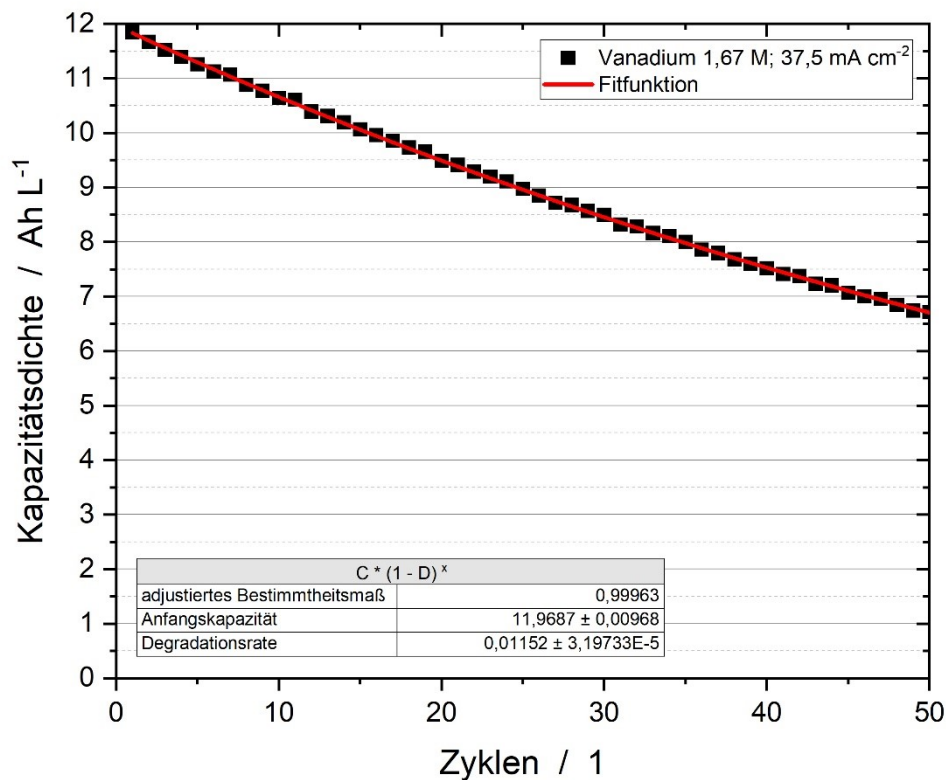


Abbildung 34. Gemessene Degradation der Kapazitätsdichte einer V FB mit einer Konzentration der aktiven Spezies von $1,67 \text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$, einschließlich der exponentiellen Fitfunktion der Form $C^*(1-D)^x$.

Die $1,67 \text{ M V FB}$, die mit einer Stromdichte von $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$ ge- und entladen wurde, wies eine kontinuierliche Abnahme der Kapazitätsdichte von $11,84 \text{ Ah L}^{-1}$ im ersten Zyklus auf $6,71 \text{ Ah L}^{-1}$ im 50. Zyklus auf (vgl. **Abbildung 34**).

Auf Grundlage dieser Daten wurde ebenfalls eine zyklusabhängige Fitfunktion für die Kapazitätsdichte KD ermittelt (vgl. Kapitel 4.2.2):

$$KD(n) = 11,9687 \cdot (1 - 0,01152)^n \quad \text{Gl. 36}$$

Diese Funktion erzielte ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 99,96%.

Die aus der Fitfunktion abgeleitete relative Degradationsrate dieser FB in Bezug auf die exponentielle Fitfunktion beträgt im Mittel $1,15 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$, was etwa 59 Zyklen bis zum Erreichen der halben Anfangskapazität entspricht (vgl. Gleichung Gl. 27).

Die Reduzierung der Kapazitätsdichte bei diesem FB-Typ unter den genannten Betriebsbedingungen ist ebenfalls vorwiegend durch irreversible Nebenreaktionen bedingt. Im Vergleich zur identischen V FB, die mit einer Stromdichte von 50 mA cm^{-2} (vgl. **Abbildung 33**) ge- und entladen wurde, weist die niedrigere Stromdichte eine

höhere Kapazitätsdichte auf, die von anfänglich $11,84 \text{ Ah L}^{-1}$ auf $9,33 \text{ Ah L}^{-1}$ sinkt. Zudem wurde eine stärkere Degradationsrate von $0,76 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$ bei 50 mA cm^{-2} gegenüber $1,15 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$ bei $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$ ermittelt.

Dieser Unterschied ist darauf zurückzuführen, dass die Abschaltspannung bei niedrigeren Stromdichten später erreicht wird, sodass jeder Zyklus länger dauert und mehr Energie elektrochemisch im Elektrolyten aufgenommen werden kann. Gleichzeitig finden bei dieser längeren Zykluszeit mehr Nebenreaktionen statt, was zu einer höheren Degradationsrate führt. Das ebenfalls hohe Bestimmtheitsmaß weist darauf hin, dass sich die Degradation mit hoher Konfidenz durch die abgeleitete Degradationsfunktion (siehe Gleichung Gl. 36) abbilden lässt.

Beim Laden und Entladen mit $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$ wirken sich verschiedene Degradationsmechanismen aus, wobei jedoch ebenfalls von Crossover als dominantem Beitrag zum Kapazitätsverlust auszugehen ist.

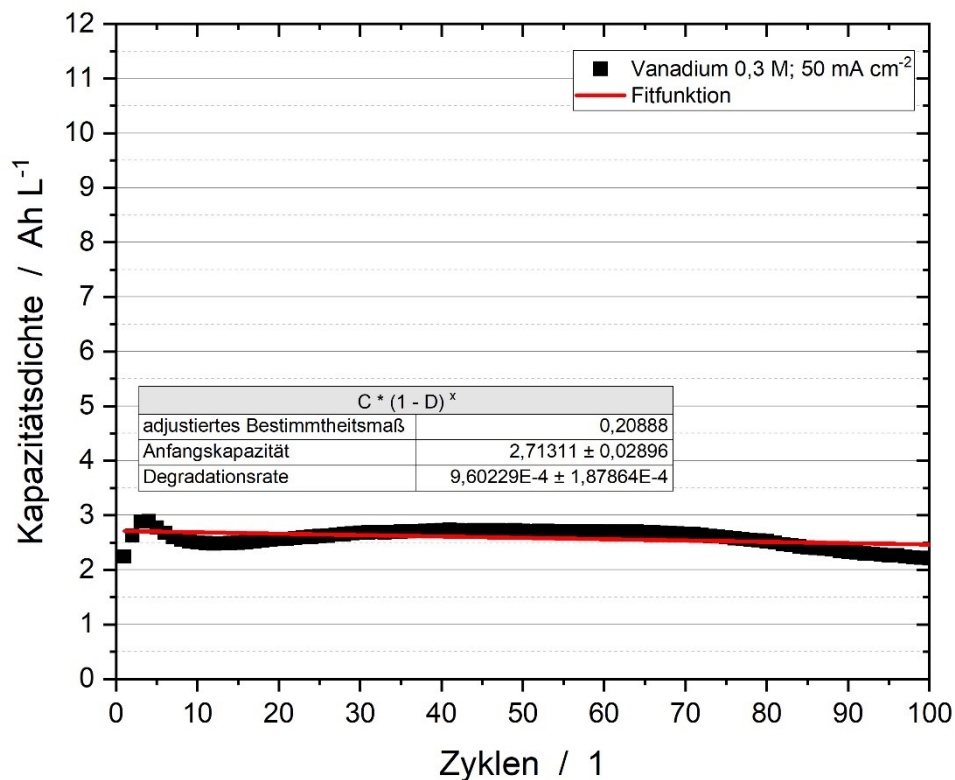


Abbildung 35. Gemessene Degradation der Kapazitätsdichte einer VFB mit einer Konzentration der aktiven Spezies von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 50 mA cm^{-2} , einschließlich der exponentiellen Fitfunktion der Form $C^*(1-D)^x$.

Zur Ermittlung eigener Degradationswerte für V FBn mit einer *Konzentration_{aktive Spezies}*, die mit den O FBn vergleichbar ist, wurde der industriell gefertigte Elektrolyt verdünnt und bei einer Stromdichte von 50 mA cm⁻² ge- und entladen. Dabei wurde eine Konzentration von 0,3 mol L⁻¹ gewählt (vgl. **Tabelle 5**)

Die ermittelten Kapazitätsdichten wiesen während der 100 Zyklen ein annähernd konstantes Verhalten im Wertebereich zwischen 2,21 Ah L⁻¹ und 2,89 Ah L⁻¹ auf. Erst ab dem 55. Zyklus war ein kontinuierlicher Abfall von 2,71 Ah L⁻¹ auf 2,21 Ah L⁻¹ festzustellen (vgl. **Abbildung 35**).

Die daraus abgeleitete zyklusabhängige Fitfunktion für die Kapazitätsdichte *KD* (vgl. Kapitel 4.2.2) lautet:

$$KD_{(V0,3; 50)}(n) = 2,71311 \cdot (1 - 0,000960229)^n \quad \text{Gl. 37}$$

Diese Funktion erreichte ein relativ niedriges adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 20,89%.

Die aus der Fitfunktion abgeleitete relative Degradationsrate dieser FB in Bezug auf die exponentielle Fitfunktion beträgt im Mittel $0,096 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$, was etwa 721 Zyklen bis zum Erreichen der halben Ausgangskapazität entspricht (vgl. Gleichung Gl. 27).

Das vergleichsweise niedrige Bestimmtheitsmaß lässt sich durch die sehr hohe angewandte Stromdichte bei gleichzeitig niedriger *Konzentration_{aktive Spezies}* erklären. Das hohe Energieangebot aufgrund der hohen Stromdichte führt dazu, dass auch ungewollte, aber elektrochemisch reversible Nebenreaktionen im Elektrolyten stattfinden.^{244–246} Aufgrund der Reversibilität dieser Reaktionen kommt es bei den übertragenen Energiemengen nur zu einer geringfügigen elektrolytischen Degradation, was sich in der niedrigen Degradationsrate widerspiegelt. Dieses Verhalten weicht von dem modellhaft angenommenen prozentualen Degradationsverlauf (vgl. Gleichung Gl. 24) ab, was das niedrige Bestimmtheitsmaß zur Folge hat.

Die gemessene Kapazitätsdichte von anfänglich 2,21 Ah L⁻¹ entspricht in ihrer Dimension ungefähr dem Verhältnis der *Konzentration_{aktive Spezies}* von 0,3 mol L⁻¹ zu 1,67 mol L⁻¹. So betrug die Kapazitätsdichte der vergleichend betrachteten V FB mit der höheren Molarität bei einer Stromdichte von 50 mA cm⁻² anfänglich 9,33 Ah L⁻¹. Der Quotient der Kapazitätsdichten ergibt sich zu $\frac{2,21}{9,33} \cong 0,24$, was vergleichsweise ähnlich dem Quotienten der Konzentrationen von $\frac{0,3}{1,67} \cong 0,18$ ist. Die anfängliche Kapazitätsdichte der jeweiligen Durchflussbatterie wird also, wie zu erwarten war, maßgeblich durch die initiale *Konzentration_{aktive Spezies}* bestimmt. Die Kapazitätsreduktion über die Zyklendauer, also die Degradation, wird hingegen durch die im Betrieb gewählte Stromdichte sowie die elektrochemisch wirksame *Konzentration_{aktive Spezies}* der aktiven Spezies beeinflusst. Solche technoökonomisch optimierten Stromdichtefenster für den Betrieb konkreter Durchflussbatterien sollten in weiterführenden wissenschaftlichen Untersuchung betrachtet werden.

6.3.2. MV/TEMPOL Durchflussbatterien

Zur Untersuchung des Degradationsverhaltens wurden MV/TEMPOL FBn mit drei verschiedenen $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ ($0,5\text{ mol L}^{-1}$, $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und $0,1\text{ mol L}^{-1}$) bei konstanten Stromdichten über mehrere Lade- und Entladezyklen untersucht.

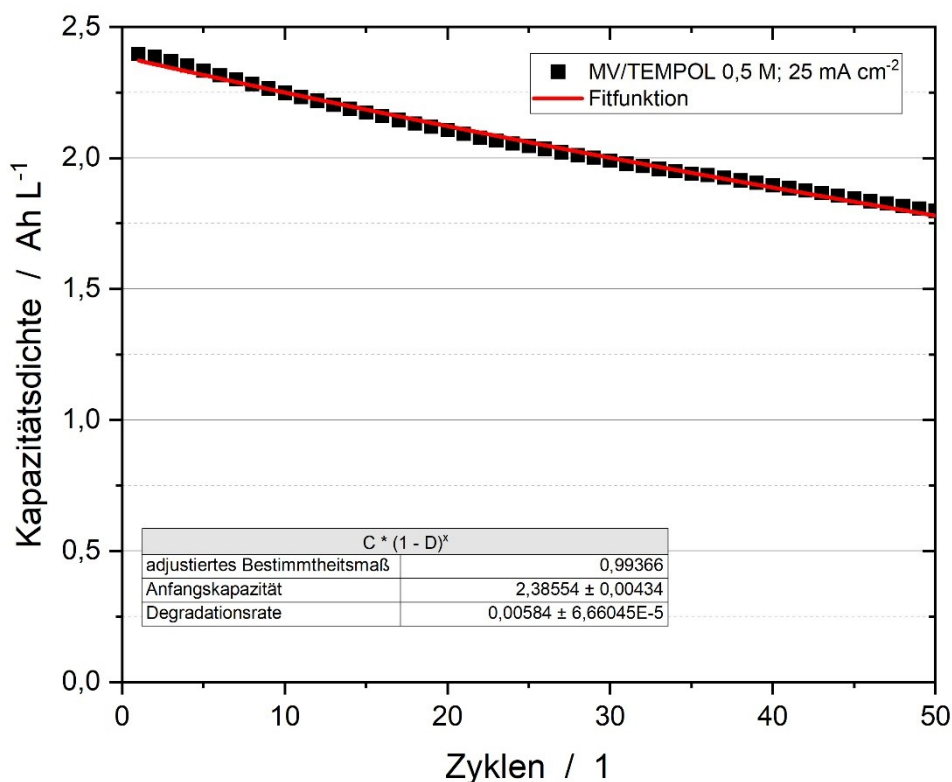


Abbildung 36. Gemessene Degradation der Kapazitätsdichte einer MV/TEMPOL FB mit einer Konzentration der aktiven Spezies von $0,5\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 25 mA cm^{-2} , einschließlich der exponentiellen Fitfunktion der Form $C*(1-D)^x$.

Abbildung 36 stellt die Kapazitätsdichten der Entladezyklen einer $0,5\text{ MV/TEMPOL FB}$ bei einer konstanten Stromdichte von 25 mA cm^{-2} zwischen dem ersten und dem 50. Zyklus dar. Es wurde ein kontinuierlicher Abfall der Kapazitätsdichte von $2,40\text{ Ah L}^{-1}$ auf $1,80\text{ Ah L}^{-1}$ mit zunehmender Zyklenzahl gemessen.

Die daraus abgeleitete Fitfunktion für die Kapazitätsdichte KD im jeweiligen Zyklus n lautet (vgl. Kapitel 4.2.2):

$$KD_{(MV/TEMPOL0,5; 25)}(n) = 2,38554 \cdot (1 - 0,00584)^n \quad \text{Gl. 38}$$

Diese Funktion erzielte ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 99,37%. Die aus der Fitfunktion abgeleitete relative Degradationsrate dieser FB beträgt im Mittel $0,58\frac{\%}{\text{Zyklus}}$,

was etwa 119 Zyklen bis zum Erreichen der halben Anfangskapazität entspricht (vgl. Gleichung Gl. 27).

Die Reduzierung der Kapazitätsdichte bei diesem FB-Typ unter den genannten Betriebsbedingungen wird auf irreversible Nebenreaktionen (z. B. Disproportionierung, Dimerisierung, irreversible Reduktion von MV^{2+} und strukturelle Zersetzung oder Ringöffnung des [4-HO-TEMPO] $^{\cdot+}$ -Radikals) zurückgeführt.^{247–250} Im Rahmen dieser Arbeit ist jedoch keine gezielte Analyse der tatsächlich auftretenden Degradationsmechanismen durchgeführt worden. Daher kann keine quantitative Aussage darüber getroffen werden, in welchem Umfang die genannten Reaktionen im vorliegenden Fall zur Degradation beigetragen haben. Das vergleichsweise hohe Bestimmtheitsmaß weist darauf hin, dass sich die Degradation mit hoher Konfidenz durch die abgeleitete Degradationsfunktion (vgl. Gleichung Gl. 38) beschreiben lässt.

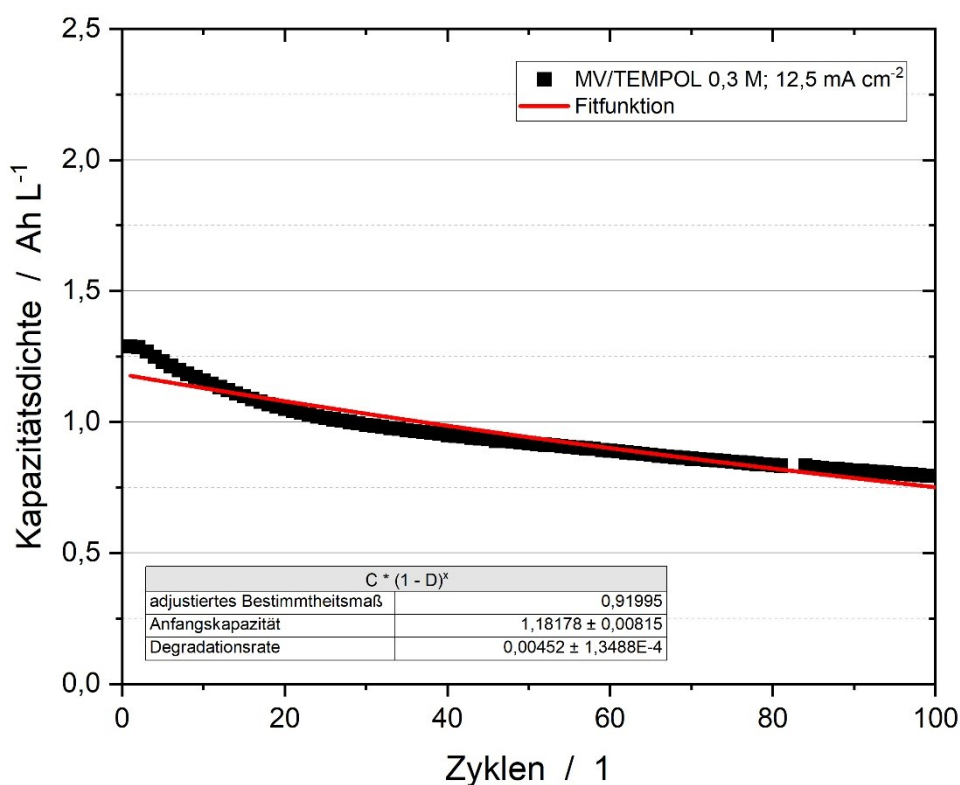


Abbildung 37. Gemessene Degradation der Kapazitätsdichte einer MV/TEMPOL FB mit einer Konzentration der aktiven Spezies von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$, einschließlich der exponentiellen Fitfunktion der Form $C \cdot (1 - D)^x$.

Bei der mit einer Stromdichte von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ ge- und entladene $0,3 \text{ M}$ MV/TEMPOL FB war ein kontinuierlicher Rückgang der Kapazitätsdichte von $1,29 \text{ Ah L}^{-1}$ im ersten Zyklus auf $0,79 \text{ Ah L}^{-1}$ im 100. Zyklus (vgl. **Abbildung 37**) zu beobachten. Bei dieser FB traten im 83. und 84. Zyklus mechanische Probleme mit der Pumpe auf, weshalb diese Messpunkte nicht berücksichtigt wurden.

Für die übrigen Messpunkte wurde ebenfalls eine zyklenabhängige Fitfunktion für die Kapazitätsdichte KD ermittelt (vgl. Kapitel 4.2.2):

$$KD_{(MV/TEMPOL0,3; 12,5)}(n) = 1,18178 \cdot (1 - 0,00452)^n \quad \text{Gl. 39}$$

Diese Funktion erreichte ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 92,00%.

Die aus der Fitfunktion abgeleitete relative Degradationsrate dieser FB beträgt im Mittel $0,45 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$, was etwa 153 Zyklen bis zum Erreichen der halben Anfangskapazität entspricht (vgl. Gleichung Gl. 27).

Die Reduzierung der Kapazitätsdichte bei diesem FB-Typ unter den genannten Betriebsbedingungen wird auch hier überwiegend auf irreversible Nebenreaktionen zurückgeführt. Im Vergleich zur 0,5 M MV/TEMPOL FB (vgl. **Abbildung 36**), die bei der doppelt so hohen Stromdichte von 25 mA cm^{-2} ge- und entladen wurde, wies diese FB ähnliche Degradationseigenschaften auf. Dies deutet darauf hin, dass die niedrigere *Konzentration_{aktive Spezies}* die nebenwirkungsbedingte Degradation verringert, da weniger aktive Spezies zur Verfügung steht. Gleichzeitig wird die längere Reaktionsdauer je Zyklus aufgrund der geringeren Stromdichte teilweise durch die reduzierte *Konzentration_{aktive Spezies}* ausgeglichen.

Das dennoch vergleichsweise hohe Bestimmtheitsmaß bestätigt, dass sich auch diese Degradation mit hoher Konfidenz durch die abgeleitete Degradationsfunktion (siehe Gleichung Gl. 39) modellieren lässt.

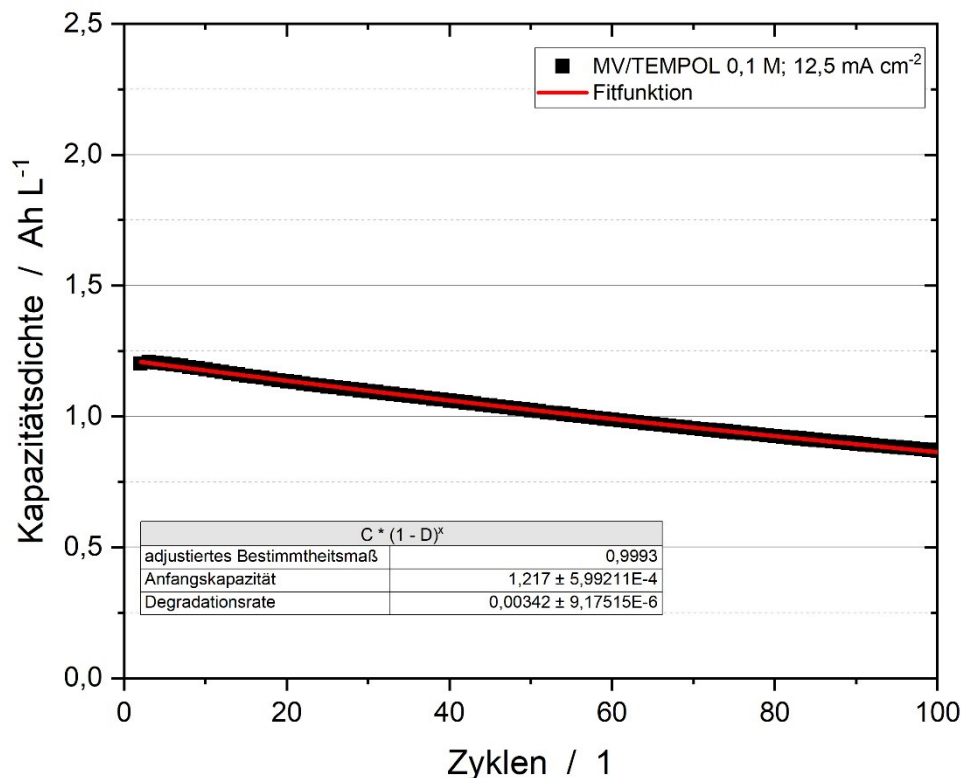


Abbildung 38. Gemessene Degradation der Kapazitätsdichte einer MV/TEMPOL FB mit einer Konzentration der aktiven Spezies von 0,1 mol L⁻¹ und einer Stromdichte von 12,5 mA cm⁻², einschließlich der exponentiellen Fitfunktion der Form $C^*(1-D)^x$.

Eine 0,1 M MV/TEMPOL FB wurde mit einer Stromdichte von 12,5 mA cm⁻² ge- und entladen. Auch hier war ein kontinuierlicher Rückgang der Kapazitätsdichte von 1,20 Ah L⁻¹ im zweiten Zyklus bis auf 0,87 Ah L⁻¹ im 100. Zyklus (vgl. **Abbildung 38**) zu beobachten. Im ersten Zyklus traten mechanische Probleme mit der Pumpe auf, weshalb dieser Messpunkt nicht berücksichtigt wurde.

Für die Zyklen zwei bis 100 wurde eine zyklusabhängige Fitfunktion für die Kapazitätsdichte KD ermittelt (vgl. 4.2.2):

$$KD_{(MV/TEMPOL0,1; 12,5)}(n) = 1,217 \cdot (1 - 0,00342)^n \quad \text{Gl. 40}$$

Diese Funktion erreichte ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 99,93%. Die aus der Fitfunktion abgeleitete relative Degradationsrate dieser FB beträgt im Mittel $0,34 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$, was etwa 202 Zyklen bis zum Erreichen der halben Anfangskapazität entspricht (vgl. Gleichung Gl. 27).

Die Reduzierung der Kapazitätsdichte bei diesem FB-Typ unter den genannten Betriebsbedingungen ist ebenfalls vorwiegend auf irreversible Nebenreaktionen zurückzuführen. Die Degradationsrate liegt im selben Bereich wie die der beiden anderen

MV/TEMPOL FBn. Das hohe Bestimmtheitsmaß deutet darauf hin, dass sich auch für diese FB die Degradation mit hoher Konfidenz durch die abgeleitete Degradationsfunktion (siehe Gleichung Gl. 40) modellieren lässt.

6.3.3. AQDS/BQDS Durchflussbatterien

Das Degradationsverhalten der AQDS/BQDS FBn wurde für die höchste verwendete $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ bei konstanten Stromdichten über mehrere Lade- und Entladezyklen untersucht.

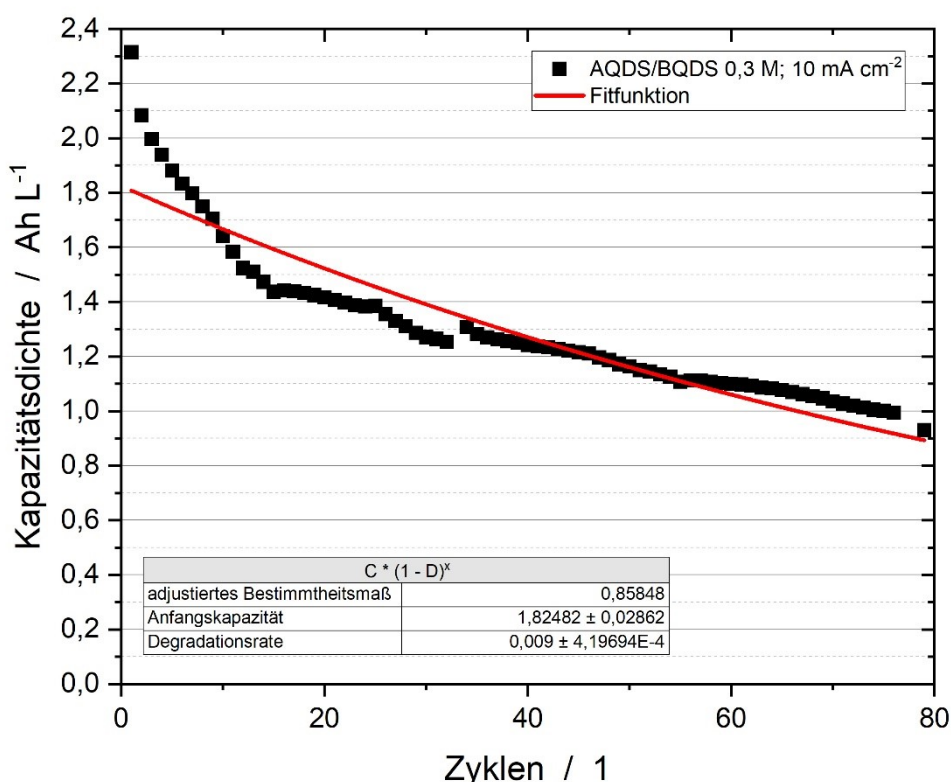


Abbildung 39. Gemessene Degradation der Kapazitätsdichte einer AQDS/BQDS FB mit einer Konzentration der aktiven Spezies von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 10 mA cm^{-2} , einschließlich der exponentiellen Fitfunktion der Form $C \cdot (1 - D)^x$.

In **Abbildung 39** sind die Kapazitätsdichtemessungen einer $0,3\text{ M}$ AQDS/BQDS FB bei einer Stromdichte von 10 mA cm^{-2} dargestellt. Auch bei dieser O FB war eine tendenziell sinkende Kapazitätsdichte über die Lade- und Entladezyklen, von $2,31\text{ Ah L}^{-1}$ im ersten Zyklus bis auf $1,03\text{ Ah L}^{-1}$ im 80. Zyklus (vgl. **Abbildung 39**) zu beobachten.

Einige Zyklen wiesen mechanische Probleme mit der Pumpe auf, weshalb diese Messpunkte nicht berücksichtigt wurden. Die zyklusabhängige Fitfunktion für die Kapazitätsdichte KD ergab sich wie folgt (vgl. Kapitel 4.2.2):

$$KD_{(AQDS/BQDS0,3; 10)}(n) = 1,82482 \cdot (1 - 0,009)^n$$

Gl. 41

Diese Funktion erreichte ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 85,85%. Die aus der Fitfunktion abgeleitete relative Degradationsrate dieser FB beträgt im Mittel $0,9 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$, was ca. 76 Zyklen bis zum Erreichen der halben Anfangskapazität entspricht (vgl. Gleichung Gl. 27).

Zu Beginn wies dieser FB-Typ einen deutlich höheren Abfall der Kapazitätsdichte als im späteren Verlauf der Messungen auf. Dieses Verhalten lässt sich durch die vergleichsweise hohe *Konzentration_{aktive Spezies}* für diesen FB-Typ sowie durch die noch nicht optimale Zusammensetzung des Elektrolyten bei ausreichender Stromdichte erklären. Insbesondere in den ersten etwa 10 Zyklen war ein höherer Gradient zu beobachten, der sich im späteren Verlauf sichtbar abflachte.

Es wird davon ausgegangen, dass die Reduzierung der Kapazitätsdichte bei diesem FB-Typ vorwiegend durch irreversible Nebenreaktionen verursacht ist. Trotz der niedrigeren Stromdichte von 10 mA cm^{-2} gegenüber den $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ bei den MV/TEMPOL FB mit gleicher Konzentration ($1,29 \text{ Ah L}^{-1}$) waren bei diesem O FB-Typ zu Beginn höhere Kapazitätsdichten ($2,31 \text{ Ah L}^{-1}$) zu beobachten.

Das weiterhin hohe Bestimmtheitsmaß deutet darauf hin, dass sich die Degradation dieses FB-Typs mit hoher Konfidenz durch die abgeleitete Degradationsfunktion (vgl. Gleichung Gl. 41) beschreiben lässt.

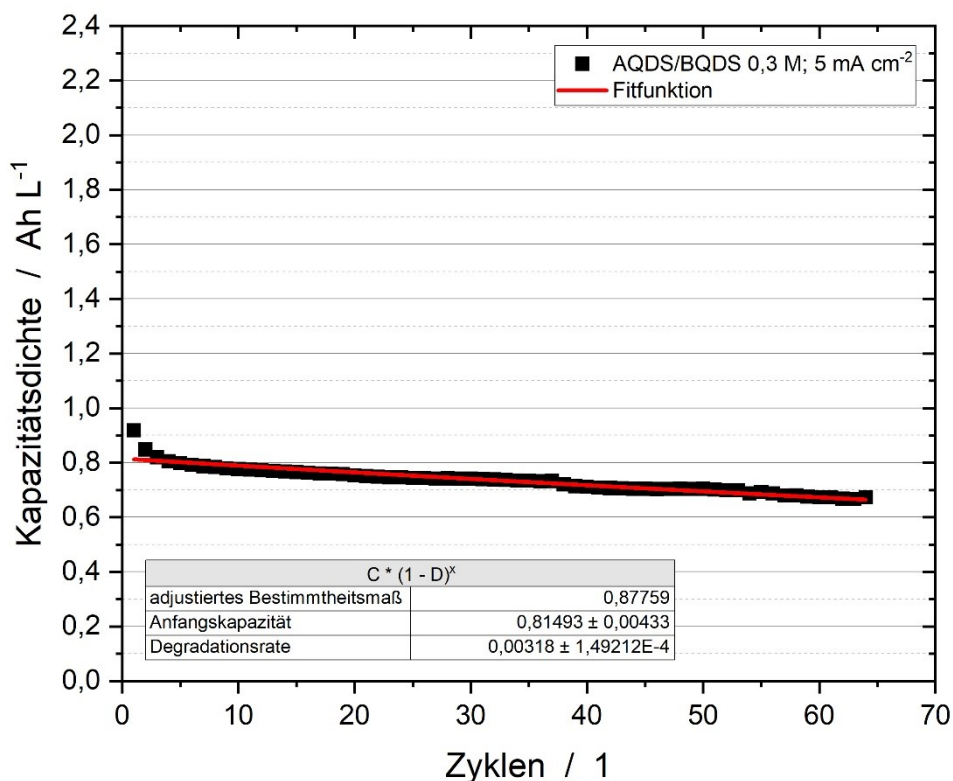


Abbildung 40. Gemessene Degradation der Kapazitätsdichte einer AQDS/BQDS FB mit einer Konzentration der aktiven Spezies von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 5 mA cm^{-2} , einschließlich der exponentiellen Fitfunktion der Form $C^*(1-D)^x$.

Eine weitere Messung wurde mit einer Stromdichte von 5 mA cm^{-2} an einer $0,3 \text{ M}$ AQDS/BQDS FB durchgeführt. Es wurde eine kontinuierlich sinkende Kapazitätsdichte von $0,92 \text{ Ah L}^{-1}$ im ersten Zyklus bis auf $0,67 \text{ Ah L}^{-1}$ im 64. Zyklus festgestellt (vgl. **Abbildung 40**).

Die zyklenabhängige Fitfunktion für die Kapazitätsdichte KD lautet (vgl. Kapitel 4.2.2):

$$KD_{(AQDS/BQDS0,3;5)}(n) = 0,81493 \cdot (1 - 0,00318)^n \quad \text{Gl. 42}$$

Diese Funktion erreichte ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß von 87,76%. Die aus der Fitfunktion abgeleitete relative Degradationsrate dieser FB beträgt im Mittel $0,32 \frac{\%}{\text{Zyklus}}$, was ca. 217 Zyklen bis zum Erreichen der halben Anfangskapazität entspricht (vgl. Gleichung Gl. 27).

Im Vergleich zur identisch konzentrierten FB mit der doppelten Stromdichte war bei dieser Messung eine geringere Degradation festzustellen, jedoch war die zu Beginn erreichte Kapazitätsdichte auch nur etwa halb so hoch. Dies lässt sich dadurch erklären, dass bei der niedrigeren Stromdichte schon innerhalb der Halbzellen Reaktionen der Entladung stattgefunden haben, da mehr Zeit für diese Reaktionen zur Verfügung stand.

Auch kann die Reduzierung der Kapazitätsdichte bei diesem FB-Typ bei den genannten Betriebsbedingungen durch das Auftreten irreversibler Nebenreaktionen erklärt werden. Die niedrigere Stromdichte von 5 mA cm^{-2} beim Laden und Entladen führt zu einer niedrigeren Kapazitätsdichte, die zu Beginn nur $0,92 \text{ Ah L}^{-1}$ betrug, im Vergleich zu $2,31 \text{ Ah L}^{-1}$ bei derselben FB mit der doppelt so hohen Stromdichte.

Das ebenfalls hohe Bestimmtheitsmaß ist ein Hinweis, dass sich die Degradation auch für diesen FB-Typ mit hoher Konfidenz durch die abgeleitete Degradationsfunktion (siehe Gleichung Gl. 42) abbilden lässt.

6.3.4. Nutzungsfunktionen der degradationsuntersuchten Durchflussbatterien

Die Degradationsverhalten der verschiedenen untersuchten FBn ermöglichen es, für jede dieser Batterien eine Nutzungsfunktion abzuleiten. Diese Funktion beschreibt, wie sich die Kosten für den Betrieb der jeweiligen FB über die Nutzungszyklen hinweg entwickeln, wenn nach Erreichen der Halbwertdegradation ein vollständiger Elektrolytaustausch durchgeführt wird.

Die Ausgangsdaten für die Ableitung dieser Nutzungsfunktionen sind in **Tabelle 9** zusammengefasst.

Tabelle 9. Ausgangsdaten für die Nutzungsfunktionen der in Degradationstests untersuchten FBn (V FB 1,67 M, V FB 0,3 M, MV/TEMPOL FB 0,5 M, MV/TEMPOL FB 0,3 M, MV/TEMPOL 0,1 M und AQDS/BQDS FB 0,3 M).

Ausgangsdaten für Nutzungsfunktionen der Durchflussbatterien				
Durchflussbatterie		Elektrolytkosten $K_{\text{Elektrolyt}}$ [€]	Anfangs- kapazitäts- dichte [Ah L ⁻¹]	Zyklusanzahl bis zum Erreichen der Halbwertdegradation (HWDZ) [n]
V FB	1,67 M 50 mA cm ⁻²	57,6	9,31624	90
	1,67 M 37,5 mA cm ⁻²	57,6	11,9687	59
	0,3 M 50 mA cm ⁻²	11,66	2,71311	721
MV/ TEMPOL FB	0,5 M 25 mA cm ⁻²	405,22	2,38554	119
	0,3 M 12,5 mA cm ⁻²	251,26	1,18178	153
	0,1 M 12,5 mA cm ⁻²	97,3	1,217	202
AQDS/ BQDS FB	0,3 M 10 mA cm ⁻²	60,72	1,82482	76
	0,3 M 5 mA cm ⁻²	60,72	0,81493	217

In einem ersten Schritt werden die *CAPEX* zyklenspezifisch berechnet, wobei die Herstellungskosten der Elektrolyten für die jeweilige FB berücksichtigt werden (vgl. Kapitel 6.2.2, 6.2.3 und 6.2.4). Die für jede FB ermittelte Zyklusanzahl bis zum Erreichen der Halbwertdegradation (*HWDZ*) dient dabei als Grundlage für die Erstellung der Kostenfunktion. Diese Kostenfunktion gibt an, wie sich die Investitionskosten im Betrieb der FB über die Nutzungszyklen hinweg entwickeln, basierend auf der Anzahl der Zyklen, die erforderlich sind, um die *HWDZ* zu erreichen und einen vollständigen Elektrolytaustausch vorzunehmen.

Die Entscheidung, in diesem Modellansatz einen vollständigen Elektrolytaustausch nach Erreichen der *HWDZ* anzunehmen, basiert auf methodischen und technologischen Überlegungen: Sie ermöglicht eine standardisierte und vergleichbare Bewertung der Wirtschaftlichkeit verschiedener Batteriesysteme und stellt die Ergebnisse inklusive der Diskussion derselben dar. Während V FBn in der Praxis selten einen vollständigen

Elektrolytaustausch erfordern, da Rebalancing-Strategien wie Umpumpen oder elektrochemische Rekonditionierung zur Wiederherstellung der Kapazität^{251,252} eingesetzt werden können, ist diese Strategie bei organischen Redoxsystemen meist nicht umsetzbar.

Organische Elektrolyte, wie sie beispielsweise in den getesteten MV/TEMPOL FBn oder AQDS/BQDS FBn verwendet werden, sind häufig anfällig für irreversible Degradationsprozesse (z.B. durch Zersetzung, Nebenreaktionen oder instabile electrochemische Zyklen). Diese Prozesse führen zu einem dauerhaften Kapazitätsverlust, der nicht durch einfaches Rebalancing rückgängig gemacht werden kann.^{115,253–255} Ein vollständiger Austausch des Elektrolyten nach Erreichen der *HWDZ* ist daher bei diesen Systemen sowohl aus technischer als auch wirtschaftlicher Sicht ein realistischeres und oft notwendiges Szenario.

Zudem ermöglicht diese Modellannahme eine klar strukturierte und quantifizierbare Kostenfunktion über die Lebensdauer der Batterie. Die zyklenspezifische *CAPEX* lässt sich auf Basis der Anzahl der Zyklen bis zur *HWDZ* einfach berechnen und in techno-ökonomischen Analysen anwenden. Dadurch wird eine konsistente Bewertung aller untersuchten Systeme ermöglicht, unabhängig von deren technologischer Reife oder Stabilität.

Wird das Modell auf eine Anlage im industriellen Maßstab angewendet, so kann es flexibel an die jeweils gewählten Strategien zur Degradationsminimierung angepasst werden (z. B. durch Integration von Rebalancingmaßnahmen bei V FBn oder durch Verwendung von stabileren oder regenerierbaren organischen Elektrolyten). Damit bleibt die Modellstruktur erhalten, während die Inputparameter auf den tatsächlichen Betrieb angepasst werden können.

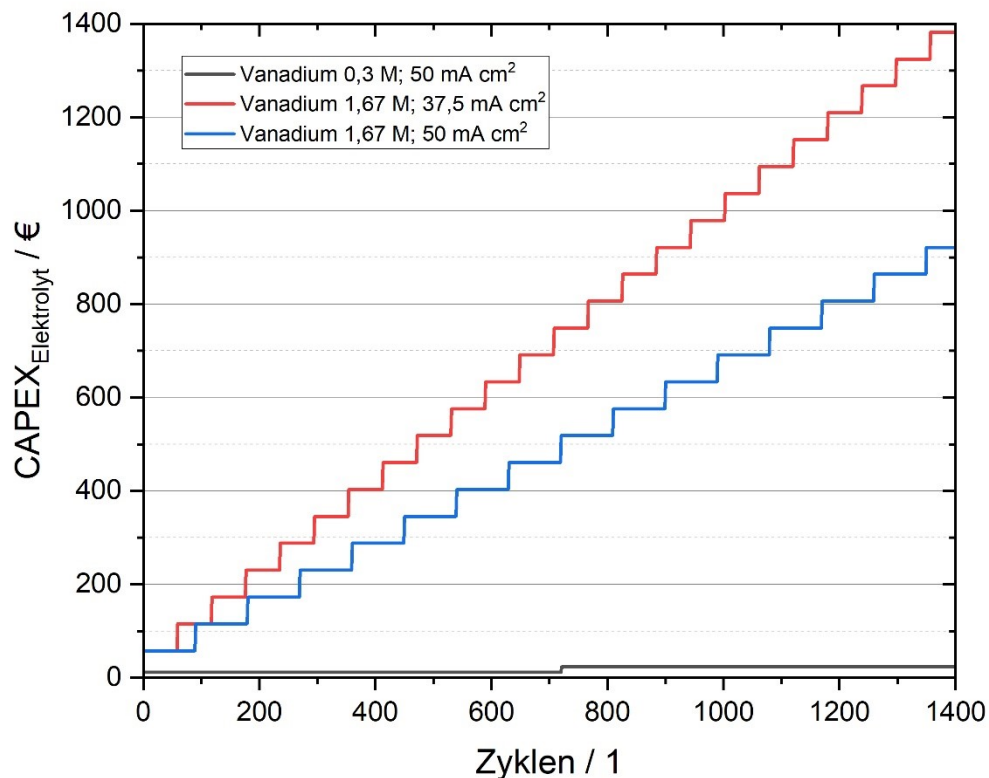


Abbildung 41. Darstellung der zyklenabhängigen Kostenfunktion aufgrund der Degradation der Elektrolyten ($CAPEX_{Elektrolyt}$) für V FBn mit einer Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 50 mA cm^{-2} , einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von $37,5\text{ mA cm}^{-2}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 50 mA cm^{-2} .

Abbildung 41 stellt die stufenweise ansteigenden Herstellungskosten des Elektrolyten ($CAPEX_{Elektrolyt}$) für die V FBn dar, die auf den aus den Nutzungsfunktionen abgeleiteten *HWDZ* basieren. Die Annahme, dass der Elektrolyt nach Erreichen der *HWDZ* erneuert werden muss, erklärt den stufenweisen Verlauf der Funktion.

Die $0,3\text{ M V FB}$ weist zu Beginn $CAPEX_{Elektrolyt}$ von $11,66\text{ €}$ auf, während die $1,67\text{ M V FBn}$ anfängliche $CAPEX_{Elektrolyt}$ in Höhe von $57,60\text{ €}$ haben, was der Erhöhung der Kosten nach Erreichen der *HWDZ* entspricht.

Da die *HWDZ* auch von der verwendeten Stromdichte abhängt, ergibt sich für V FBn mit gleicher $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ eine unterschiedliche Kostensteigerung. Die $CAPEX_{Elektrolyt}$ der $1,67\text{ M V FB}$, die mit $37,5\text{ mA cm}^{-2}$ ge- und entladen wurde, steigen innerhalb von 1400 Zyklen von $57,60\text{ €}$ auf $1382,40\text{ €}$, was 23 Erneuerungen des Elektrolyten entspricht. Bei der $1,67\text{ M V FB}$, die mit 50 mA cm^{-2} betrieben wurde, ist eine Erhöhung der $CAPEX_{Elektrolyt}$ von $57,60\text{ €}$ auf $921,60\text{ €}$ zu beobachten, was 15 Erneuerungen des Elektrolyten entspricht.

Die $CAPEX_{Elektrolyt}$ der 0,3 M V FB steigt von 11,66 € auf 23,32 €, was einer Erneuerung des Elektrolyten entspricht.

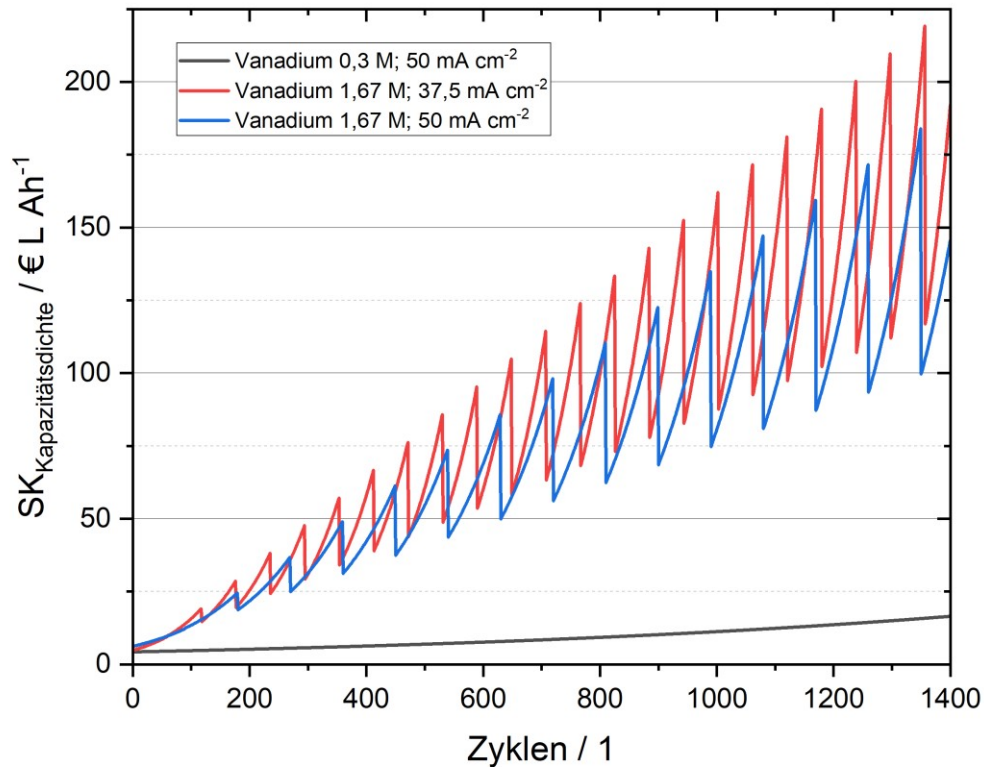


Abbildung 42. Darstellung der zyklenspezifischen Nutzungsfunktion aufgrund der Degradation der Elektrolyten und der Auswirkung auf die spezifischen Kosten der Kapazitätsdichte ($SK_{Kapazitätsdichte}$) für V FBn mit einer Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 50 mA cm^{-2} , einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von $37,5\text{ mA cm}^{-2}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 50 mA cm^{-2} .

Im Gegensatz zum stufenweisen Verhalten der $CAPEX_{Elektrolyt}$ degradieren die Kapazitätsdichten kontinuierlich, wobei sie nach der Erneuerung des Elektrolyten wieder den ursprünglichen Wert erreichen. Die Kombination der Kostenfunktion mit dem Degradationsverhalten des Elektrolyten ergibt die Nutzungsfunktion, die die spezifischen Kapazitätsdichtekosten über die Zyklen hinweg darstellt.

Abbildung 42 bildet die unterschiedlichen Ausgangswerte und Steigungen der spezifischen Kapazitätsdichtekosten ($SK_{Kapazitätsdichte}$) für die verschiedenen FBn ab, die mit unterschiedlichen Stromdichten betrieben wurden.

Die 0,3 M V FB, die mit 50 mA cm^{-2} betrieben wurde, weist die niedrigsten $SK_{\text{Kapazitätsdichte}}$ auf, beginnend mit $4,30 \text{ € L Ah}^{-1}$, die in den betrachteten 1400 Zyklen auf $16,47 \text{ € L Ah}^{-1}$ ansteigen. Die 1,67 M V FB, die mit $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$ betrieben wurde, hatte einen Anfangswert von $4,87 \text{ € L Ah}^{-1}$, der nach 1400 Zyklen auf $185,74 \text{ € L Ah}^{-1}$ ansteigt. Bei der V FB gleicher Konzentration, die mit 50 mA cm^{-2} betrieben wurde, steigen die $SK_{\text{Kapazitätsdichte}}$ von anfänglich $6,23 \text{ € L Ah}^{-1}$ nach 1400 Zyklen auf $142,53 \text{ € L Ah}^{-1}$.

Die niedrige Kapazitätsdichte der 0,3 M V FB ergibt sich direkt durch die geringere $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ erklären, was zu einer geringeren Energiedichte und somit zu höheren spez. fischen Kosten pro Amperestunde führt.¹¹⁸ Zusätzlich beeinflussen Konzentrationseffekte wie verminderte Ionenleitfähigkeit und verstärkte Nebenreaktionen bei höheren Konzentrationen die Langzeitstabilität und Betriebskosten.⁹⁵ Daraus ergibt sich ein Kompromiss zwischen Elektrolytkonzentration und Lebensdauer, der eine Herausforderung für die wirtschaftliche Skalierung der V FBn darstellt.²⁵⁶ Zukünftige Forschung sollte sich daher auf die Optimierung der Elektrolytzusammensetzung sowie die Entwicklung selektiver und langlebiger Membranen konzentrieren, um sowohl die Energiedichte als auch die Zyklusfestigkeit zu verbessern.²⁵⁷ Zudem können verbesserte Katalysatorsysteme die Reaktionskinetik erhöhen und die maximale Stromdichte ohne Effizienzverlust steigern, was die Gesamtkosten weiter senkt.²⁵⁸

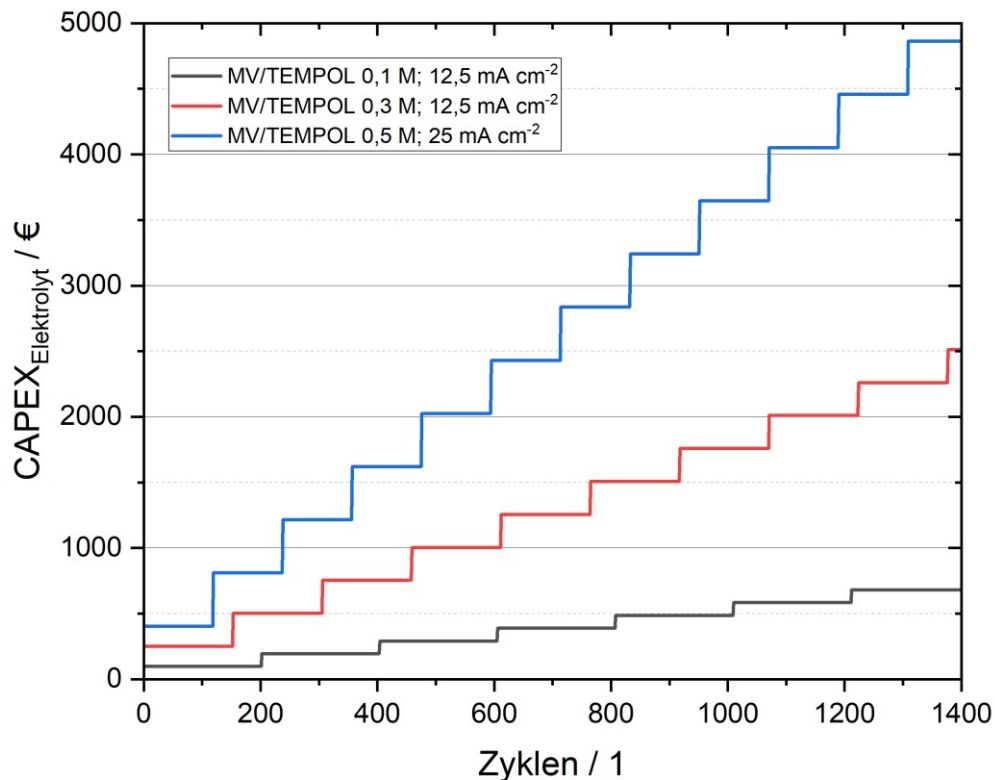


Abbildung 43. Darstellung der zyklensabhängigen Kostenfunktion aufgrund der Degradation der Elektrolyten ($CAPEX_{Elektrolyt}$) für MV/TEMPOL FBn mit einer Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) von $0,1\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$, einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,5\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 25 mA cm^{-2} .

Die stufenweise ansteigenden $CAPEX_{Elektrolyt}$ für die MV/TEMPOL FBn sind in **Abbildung 43** dargestellt. Der Stufencharakter der Funktion erklärt sich durch die Annahme der wiederkehrenden Notwendigkeit zur Erneuerung der Elektrolyten.

Zu Beginn lagen die $CAPEX_{Elektrolyt}$ für die $0,1\text{ M}$ MV/TEMPOL FB bei $97,30\text{ €}$, für die $0,3\text{ M}$ MV/TEMPOL FB bei $251,26\text{ €}$ und für die $0,5\text{ M}$ MV/TEMPOL FB bei $405,22\text{ €}$. Diese Werte entsprechen jeweils der Erhöhungsstufe nach Erreichen der $HWDZ$.

In Abhängigkeit von der verwendeten Stromdichte ergeben sich unterschiedliche Steigungen. Die $CAPEX_{Elektrolyt}$ der $0,1\text{ M}$ MV/TEMPOL FB, die mit $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ betrieben wurde, steigen im Betrachtungszeitraum von 1400 Zyklen von $97,30\text{ €}$ auf $681,10\text{ €}$, was 6 Erneuerungen der Elektrolyten entspricht. Bei der $0,3\text{ M}$ MV/TEMPOL FB, die ebenfalls mit $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ betrieben wurde, war eine Erhöhung der $CAPEX_{Elektrolyt}$ von $251,26\text{ €}$ auf $2512,60\text{ €}$ zu beobachten, was 9 Erneuerungen der Elektrolyten entspricht. Die $CAPEX_{Elektrolyt}$ der

0,5 M MV/TEMPOL FB steigen von 405,22 € auf 4862,64 €, was 11 Erneuerungen der Elektrolyten entspricht.

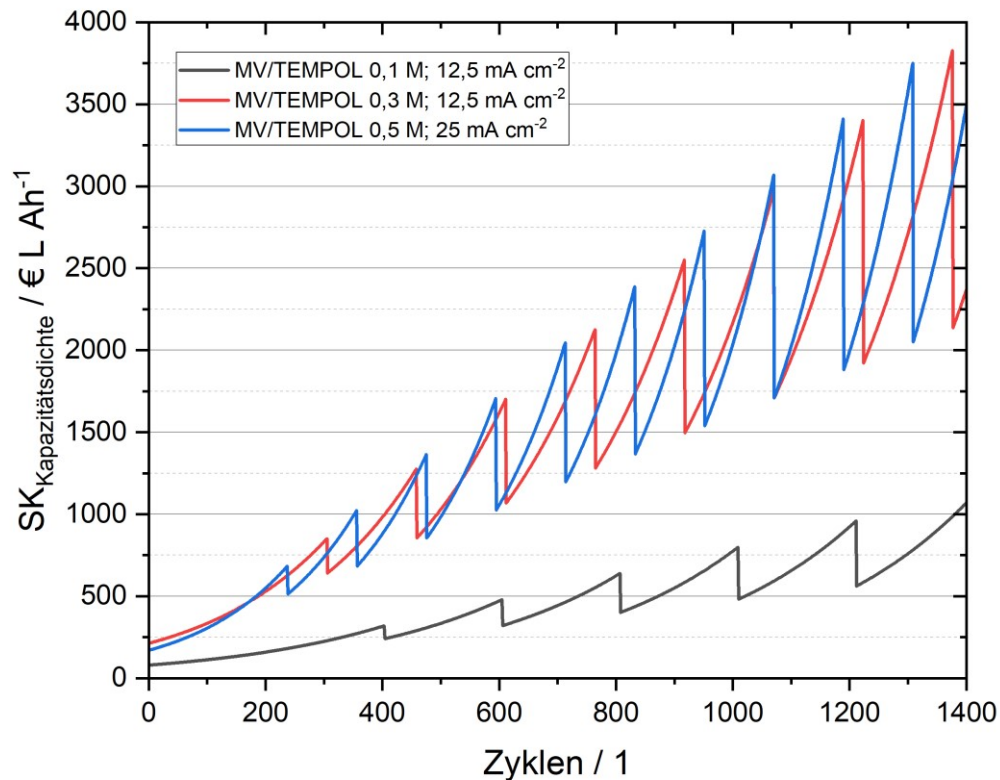


Abbildung 44. Darstellung der zyklusabhängigen Nutzungsfunktion aufgrund der Degradation der Elektrolyten und der Auswirkung auf die spezifischen Kosten der Kapazitätsdichte ($SK_{Kapazitätsdichte}$) für MV/TEMPOL FBn mit einer Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) von 0,1 mol L⁻¹ und einer Stromdichte von 12,5 mA cm⁻², einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von 0,3 mol L⁻¹ und einer Stromdichte von 12,5 mA cm⁻² und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von 0,5 mol L⁻¹ und einer Stromdichte von 25 mA cm⁻².

Für die MV/TEMPOL FBn gilt grundsätzlich der gleiche Zusammenhang zwischen den $CAPEX_{Elektrolyt}$ und den $SK_{Kapazitätsdichte}$ wie für die V FBn.

Die Nutzungsfunktionen der untersuchten FBn sind in **Abbildung 44** dargestellt. Bei der mit 12,5 mA cm⁻² betriebenen 0,1 M MV/TEMPOL FB steigen die $SK_{Kapazitätsdichte}$ von anfänglich 80,23 € L Ah⁻¹ auf 1058,42 € L Ah⁻¹ im Verlauf von 1400 Zyklen. In der gleichen Anzahl von Zyklen steigen die $SK_{Kapazitätsdichte}$ der 0,3 M MV/TEMPOL FB mit gleicher Stromdichte von 213,58 € L Ah⁻¹ auf 2338,32 € L Ah⁻¹. Bei der mit 25 mA cm⁻² betriebene 0,5 M MV/TEMPOL FB erhöhen sich die $SK_{Kapazitätsdichte}$ von anfänglich 170,86 € L Ah⁻¹ auf 3433,02 € L Ah⁻¹.

Demnach erreicht auch bei den MV/TEMPOL FBn die am niedrigsten konzentrierte FB die geringsten $SK_{Kapazitätsdichte}$.

Die insgesamt hohen $SK_{Kapazitätsdichte}$ der MV/TEMPOL FBn lassen sich primär durch die vergleichsweise hohen Herstellungskosten der organischen Elektrolyte sowie deren begrenzte Stabilität erklären.²⁵⁹ Im Unterschied zu metallbasierten Elektrolyten sind organische Elektrolyten wie TEMPOL anfälliger für irreversible Degradationsprozesse, insbesondere infolge von Radikalzerfall und Nebenreaktionen mit Lösungsmittel oder Membranmaterialien.²⁶⁰ Dies führt zu einer deutlich reduzierten Zyklusfestigkeit und damit zu häufigeren Maßnahmen zur Elektrolytauffrischung, was sich in einem Anstieg der Betriebskosten niederschlägt.²⁶¹

Zudem limitiert die eingeschränkte elektrochemische Stabilitätsspannung der organischen Verbindungen das nutzbare Spannungsfenster, was die Energiedichte der Batterien weiter reduziert. Der beobachtete Kostenanstieg bei zunehmender Stromdichte lässt sich auf verstärkte elektrochemische Belastung der aktiven Spezies zurückführen, wodurch Degradationsprozesse beschleunigt werden.²⁶² Trotz des Potenzials organischer Durchflussbatterien hinsichtlich Nachhaltigkeit und Elementverfügbarkeit zeigt sich, dass ohne gezielte molekulare Stabilisierung und verbesserte Zellarchitektur eine wirtschaftliche Konkurrenzfähigkeit zu V FBn derzeit nur schwer erreichbar ist.

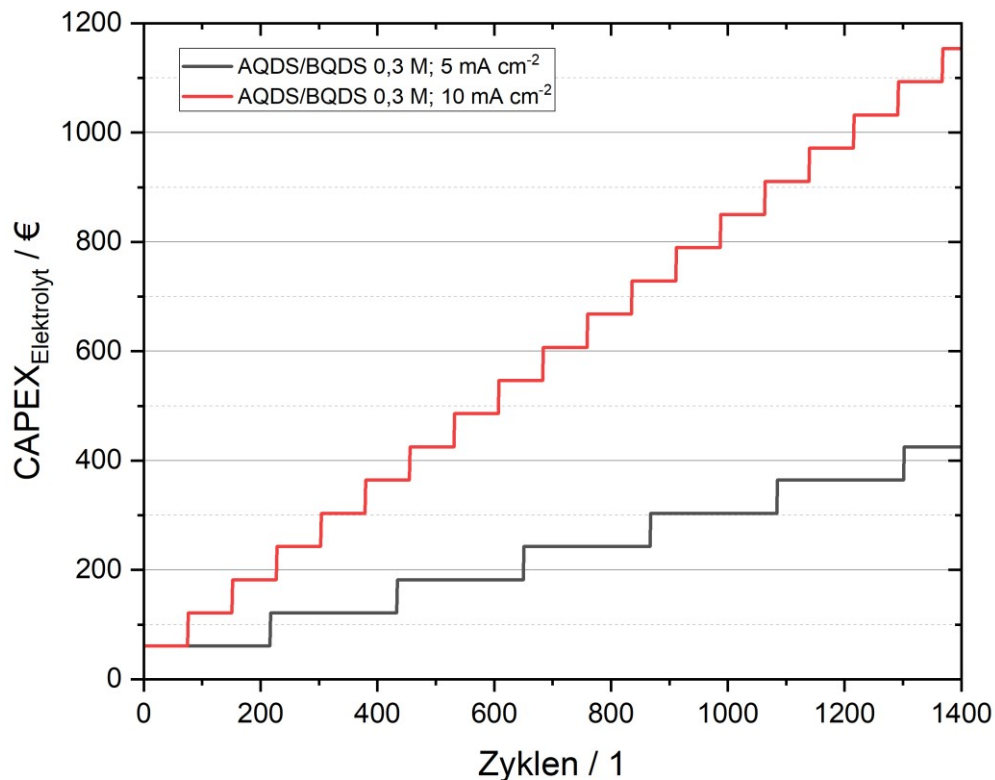


Abbildung 45. Darstellung der zyklensabhängigen Kostenfunktion aufgrund der Degradation der Elektrolyten ($CAPEX_{Elektrolyt}$) für AQDS/BQDS FBn mit einer Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 5 mA cm^{-2} und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 10 mA cm^{-2} .

Für die AQDS/BQDS FBn sind die stufenweise ansteigenden $CAPEX_{Elektrolyt}$ in **Abbildung 45** dargestellt. Die Annahme, dass die Elektrolyte regelmäßig erneuert werden müssen, führt zu dem stufenweisen Verlauf der Funktion.

Der Ausgangswert der $CAPEX_{Elektrolyt}$ und die Erhöhung nach Erreichen der HWDZ bei beiden $0,3\text{ M}$ AQDS/BQDS FBn beträgt $60,72\text{ €}$.

Die Abhängigkeit der $CAPEX_{Elektrolyt}$ von der verwendeten Stromdichte wird durch die unterschiedlichen Steigungen der konzentrationsgleichen FBn deutlich. Bei der $0,3\text{ M}$ AQDS/BQDS FB, die mit 5 mA cm^{-2} betrieben wurde, steigen die $CAPEX_{Elektrolyt}$ im Verlauf von 1400 Zyklen von $60,72\text{ €}$ auf $425,04\text{ €}$, was sechs Elektrolyterneuerungen entspricht. Die AQDS/BQDS-FB mit derselben Konzentration, jedoch mit einer Stromdichte von 10 mA cm^{-2} betrieben, weist eine Erhöhung der $CAPEX_{Elektrolyt}$ von $60,72\text{ €}$ auf $1153,68\text{ €}$ auf, was 18 Erneuerungen der Elektrolyten entspricht.

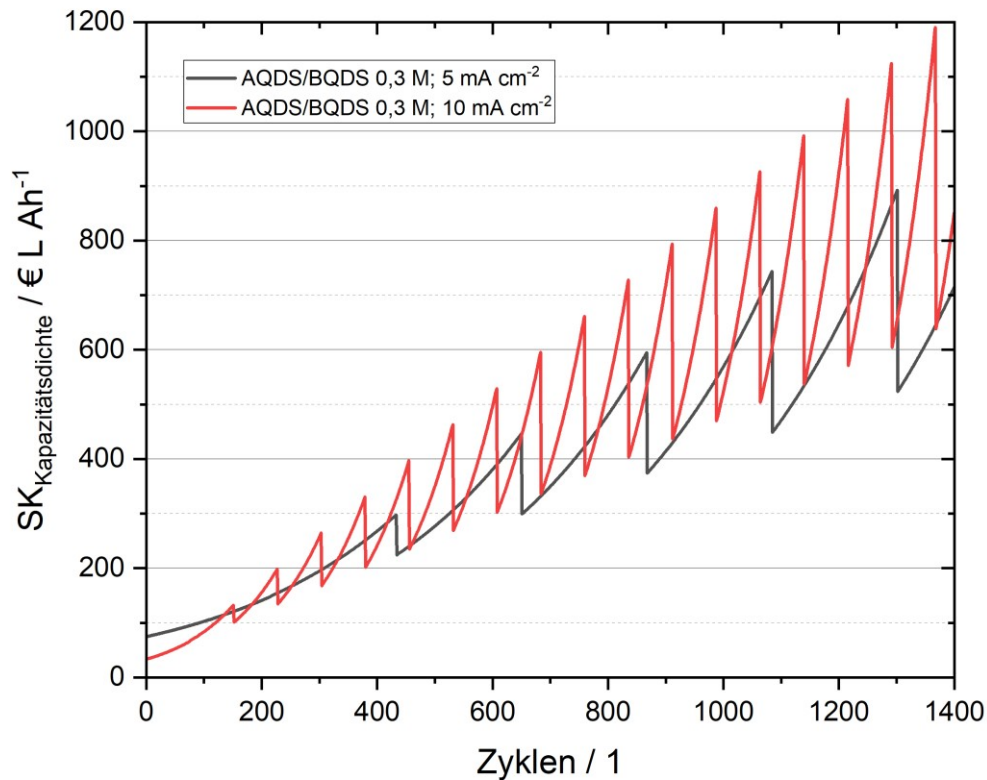


Abbildung 46. Darstellung der zyklenabhängigen Nutzungsfunktion aufgrund der Degradation der Elektrolyten und der Auswirkung auf die spezifischen Kosten der Kapazitätsdichte ($SK_{Kapazitätsdichte}$) für AQDS/BQDS FBn mit einer Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 5 mA cm^{-2} und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,3\text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von 10 mA cm^{-2} .

Auch bei den AQDS/BQDS FBn lässt sich der gleiche Zusammenhang zwischen $CAPEX_{Elektrolyt}$ und den $SK_{Kapazitätsdichte}$ wie bei den V FBn beobachten.

In **Abbildung 46** sind die Nutzungsfunktionen der untersuchten FBn abgebildet. Die $0,3\text{ M}$ AQDS/BQDS FB, die mit einer Stromdichte von 5 mA cm^{-2} betrieben wurde, weist steigende $SK_{Kapazitätsdichte}$ auf, die sich von anfänglich $74,75\text{ €/L Ah}^{-1}$ auf $708,11\text{ €/L Ah}^{-1}$ nach 1400 Zyklen erhöhen. Bei derselben Zyklusanzahl steigen die $SK_{Kapazitätsdichte}$ der gleichkonzentrierten MV/TEMPOL FB, die mit einer Stromdichte von 10 mA cm^{-2} betrieben wurde, von einem Anfangswert von $33,58\text{ €/L Ah}^{-1}$ auf $829,19\text{ €/L Ah}^{-1}$.

Bei der AQDS/BQDS FB, die mit der halben Stromdichte betrieben wurde, war trotz der anfänglich höheren $SK_{Kapazitätsdichte}$ eine geringere Steigung festzustellen und sie wies über die gesamten 1400 Zyklen hinweg dauerhaft niedrigere $SK_{Kapazitätsdichte}$ auf als die gleichkonzentrierte MV/TEMPOL FB, die mit der höheren Stromdichte betrieben wurde.

Eine vertiefte Analyse der AQDS/BQDS FBn verdeutlicht, dass die elektrochemische Stabilität der organischen Elektrolyte maßgeblich von der molekularen Struktur und der Zusammensetzung des Elektrolyten abhängt.²⁶³ Studien zeigen, dass Modifikationen am AQDS-Molekül, etwa durch funktionelle Gruppen, die Lebensdauer signifikant verbessern können, indem sie den Abbau durch Radikalreaktionen vermindern.⁹⁶ Weiterhin ist die Membranpermeabilität ein kritischer Parameter, der nicht nur die Selbstentladung beeinflusst, sondern auch die Effizienz (maßgeblich die Coulombeffizienz) der Batterie bestimmt.²⁶⁴ Fortschritte in der Entwicklung selektiver Ionenaustauschmembranen, welche die Übertragung unerwünschter Moleküle minimieren, konnten die Leistung organischer Durchflussbatterien deutlich steigern.²⁶⁴ Darüber hinaus sind innovative Ansätze wie die Verwendung von redoxaktiven Polymerbeschichtungen auf Elektrodenflächen untersuchenswert, um Degradationseffekte zu reduzieren und die Zyklusstabilität zu erhöhen.²⁶⁵ Diese Optimierungsstrategien führen dazu, dass AQDS/BQDS- FBn nicht nur wirtschaftlich konkurrenzfähiger werden, sondern auch eine verbesserte Lebensdauer und Betriebssicherheit aufweisen, was für eine breite Anwendung im stationären Energiespeichersektor essenziell ist.

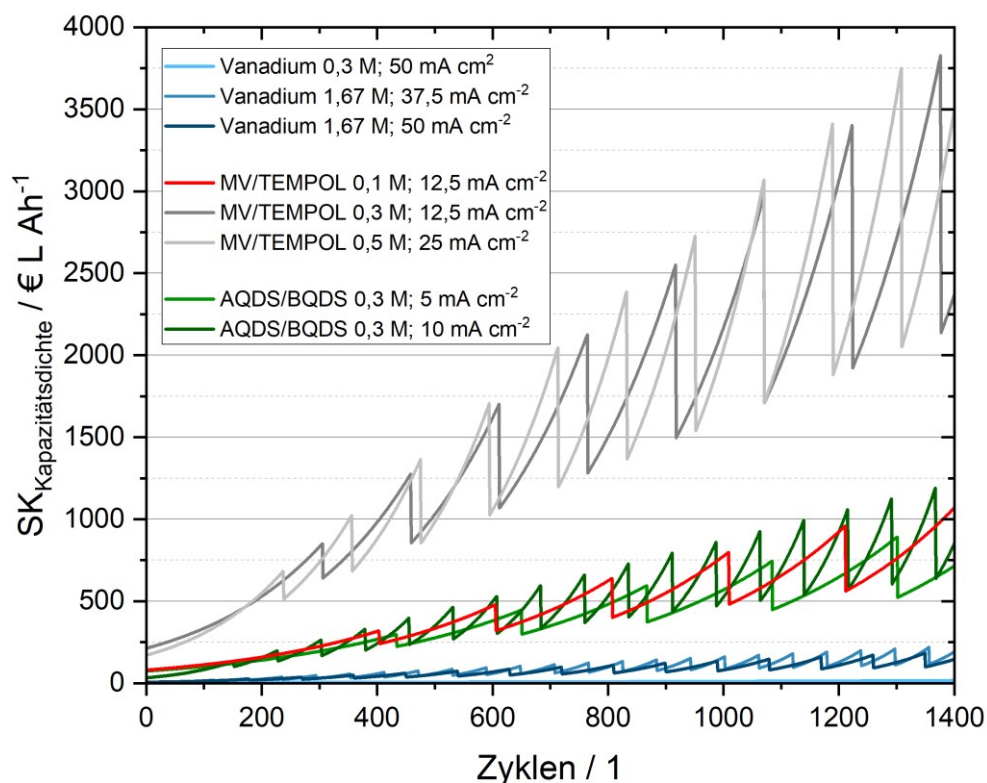


Abbildung 47. Darstellung der zyklusabhängigen Nutzungsfunktion aufgrund der Degradation der Elektrolyten und der Auswirkung auf die spezifischen Kosten der Kapazitätsdichte ($SK_{\text{Kapazitätsdichte}}$) für alle untersuchten FBn der unterschiedlichen Typen V FBn, MV/TEMPOL FBn und AQDS/BQDS FBn mit unterschiedlichen Konzentrationen der aktiven Spezies und unterschiedlichen genutzten Stromdichten.

Abbildung 47 stellt die $SK_{Kapazitätsdichte}$ aller untersuchten FBn über 1400 Zyklen dar, um einen direkten graphischen Vergleich zu ermöglichen.

Es wird deutlich, dass die $CAPEX_{Elektrolyt}$ einen signifikanten Einfluss auf die Dimension der $SK_{Kapazitätsdichte}$ haben. Die V FBn weisen mit bis zu $185,74 \text{ € L Ah}^{-1}$ die niedrigsten $SK_{Kapazitätsdichte}$ aller untersuchten FBn auf. Die AQDS/BQDS FBn sind mit einer maximalen $SK_{Kapazitätsdichte}$ von bis zu $829,19 \text{ € L Ah}^{-1}$ etwa viermal so teuer. Die MV/TEMPOL FBn erreichen mit bis zu $3433,02 \text{ € L Ah}^{-1}$ die höchsten $SK_{Kapazitätsdichte}$ aller untersuchten FBn und sind damit etwa viermal so teuer wie die AQDS/BQDS FBn und rund 18-mal so teuer wie die V FBn.

Die Herstellungskosten werden durch die $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ maßgeblich beeinflusst, was sich ebenfalls auf die $SK_{Kapazitätsdichte}$ auswirkt. Da die verwendete Stromdichte beim Laden und Entladen auch die Degradation der Elektrolyte beeinflusst, wirken sich diese Betriebsbedingungen ebenfalls auf die $SK_{Kapazitätsdichte}$ aus. So erreicht die MV/TEMPOL FB mit einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ und einer Stromdichte von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ $SK_{Kapazitätsdichte}$ von $1058,42 \text{ € L Ah}^{-1}$, die in der Dimension der der AQDS/BQDS FBn entspricht.

Die V FB mit einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$, die im Vergleich zu den anderen untersuchten V FBn fünffach niedriger konzentriert war, hatte mit $16,47 \text{ € L Ah}^{-1}$ die niedrigsten $SK_{Kapazitätsdichte}$ aller untersuchten FBn.

Ergänzend hierzu verdeutlichen die Ergebnisse, dass die V FBn trotz ihrer vergleichsweise niedrigen $SK_{Kapazitätsdichte}$ durch etablierte Produktionsprozesse und relativ moderate Materialkosten eine kosteneffiziente Lösung darstellen. Jedoch stellen die Verfügbarkeit und Preisschwankungen von Vanadium sowie die Anforderungen an die Elektrolytqualität wesentliche Limitationen für die weitere Kostenreduktion dar.²⁶⁶ Weiterhin beeinflusst die erhöhte Degradation bei höheren Stromdichten die Lebensdauer der Batterien und somit die Gesamtkosten.²⁶⁷ Dabei ist hervorzuheben, dass V FBn in der Praxis bereits eine hohe Langzeitstabilität aufweisen. Betriebszeiten von über zwei Jahrzehnten wurden in mehreren Systemen dokumentiert, wobei auch unter hohen Stromdichten eine signifikante Zyklusstabilität erzielt werden konnte.²⁶⁸ Zur Erhaltung der elektrochemischen Balance werden bewährte Strategien wie das kontrollierte Umpumpen (Rebalancing) oder elektrochemische Rekonditionierung eingesetzt, die eine Wiederherstellung der Kapazität ohne vollständigen Elektrolytaustausch ermöglichen.^{269–271} Diese Maßnahmen tragen wesentlich zur Lebensdauerverlängerung und Wirtschaftlichkeit der Systeme bei.

Für die MV/TEMPOL FBn zeigen sich trotz der hohen $SK_{Kapazitätsdichte}$ positive Perspektiven, da die organischen Elektrolyte potenziell günstiger und nachhaltiger verfügbar sind. Die größte Herausforderung liegt in der begrenzten Langzeitstabilität der organischen Moleküle, die bei hohen Konzentrationen und Betriebsbedingungen wie hohen Stromdichten schneller degradieren und somit die Kosten für Bereich Energie erhöhen.²⁷² Fortschritte in der molekularen Modifikation und Materialforschung könnten jedoch die Lebensdauer verbessern und die Wirtschaftlichkeit dieser Systeme deutlich steigern.⁹⁶

Die AQDS/BQDS FBn positionieren sich zwischen den V FBn und den MV/TEMPOL FBn. Ihre höhere $SK_{Kapazitätsdichte}$ ist hauptsächlich auf die aktuellen

Elektrolytkosten sowie auf die begrenzte Haltbarkeit zurückzuführen. Forschungsarbeiten zeigen jedoch, dass durch gezielte Optimierung der Elektrolytzusammensetzung und der Zellarchitektur signifikante Effizienz- und Lebensdauersteigerungen möglich sind, welche die Kosteneffizienz verbessern könnten.²⁷³ Insgesamt hängt die Wettbewerbsfähigkeit der Durchflussbatterien maßgeblich von der Weiterentwicklung langlebiger und kostengünstiger Elektrolyte ab, wobei sowohl anorganische als auch organische Systeme je nach Anwendung und Einsatzbedingungen unterschiedliche Vorteile bieten. Im Gegensatz zu den vanadiumbasierten Systemen bestehen insbesondere für asymmetrische organische Elektrolyte derzeit kaum etablierte Rebalancing- oder Rekonditionierungsverfahren.¹¹⁵ Erste vielversprechende Ansätze werden sind jedoch für symmetrische organische Elektrolyte untersucht worden, was ebenfalls einen kostenreduzierenden Effekt bei solchen FBn hätte.²⁷⁴

7. Technoökonomische Diskussion

7.1. Einführung der Sensibilitätsanalyse als technoökonomisches Instrument

Mithilfe von Sensitivitätsanalysen können in der Technoökonomie Variationen bei Eingangsparametern berücksichtigt und eine Bandbreite von Ergebnissen erzeugt werden. Diese Analysen ermöglichen es, den Einfluss von Änderungen auf das errechnete Ergebnis eines Systems abzuschätzen.

Trotz der begrenzten Vorhersagbarkeit komplexer Systeme lässt sich mithilfe der Sensitivitätsanalyse bestimmen, welche Parameter in welchem Umfang auf das Ergebnis einwirken.²⁷⁵ Diese Methodik findet beispielsweise Anwendung bei der Optimierung von Energiesystemen und ermöglicht generelle Vorhersagen zur Rentabilität und den Kostenstrukturen.²⁷⁶

Sensibilitätsanalysen quantifizieren explizit den Einfluss von Änderungen der Eingangsgrößen auf die Ausgangswerte. Dies ist insbesondere relevant, wenn komplexe Modelle zur Bewertung von Technologien, Geschäftsmodellen oder Investitionen eingesetzt werden.²⁷⁷ Eine wesentliche Stärke dieser Methodik liegt darin, dass sie hilft, kritische Faktoren zu identifizieren und Investitionen entsprechend zu priorisieren.

In dieser Arbeit wurde auf Basis der Ergebnisse einer eigenen laborgestützten Datenerhebung ein technoökonomischer Istzustand des Systems der jeweiligen FB erfasst. Dieser Zustand basiert auf einer Vielzahl von Parametern, die jedoch begrenzt sind.

Bereits eine Veränderung einer dieser Variablen, etwa durch die Verwendung einer anderen Komponente mit abweichenden Eigenschaften, hat direkten Einfluss auf die Leistungsdaten und/oder die Kosten der FB im Modell. Umgekehrt lässt sich untersuchen, welche Veränderung einer Variablen eine positive Wirkung auf die technoökonomischen Kennzahlen hätte und in welchem Ausmaß dies der Fall wäre. Zur Beantwortung dieser Fragen wurden die im technoökonomischen Modell abgebildeten standardisierten FBn verschiedenen Sensitivitätsanalysen unterzogen. Dabei wurden jeweils zwei Eingangsparameter (vgl. Anlage D) ausgewählt, die miteinander variiert wurden, während alle anderen Parameter konstant gehalten wurden, basierend auf den im Labor gemessenen Werten.

7.1.1. Definition einer Optimierungsfrage zur Auswirkung auf die spezifischen Energieinhaltskosten oder die spezifischen Leistungskosten

Bei den durchgeführten Sensitivitätsanalysen wurden Fragestellungen zu den Auswirkungen auf die spezifischen Energieinhaltskosten in $[\text{€ Wh}^{-1}]$ untersucht, die im weiteren Verlauf als Optimierungsfragen verstanden wurden. Die gleiche Fragestellung lässt sich auch auf die spezifischen Leistungskosten in $[\text{€ W}^{-1}]$ anwenden. In dieser Arbeit wurde jedoch der Fokus auf die Kapazität der Batterie gelegt und nicht primär auf deren Leistung. Je nach ökonomischem Anwendungsfall lässt sich dieser Fokus jedoch leicht anpassen.

Konkret wurden jeweils zwei Eingangsvariablen ausgewählt, die variiert wurden, wobei alle anderen Variablen mit den im Labor gemessenen Werten konstant gehalten wurden.

Ein Beispiel zur Verdeutlichung dieser Fragestellung soll anhand einer Komponente, der Membran, erläutert werden. Die Membran hat sowohl zu den technischen als auch bei den ökonomischen Größen im Modell einen Beitrag. Zum einen beeinflusst sie den inneren Widerstand der Zelle, zum anderen sind ihre Kosten Bestandteil der *CAPEX* der Batterie (vgl. Gleichung Gl. 19). Rein technisch betrachtet erscheint es sinnvoll, den ionischen Widerstand der Membran zu verringern, da ein insgesamt niedrigerer innerer Widerstand der Zelle die effektive Zellenspannung erhöht, was grundsätzlich als vorteilhaft gilt. Allerdings geht eine Verbesserung der physikalischen Eigenschaften einer Komponente häufig mit höheren spezifischen Kosten für diese Komponente einher. Um die spezifischen Energieinhaltskosten positiv zu beeinflussen, muss der Nenner – also der Energieinhalt in Wh – stärker wachsen als der Zähler, also die Kosten in €. Die Optimierungsfrage in diesem Fall lautet daher: „Welche Auswirkungen auf die spezifischen Energieinhaltskosten hat eine Variation der Leitfähigkeit der Membran bei gleichzeitiger Variation der spezifischen Materialkosten?“

Diese Frage wird durch die Sensitivitätsanalyse beantwortet.

Die Anzahl aller möglichen Kombinationen für solche Optimierungsfragen lässt sich mithilfe der Kombinatorik berechnen. Bei der Auswahl der zu variiierenden Eingangsgrößen ist die Reihenfolge irrelevant, da sie keine Auswirkung auf die untersuchten Zielgrößen (spezifische Energieinhaltskosten oder spezifische Leistungskosten) hat. Zudem erfolgt die Auswahl ohne Wiederholung, was bedeutet, dass nicht dieselbe Eingangsgröße und ihre Variation mehrfach untersucht wird. Die Anzahl aller möglichen Kombinationen im Modell lässt sich daher gemäß der Formel berechnen:

$$\text{Anzahl Optimierungsfragen} = \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad \text{Gl. 43}$$

Wobei k die Anzahl der in der Optimierungsfrage zu behandelnden Eingangsgrößen (hier 2) und n die Gesamtzahl der Eingangsgrößen im Modell (ca. 300) darstellt. Bei einer Erweiterung des Modells um zusätzliche Bereiche wird diese Zahl weiter ansteigen. Die daraus resultierenden über 40.000 möglichen Optimierungsfragen im zugrundeliegenden Modell verdeutlichen die Notwendigkeit, bei der Auswahl der Optimierungsfragen gezielt solche Eingangsgrößen zu wählen, die voraussichtlich den größten Einfluss auf die Zielgrößen haben. Aus diesem Grund wurden bei der Auswahl die Abhängigkeiten zwischen den beiden Bereichen Energie und Leistung der Batterie berücksichtigt, und es wurden Eingangsgrößen gewählt, die möglichst beide Bereiche beeinflussen.

7.2. Einführung des Optimierungspotenzials

In den folgenden Sensitivitätsanalysen wurden jeweils zwei Eingangsgrößen variiert und hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{\text{Energieinhalt}}$) untersucht. Die spezifischen Energieinhaltskosten sind durch die folgende Gleichung definiert:

$$SK_{Energieinhalt} = \frac{K_{Energie} + K_{Leistung}}{Energiekapazität} \quad \text{Gl. 44}$$

Bei der grafischen Darstellung der Ergebnisse, wie sie beispielsweise in den Abbildungen der Unterkapitel im Kapitel 7.2.1 zu sehen ist, spannen die beiden Variablen eine Variationsfläche auf, innerhalb derer die errechneten $SK_{Energieinhalt}$ graphisch dargestellt wurden. Gleiche Farben in den Diagrammen repräsentieren Isokostenlinien. Diese ermöglichen es, abzulesen, welche Kostenveränderungen innerhalb der durch die Variationspaare (Variable 1, Variable 2) abgebildeten Fragestellung noch erreichbar sind. Der tatsächlich gemessene Wert beider Variablen für die betrachtete FB wurde in der Grafik hervorgehoben. Aus den Diagrammen können die Richtungen identifiziert werden, die zu einer Verringerung der $SK_{Energieinhalt}$ und somit zu einer potenziellen Verbesserung der Wirtschaftlichkeit führen würden.

Die dadurch aufgespannte Fläche des Optimierungspotenzials (A_{OP}) birgt zumindest theoretische Optimierungsmöglichkeiten und wird durch die jeweiligen äußeren Grenzen der Variationen und durch die gemessenen Werte der FB begrenzt. Innerhalb dieser A_{OP} lässt sich mit Gleichung Gl. 45 ein Optimierungspotenzial (OP) definieren, welches ein Maß für das technoökonomische Potenzial in der jeweiligen Optimierungsfrage ist:

$$OP_{Variable\ 1,\ Variable\ 2} = 1 - \frac{SK_{Energieinhalt,\ min}}{SK_{Energieinhalt,\ max}} \quad \text{Gl. 45}$$

Dabei ist der maximal und minimal vorkommende Wert der $SK_{Energieinhalt}$ innerhalb des A_{OP} entscheidend. Der Betriebszustand der im Modell verwendeten Laborbatterie ist in dieser Arbeit jedoch ebenso bekannt wie ihre technoökonomischen Daten. Da eine technoökonomische Verschlechterung im Kontext einer Optimierung unplausibel ist, gibt der Betriebszustand stets den sinnvollen maximalen Wert für die spezifischen Energieinhaltskosten an. Für solche Fälle lässt sich die Gleichung Gl. 45 wie folgt umwandeln:

$$OP_{Variable\ 1,\ Variable\ 2} = 1 - \frac{SK_{Energieinhalt,\ min}}{SK_{Energieinhalt,\ Betriebspunkt}} \quad \text{Gl. 46}$$

Der maximal mögliche Optimierungsbereich (OB), der als Differenz dieser beiden Werte definiert wird, lässt sich durch die folgenden Formeln berechnen:

$$OB = SK_{Energieinhalt,\ max} - SK_{Energieinhalt,\ min} \quad \text{Gl. 47}$$

$$OB = SK_{Energieinhalt,\ Betriebspunkt} - SK_{Energieinhalt,\ min} \quad \text{Gl. 48}$$

Um die Ergebnisse solcher Optimierungsfragen auf eine konkrete Anwendung zu übertragen, ist es notwendig, die Grenzen der zu variierenden Eingangsgrößen so zu wählen, dass die angenommenen Wertebereiche realistisch erreichbar sind. Andernfalls könnten die gewonnenen Minima der Zielgröße irrelevant sein, da sie möglicherweise nicht praktisch erreichbar sind.

Die Abhängigkeiten der Bereiche Energie und Leistung untereinander, die für die $SK_{Energieinhalt}$ relevant sind (vgl. Gleichung Gl. 45), sind häufig nicht linear, sondern folgen aufgrund der Gleichung Gl. 4 auch logarithmischen Zusammenhängen. Dies wird

in den Isokostenlinien der grafischen Darstellung der Sensitivitätsanalysen der Optimierungsfragen sichtbar.

7.2.1. Ergebnisse ausgewählter Optimierungsfragen

7.2.1.1. Ergebnisse ausgewählter Optimierungsfragen verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien im Labor mit den Elektrolytenpaaren Vanadium/Vanadium und MV/TEMPOL

In diesem Unterkapitel wurden V FBn mit 1,67 M und MV/TEMPOL FBn mit 0,5 M betrachtet. Zur Erstellung der Datenbasis für die notwendigen Sensitivitätsanalysen wurde das auf Excel basierende und damit zeitintensive technoökonomische Modell verwendet, da die Stand-Alone-Software FLOTE erst später entwickelt wurde. Für die Berechnung des Optimierungspotenzials und des Optimierungsbereich, wurden noch die Gleichungen Gl. 45 und Gl. 47 genutzt.

Für die FBn mit einem Betriebszustand von 25 mA cm^{-2} wurden insgesamt acht Optimierungsfragen untersucht. Dabei wurden Variationen der Stromdichten, der Konzentration der aktiven Spezies, der effektiven Zellspannung, der spezifischen Kosten der aktiven Spezies ($SK_{\text{aktive Spezies}}$) sowie des inneren Widerstands betrachtet, da diese Größen sowohl den Bereich der Energie als auch den Bereich der Leistung im Modell beeinflussen.

Die untersuchten Bereiche der genannten Größen wurden zur Vergleichbarkeit für alle FBn in diesem Unterkapitel einheitlich festgelegt. So wurden Stromdichten im Bereich von 1 mA cm^{-2} bis 500 mA cm^{-2} berücksichtigt. Für die $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ wurde eine obere Grenze von 4 mol L^{-1} basierend auf vergleichbaren Untersuchungen^{27,43} festgelegt. Die untere Grenze von $0,07 \text{ mol L}^{-1}$ wurde gewählt, da im Labor auch eine 0,1 M MV/TEMPOL FB untersucht wurde. Die effektive Zellspannung wurde im Bereich von 0,3 V bis 2 V festgelegt.⁴³ Die obere Grenze orientierte sich an Untersuchungen zu FBn mit wässrigen Elektrolyten und berücksichtigt die Grenze der Wasserstoff- bzw. Sauerstoffentstehung bei wässrigen FBn.^{130,278} Die gemessenen Werte betrugen 1,32 V für die V FBn und 0,98 V für die MV/TEMPOL FBn. Die Grenzen für die spezifischen Kosten der aktiven Spezies wurden mit 10 € kg^{-1} bis $100.000 \text{ € kg}^{-1}$ an Marktpreisen^{279,280} ausgerichtet, wobei die obere Grenze die tatsächlich entstandenen Kosten für den Elektrolyten MV widerspiegelt. Die realen $SK_{\text{aktive Spezies}}$ betrugen 50 € kg^{-1} für V FBn und 35.855 € kg^{-1} für MV/TEMPOL FBn. Die $SK_{\text{aktive Spezies}}$ für die MV/TEMPOL FBn ergeben sich aus den nach dem Molekulargewicht gemittelten spezifischen Kosten der aktiven Spezies beider genutzten Elektrolyten (vgl. **Tabelle 15**). Für den inneren Widerstand wurden Werte zwischen $0,001 \Omega$ und $0,4 \Omega$ angenommen. Die untersuchten MV/TEMPOL FBn wiesen einen mittleren Widerstand von $0,33 \Omega$ auf, weshalb der Maximalwert daran ausgerichtet wurde. Die untere Grenze wurde so gewählt, dass sie dem kleinsten Einzelwert der widerstandstragenden Komponenten entspricht. Die 1,67 M V FBn wiesen einen mittleren inneren Widerstand von $0,055 \Omega$ auf.

Darüber hinaus wurden vier Optimierungsfragen bezüglich Komponenten gestellt, die den Innenwiderstand der FBn beeinflussen. Dabei wurden für jede Komponente die

spezifischen Kosten und der flächenspezifische Widerstand variiert. Die Untersuchungsbereiche wurden dabei variablenabhängig gewählt.

Die spezifischen Kosten der Membran wurden im Bereich von 10 € m^{-2} bis 5000 € m^{-2} festgelegt. Die obere Grenze orientierte sich an den realen spezifischen Kosten der Fumasep FAP-450 mit 2500 € m^{-2} . Spezifische Kosten unter 50 € m^{-2} , was auch ungefähr 50 € m^{-2} entspricht, gelten als möglich²⁸¹, weshalb die untere Grenze diesen Bereich berücksichtigte. Der tatsächliche flächenspezifische Widerstand der Membran betrug $720 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$. Es sind jedoch auch Membranen mit flächenspezifischen Widerständen von weniger als $200 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ bekannt (z. B. solche basierend auf Polybenzimidazole^{282–284}), weshalb $10 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ als untere Grenze gewählt wurde. Eine Reduzierung des inneren Widerstands stellt ein generelles Ziel bei FBn dar, weshalb Werte über $1000 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ nicht berücksichtigt wurden.

Die Bipolarplatte bestand aus dem Material SIGRADUR G der Firma HTW Hochtemperatur-Werkstoffe GmbH und wies einen vergleichsweise niedrigen flächenspezifischen Widerstand von $1,35 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ auf. Die spezifischen Kosten der Bipolarplatte betrugen 418 € m^{-2} . Andere Untersuchungen berichteten von höheren Widerständen^{43,190}, weshalb als obere Grenze der Bereich bis $2 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ gewählt wurde. Die untere Grenze von $0,05 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ orientierte sich an Graphen, das mit einer Leitfähigkeit vergleichbar mit Kupfer sogar einen flächenspezifischen Widerstand von nur $0,003 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ haben könnte²⁸⁵. Um eine solche kostenintensive Entwicklung zu berücksichtigen, wurde eine obere Grenze der spezifischen Kosten von 2000 € m^{-2} gewählt, während für zu erwartende kostenminimierende Skaleneffekte spezifische Kosten von 100 € m^{-2} angenommen wurden.

Die Elektrode bestand aus SIGRACELL GFA 6 EA der Firma SGL Carbon und hatte einen flächenspezifischen Widerstand von $720 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ sowie spezifische Kosten von 150 € m^{-2} . Werte von 60 € m^{-2} gelten als realistisch^{190,286}, was mit einer unteren Grenze von 10 € m^{-2} berücksichtigt wurde. Als obere Grenze wurde die nächsthöhere Dimension von 1000 € m^{-2} gewählt. Der flächenspezifische Widerstand wurde für diese Elektrode mit $0,05 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ als untere Grenze und mit $1000 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ als obere Grenze (der dimensionsaufgerundete Wert des tatsächlich genutzten Materials) festgelegt.

Die Gasdiffusionsschicht QuinTech GDS090S hatte spezifische Kosten von 1500 € m^{-2} und einen flächenspezifischen Widerstand von $5,4 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$. Die oberen und unteren Grenzwerte für den flächenspezifischen Widerstand wurden auf $10 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ bzw. $0,05 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ festgelegt. Für die spezifischen Kosten wurden 2000 € m^{-2} als obere Grenze und 10 € m^{-2} als untere Grenze berücksichtigt, um die erwartbaren positiven ökonomischen Skaleneffekte im Falle einer industriellen Produktion abzubilden.

Bei allen durchgeführten Sensitivitätsanalysen wurde festgestellt, dass das grundlegende Verhalten der V FBn und der MV/TEMPOL FBn qualitativ gleich war, sich jedoch in der quantitativen Ausprägung unterschied. Im Folgenden werden daher die allgemeinen Eigenschaften hauptsächlich am Beispiel eines FB-Typs diskutiert. Die Diskussion des anderen FB-Typs wird verkürzt und auf die wesentlichen Unterschiede hingewiesen.

7.2.1.1.1. Konzentration der aktiven Spezies über Stromdichte

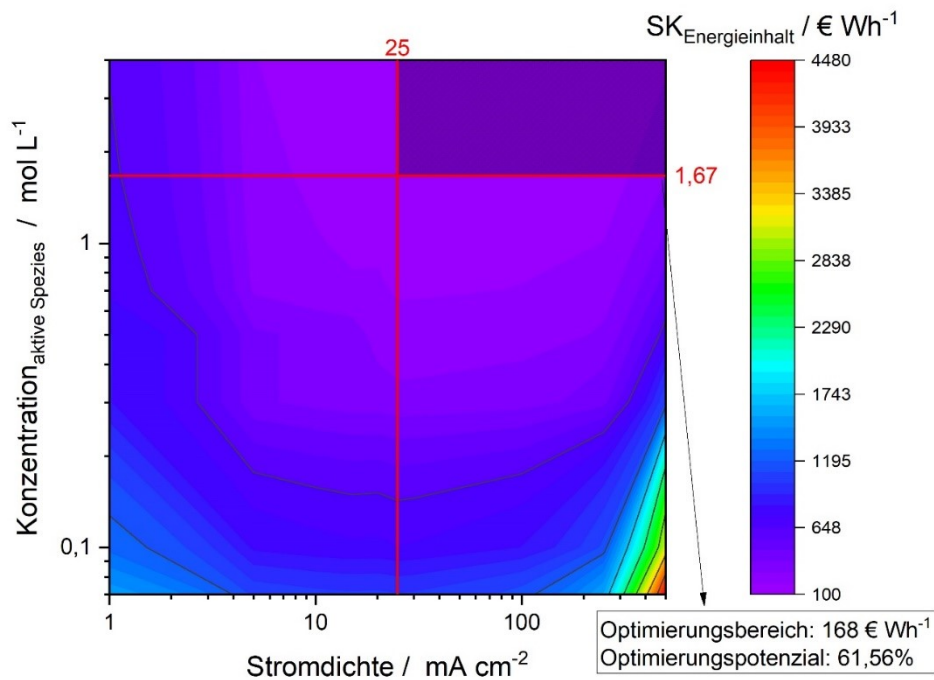


Abbildung 48. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} Stromdichte und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67\text{ mol L}^{-1}$ bei einer Labor VFB mit $1,32\text{ W}$ Leistung und $13,2\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Die niedrigsten Werte für die $SK_{Energieinhalt}$ bei der Variation der $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ und der Stromdichte der VFBn wurden in mittleren Stromdichtebereichen und bei hohen Konzentrationen erzielt. In den untersuchten Grenzen lagen die $SK_{Energieinhalt}$ zwischen 105 € Wh^{-1} und 4462 € Wh^{-1} . Das Optimierungspotenzial ergibt sich aus der Auswertung des Bereichs, der zwischen 25 mA cm^{-2} und 500 mA cm^{-2} sowie zwischen $1,67\text{ mol L}^{-1}$ und 4 mol L^{-1} liegt (vgl. **Abbildung 48**). Mit einem Minimalwert von 105 € Wh^{-1} und einem Maximalwert von 272 € Wh^{-1} ergibt sich ein OB von 168 € Wh^{-1} . Das OP beträgt daher $61,56\%$.

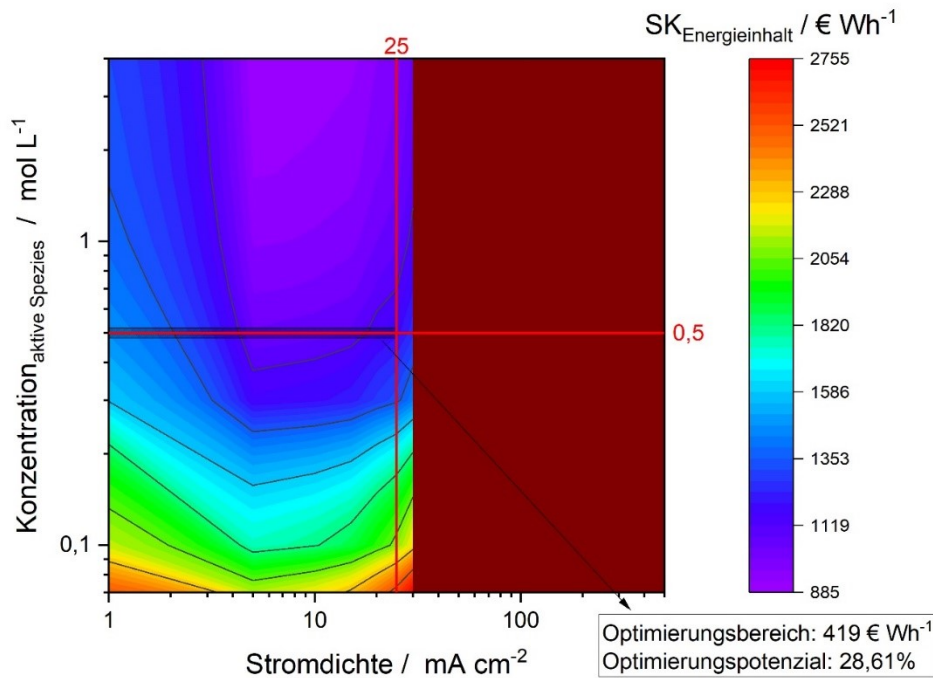


Abbildung 49. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} Stromdichte und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,5\text{ mol L}^{-1}$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,98\text{ W}$ Leistung und $9,8\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Auch für die MV/TEMPOL FBn wird der niedrigste Wert für die $SK_{Energieinhalt}$ bei mittleren Stromdichten erreicht. Da die maximale Löslichkeit der aktiven Spezies in wässrigen Lösungen jedoch begrenzt ist²⁷, ist eine Reduzierung der $SK_{Energieinhalt}$ durch eine gleichzeitige Erhöhung der $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ bis zu den Untersuchungsgrenzen nicht möglich. Innerhalb der untersuchten Grenzen lagen die $SK_{Energieinhalt}$ zwischen 1045 € Wh^{-1} und 2752 € Wh^{-1} . Das OP ergibt sich aus der Auswertung des Bereichs, der zwischen 1 mA cm^{-2} und 25 mA cm^{-2} sowie bei der maximalen Löslichkeit von $0,5\text{ mol L}^{-1}$ liegt (vgl. **Abbildung 49**). Aufgrund der maximalen Löslichkeit lassen sich bei den geforderten Performancewerten auch keine wirtschaftlichen Betriebszustände deutlich oberhalb von 30 mA cm^{-2} erreichen. In diesen Grenzen ergibt sich ein Minimalwert von 1045 € Wh^{-1} und ein Maximalwert von 1464 € Wh^{-1} , was einen OB von 419 € Wh^{-1} und ein OP von $28,61\%$ ergibt.

Das Minimum für die $SK_{Energieinhalt}$ bei mittleren Stromdichtewerten ist darauf zurückzuführen, dass bei noch niedrigeren Werten zur Erreichung der geforderten durchschnittlichen Leistung mehr Elektrodenfläche, also eine größere aktive Fläche, benötigt wird. Dies erfordert eine höhere Anzahl an Zellen. Bei höheren Stromdichtewerten steigt hingegen das benötigte Volumen des Elektrolyten aufgrund des $R_{innerer}$ -Drop der Zellen deutlich an. Mit steigender Stromdichte wird zur Erreichung der geforderten Leistung weniger aktive Fläche benötigt, was sich durch eine Reduktion der ganzzahligen Zellstapelanzahl kostenmindernd auswirkt. Gleichzeitig steigt jedoch die

Menge des benötigten Elektrolyten, die durch die Erhöhung der *Konzentration_{aktive Spezies}* direkt proportional reduziert werden kann. Die niedrige Molarität der MV/TEMPOL FBn führt bei Stromdichten ab 100 mA cm^{-2} im Modell dazu, dass die errechnete benötigte Anzahl der Zellstapel und das Elektrolytvolumen negativ werden, wodurch diese Bereiche außerhalb des sinnvoll zu betrachtenden Bereichs liegen und daher nicht dargestellt wurden.

Beide Effekte wirken kostensteigernd, weshalb sich das Minimum bei mittleren Stromdichtewerten ergibt. Für die hier untersuchten V FBn lag das Minimum bei etwa 25 mA cm^{-2} , während es bei den MV/TEMPOL FBn bei 5 mA cm^{-2} lag, was auf den höheren inneren Widerstand, die niedrigere Löslichkeit und die wesentlich höheren spezifischen Kosten der aktiven Spezies der MV/TEMPOL FBn zurückzuführen ist.

7.2.1.1.2. Effektive Zellspannung über Stromdichte

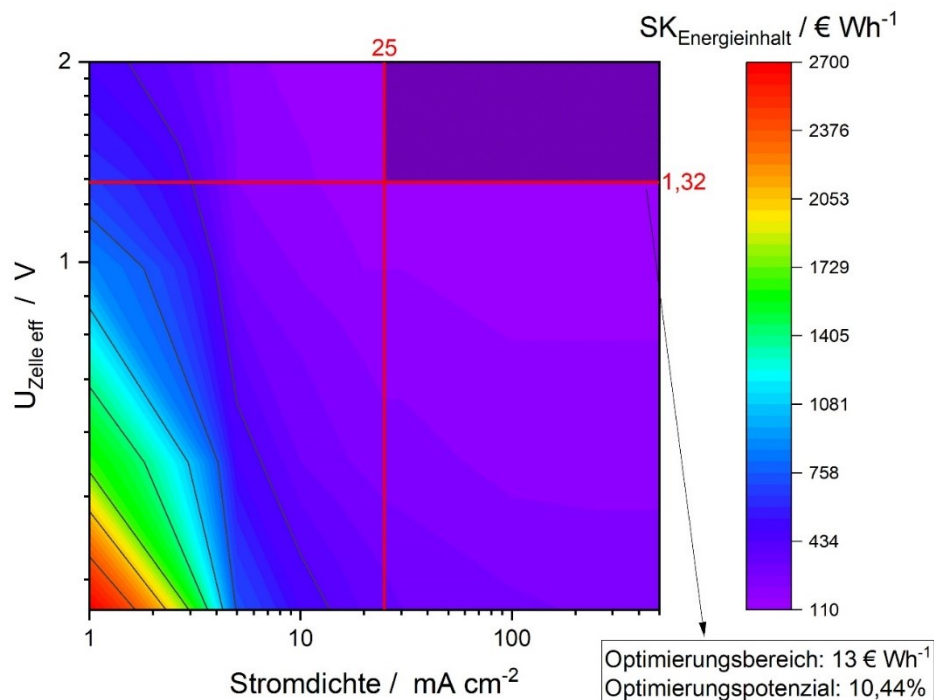


Abbildung 50. Einfluss der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} Stromdichte und einer $U_{Zelle\ eff}$ von $1,32 \text{ V}$ bei einer Labor V FB mit einer *Konzentration_{aktive Spezies}* von $1,67 \text{ mol L}^{-1}$, $1,32 \text{ W}$ Leistung und $13,2 \text{ Wh}$ Energieinhalt.

Bei den V FBn haben die $SK_{Energieinhalt}$ bei der Variation der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) und der Stromstärke den niedrigsten Wert für hohe Werte der $U_{Zelle\ eff}$ und gleichzeitig hohe Werte der Stromstärke. Innerhalb der untersuchten Grenzen lagen die $SK_{Energieinhalt}$ zwischen 114 €/Wh^{-1} und 2697 €/Wh^{-1} .

Das OP ergibt sich aus dem Bereich, der zwischen 25 mA cm^{-2} und 500 mA cm^{-2} sowie zwischen $1,32 \text{ V}$ und 2 V liegt (vgl. **Abbildung 50**). Der OB von 13 € Wh^{-1} resultiert aus dem Minimalwert von 114 € Wh^{-1} und dem Maximalwert von 127 € Wh^{-1} . Das OP beträgt somit $10,44\%$.

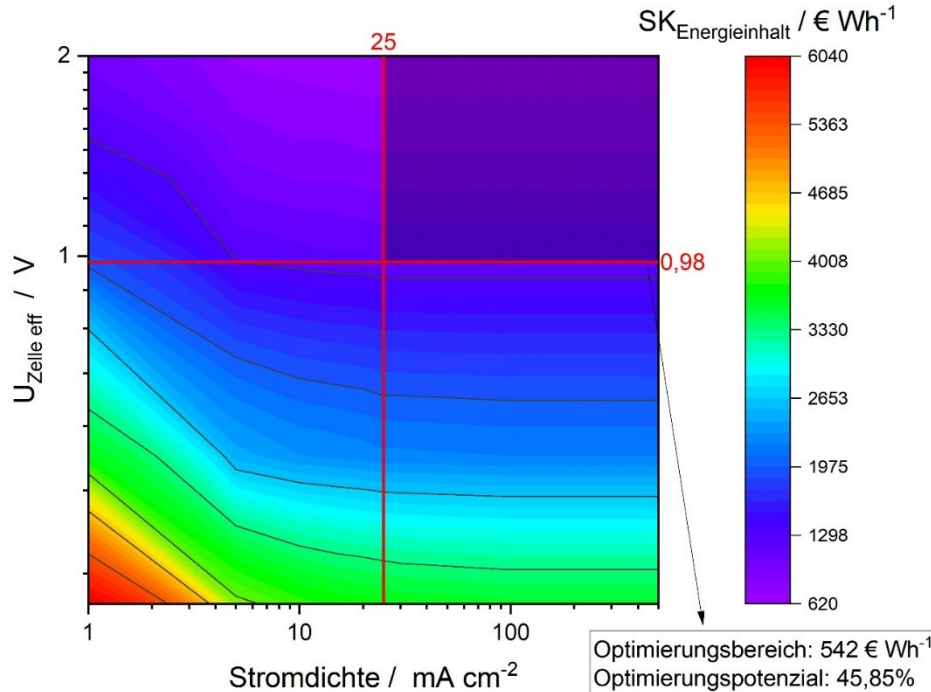


Abbildung 51. Einfluss der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} Stromdichte und einer $U_{Zelle\ eff}$ von $0,98 \text{ V}$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,5 \text{ mol L}^{-1}$, $0,98 \text{ W}$ Leistung und $9,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt.

Die MV/TEMPOL FBn wiesen bei der Variation der $U_{Zelle\ eff}$ und der Stromstärke dasselbe Verhalten wie die V FBn auf.

Innerhalb der für diese Optimierungsfrage relevanten Grenzen von 25 mA cm^{-2} bis 500 mA cm^{-2} und $0,98 \text{ V}$ bis 2 V (vgl. **Abbildung 51**) ergibt sich ein Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ von 640 € Wh^{-1} und ein Maximalwert von 1182 € Wh^{-1} . Der OB beträgt 542 € Wh^{-1} , was ein OP von $45,85\%$ ergibt.

Der erwähnte kostenreduzierende Effekt bei Erhöhung der Stromstärke ist jedoch bei konstanter $U_{Zelle\ eff}$ auf ein absolut erreichbares Minimum beschränkt und lässt sich daher nicht unendlich steigern. Im untersuchten Bereich hat die Erhöhung der $U_{Zelle\ eff}$ jedoch immer zur Verringerung der $SK_{Energieinhalt}$ geführt. Die Erhöhung der Stromstärke wirkt sich mindernd auf die benötigte Zellstapelanzahl aus und kann sich demzufolge nur bis zur Reduzierung auf eine Zelle auswirken. Die Erhöhung der $U_{Zelle\ eff}$ hat einen kostenmindernden Einfluss, indem sie das benötigte Elektrolytvolumen verringert, was

auch bei theoretisch noch höheren Werten der $U_{Zelle\ eff}$ zu einer Reduzierung der Kosten führt.

7.2.1.1.3. Spezifische Kosten der aktiven Spezies über effektiven Zellspannung

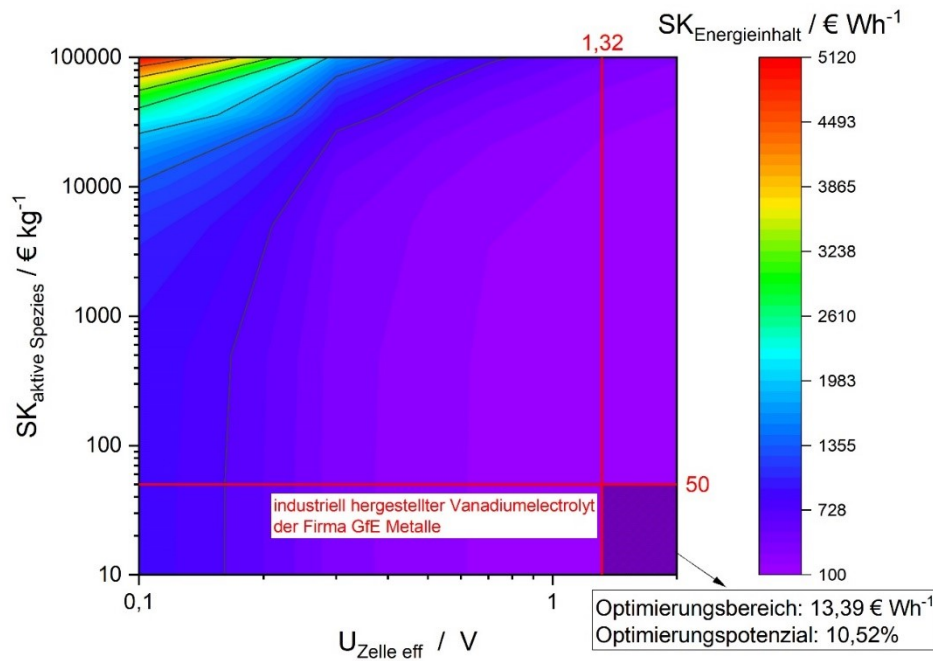


Abbildung 52. Einfluss der spezifischen Kosten der aktiven Spezies ($SK_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} Stromdichte, einer $U_{Zelle\ eff}$ von $1,32\text{ V}$ und $SK_{aktive\ Spezies}$ von 50 €/kg bei einer Labor V FB mit einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67\text{ mol L}^{-1}$, $1,32\text{ W}$ Leistung und $13,2\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Der Gradient der $SK_{Energieinhalt}$ der V FBn verläuft von hohen Werten bei hohen $SK_{aktive\ Spezies}$ und niedrigen $U_{Zelle\ eff}$ zu niedrigen Werten bei niedrigen $SK_{Energieinhalt}$ bei niedrigen $SK_{aktive\ Spezies}$ und hohen $U_{Zelle\ eff}$.

Wie in **Abbildung 52** dargestellt, liegt der maßgebliche Bereich zur Optimierung der V FBn zwischen 10 €/kg und 50 €/kg sowie $1,32\text{ V}$ und 2 V . In diesem Bereich beträgt der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ 114 €/Wh , während der Maximalwert bei 127 €/Wh liegt. Daraus ergibt sich ein OB von 13 €/Wh und ein OP von $10,52\%$.

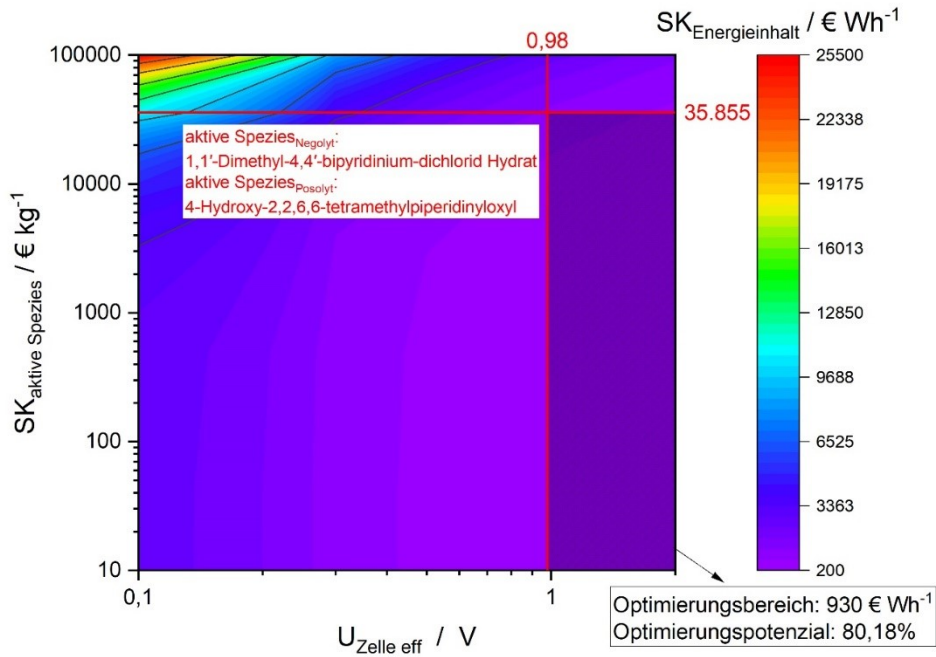


Abbildung 53. Einfluss der spezifischen Kosten der aktiven Spezies ($SK_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} Stromdichte, einer $U_{Zelle\ eff}$ von $0,98\text{ V}$ und mittleren $SK_{aktive\ Spezies}$ von 35855 € kg^{-1} bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,5\text{ mol L}^{-1}$, $0,98\text{ W}$ Leistung und $9,8\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Das Verhalten der $SK_{Energieinhalt}$ bei Variation der $U_{Zelle\ eff}$ und der $SK_{aktive\ Spezies}$ für die MV/TEMPOL FBn wies dasselbe Muster wie bei den V FBn auf.

Der maßgebliche Bereich für eine Optimierung liegt, wie in **Abbildung 53** dargestellt, zwischen 10 € kg^{-1} und 35.855 € kg^{-1} sowie $0,98\text{ V}$ und 2 V . Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ beträgt 230 € Wh^{-1} , während der Maximalwert 1160 € Wh^{-1} erreicht. Daraus ergibt sich ein OB von 930 € Wh^{-1} und ein OP von $80,18\%$.

In der Sensitivitätsanalyse von $SK_{aktive\ Spezies}$ und $U_{Zelle\ eff}$ tragen die $SK_{aktive\ Spezies}$ direkt proportional zur Höhe des $SK_{Energieinhalt}$ bei, während die $U_{Zelle\ eff}$ sowohl die Anzahl der benötigten Zellstapel als auch das erforderliche Elektrolytvolumen beeinflusst. Höhere Spannungswerte verringern die ganzzahlige Anzahl der benötigten Zellstapel, wobei diese, wie bereits erwähnt, niemals weniger als 1 betragen kann. Zudem wird bei höheren $U_{Zelle\ eff}$ weniger Elektrolytvolumen benötigt. Diese Effekte erklären das technoökonomische Verhalten beider Typen von FBn.

7.2.1.1.4. Innerer Widerstand über Stromdichte

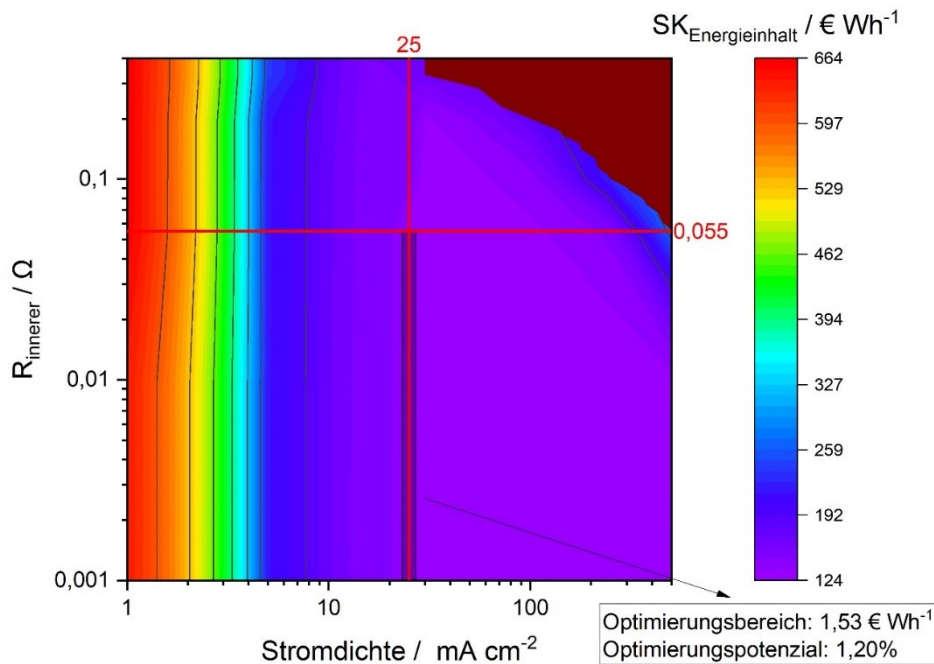


Abbildung 54. Einfluss des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} Stromdichte und einem $R_{innerer}$ von $0,055 \text{ } \Omega$ bei einer Labor V FB mit $1,67 \text{ mol L}^{-1}$, $1,32 \text{ W}$ Leistung und $13,2 \text{ Wh}$ Energieinhalt.

Für die V FBn wurden niedrige Werte der $SK_{Energieinhalt}$ bei der Variation der Stromdichte und des $R_{innerer}$ für mittlere Stromdichten und niedrige $R_{innerer}$ festgestellt.

Der relevante Bereich für die Optimierung liegt, wie in **Abbildung 54** dargestellt, zwischen $0,001 \text{ } \Omega$ und $0,055 \text{ } \Omega$ sowie entlang eines schmalen Bereichs um 25 mA cm^{-2} . In diesem Bereich beträgt der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ 126 € Wh^{-1} und der Maximalwert 127 € Wh^{-1} , was einen OB von $1,53 \text{ € Wh}^{-1}$ und ein OP von nur $1,20\%$ ergibt.

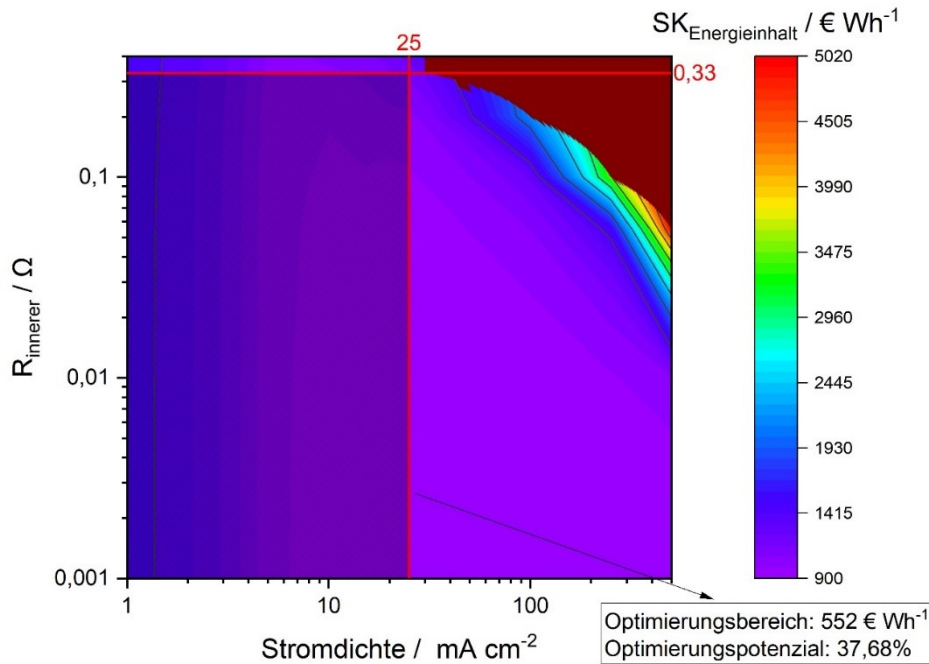


Abbildung 55. Einfluss des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} Stromdichte und einem inneren Widerstand von $0,33 \Omega$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,5 \text{ mol L}^{-1}$, $0,98 \text{ W}$ Leistung und $9,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt.

Für die MV/TEMPOL FBn wurden die niedrigsten Werte der $SK_{Energieinhalt}$ ebenfalls bei mittleren Stromdichten und niedrigen $R_{innerer}$ festgestellt.

Der relevante Bereich für die Optimierung liegt zwischen 1 mA cm^{-2} und 25 mA cm^{-2} sowie $0,001 \Omega$ und $0,33 \Omega$ (vgl. **Abbildung 55**). In diesem Bereich beträgt der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ 912 €/Wh^{-1} und der Maximalwert 1464 €/Wh^{-1} , was einen *OB* von 552 €/Wh^{-1} und ein *OP* von $37,68\%$ ergibt.

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse von $R_{innerer}$ und Stromdichte weisen darauf hin, dass insbesondere sehr niedrige und sehr hohe Stromdichtewerte zu hohen $SK_{Energieinhalt}$ führen, während der $R_{innerer}$ innerhalb des untersuchten Bereichs nur einen geringeren Einfluss auf die Wirtschaftlichkeit hat. Bei niedrigen Stromdichten überwiegt der Anteil der Zellstapelkosten, während bei hohen Stromdichten die Kosten für das benötigte Elektrolytvolumen stärker ins Gewicht fallen. Die unwirtschaftlichsten Betriebszustände der V FBn treten bei niedrigen Stromdichtewerten auf, was auf die geringen Elektrolytkosten zurückzuführen ist. Im Gegensatz dazu sind bei den MV/TEMPOL FBn aufgrund der hohen Elektrolytkosten sehr hohe Stromdichtewerte mit den unwirtschaftlichsten Betriebszuständen verbunden. Bei beiden FB-Typen sind die wirtschaftlichsten Betriebszustände bei mittleren Stromdichtewerten und niedrigen $R_{innerer}$ zu finden.

Stromdichtewerte ab 100 mA cm^{-2} führen im Modell bei hohen $R_{innerer}$ dazu, dass die errechnete Anzahl der benötigten Zellstapel und das benötigte Elektrolytvolumen negativ

werden. Dieser Effekt tritt auch bei noch höheren Stromdichtewerten bei niedrigeren $R_{innerer}$ auf, weshalb diese Bereiche außerhalb des sinnvoll zu betrachtenden Bereichs liegen und daher nicht dargestellt wurden.

7.2.1.1.5. Spezifische Kosten der Membran über flächenspezifischem Widerstand der Membran

Im Weiteren (Unterkapitel 7.2.1.1.5 bis Unterkapitel 7.2.1.1.8) wurden Sensitivitätsanalysen von Komponenten durchgeführt, die den $R_{innerer}$ der FBn beeinflussen. Die Ergebnisse wurden, wie bereits zuvor, ausgewertet und sind unter Variation der spezifischen Kosten der jeweiligen Komponente ($SK_{Komponente}$) und des flächenspezifischen Widerstands ($SFR_{Komponente}$) dargestellt. Auch in diesem Fall wurden die Variationsbereiche entsprechend der jeweiligen Variablen gewählt.

Das grundsätzliche Verhalten der V FBn und der MV/TEMPOL FBn bei diesen Sensitivitätsanalysen ist qualitativ identisch und unterscheidet sich lediglich in der quantitativen Ausprägung. Daher werden die allgemeinen Eigenschaften wie in den vorherigen Analysen diskutiert. Die Untersuchungen haben zudem ergeben, dass die $SK_{Komponente}$ ausschließlich einen quantitativen Einfluss auf den $SK_{Energieinhalt}$ hat, dieser jedoch über die Variation des $SFR_{Komponente}$ hinweg konstant bleibt. Sowohl das berechnete Elektrolytvolumen als auch die benötigte Anzahl der Zellstapel sind unabhängig von den $SK_{Komponente}$ und steigen lediglich mit zunehmendem $SFR_{Komponente}$. Diese Steigerung ist jedoch vergleichsweise moderat, was zu insgesamt niedrigen Optimierungspotenzialen führt.

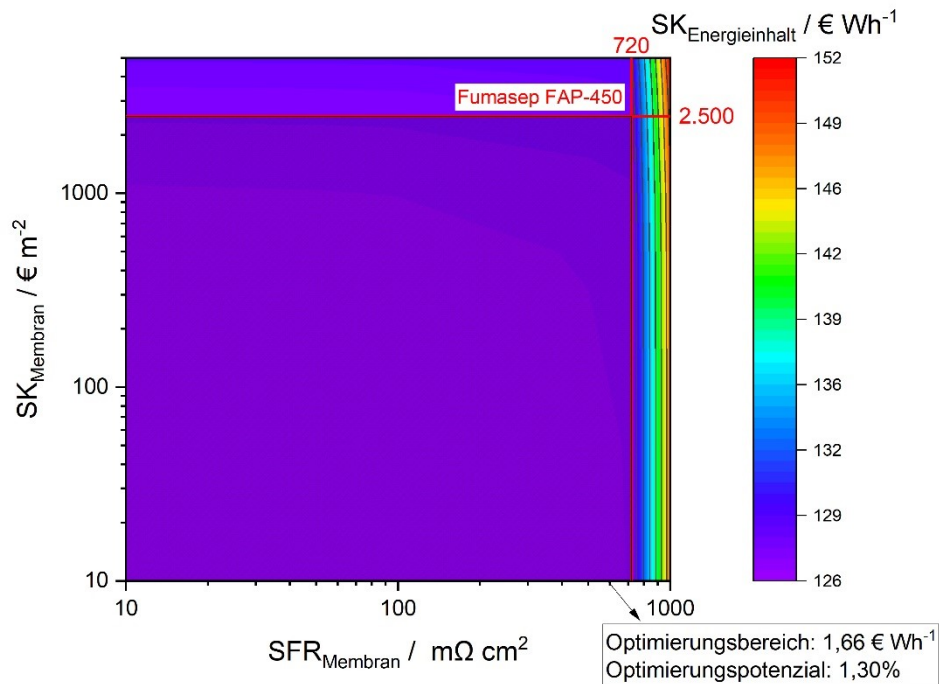


Abbildung 56. Einfluss der spezifischen Kosten der Membran ($SK_{Membran}$) in Abhängigkeit des flächenspezifischen Widerstands ($SFR_{Membran}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} , $SK_{Membran}$ von 2500 €/m^2 und SFR von $720 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ bei einer Labor VFB mit $1,67 \text{ mol L}^{-1}$, $1,32 \text{ W}$ Leistung und $13,2 \text{ Wh}$ Energieinhalt und einer genutzten Membran Fumasep FAP-450.

Der für die Optimierung relevante Bereich der VFBn liegt zwischen 10 €/m^2 und 2500 €/m^2 sowie $10 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ und $720 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$. Der OB beträgt 2 €/Wh^{-1} , und das OP liegt bei $1,30\%$. Dies ergibt sich aus dem Minimalwert des $SK_{Energieinhalt}$ von 126 €/Wh^{-1} und dem Maximalwert von 128 €/Wh^{-1} (vgl. **Abbildung 56**).

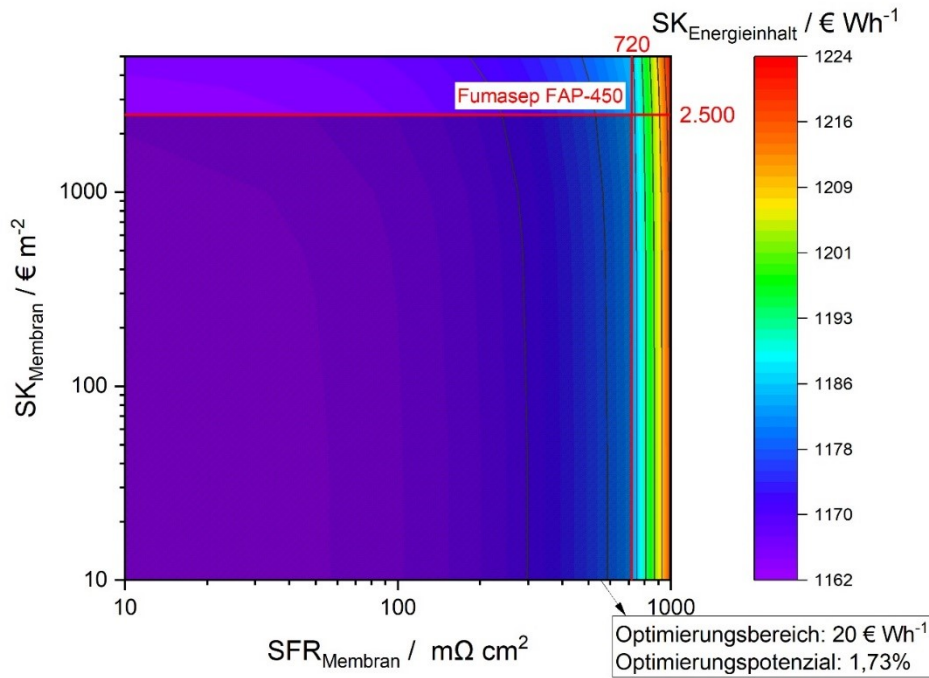


Abbildung 57. Einfluss der spezifischen Kosten der Membran ($SK_{Membran}$) in Abhängigkeit des flächenspezifischen Widerstands ($SFR_{Membran}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} , spezifischen Kosten der Membran von 2500 €/m^2 und SFR von $720 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,98 \text{ W}$ Leistung und $9,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt und einer genutzten Membran Fumasep FAP-450.

Für die MV/TEMPOL FBn liegt der für die Optimierung relevante Bereich ebenfalls zwischen 10 €/m^2 und 2500 €/m^2 sowie $10 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ und $720 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$, da dasselbe Membranmaterial (Fumasep FAP-450) verwendet wurde. Der Minimalwert des $SK_{Energieinhalt}$ beträgt 1163 €/Wh^{-1} und der Maximalwert 1193 €/Wh^{-1} , wodurch sich ein OB von 20 €/Wh^{-1} und ein OP von $1,73\%$ ergeben (vgl. **Abbildung 57**).

Das Verhalten beider FB-Typen ist bei dieser Optimierungsfrage qualitativ identisch und unterscheidet sich nur in der quantitativen Ausprägung des $SK_{Energieinhalt}$. So sind niedrige $SFR_{Membran}$ bei gleichzeitig niedrigen $SK_{Membran}$ erstrebenswert. Da der Widerstand der Membran direkt zum $R_{innerer}$ der Zelle beiträgt, führt eine Verringerung desselben automatisch zu einer Erhöhung der Spannungseffizienz der FBn. Die Reduktion des $R_{innerer}$ führt zudem zu einer verringerten Anzahl benötigter Zellstapel, und das erforderliche Elektrolytvolumen wird ebenfalls reduziert. Beide Effekte sind bei den untersuchten FB-Typen jedoch so gering, dass auch die OP bei dieser Optimierungsfrage sehr niedrig ausfallen.

7.2.1.1.6. Spezifische Kosten der Bipolarplatte über flächenspezifischem Widerstand der Bipolarplatte

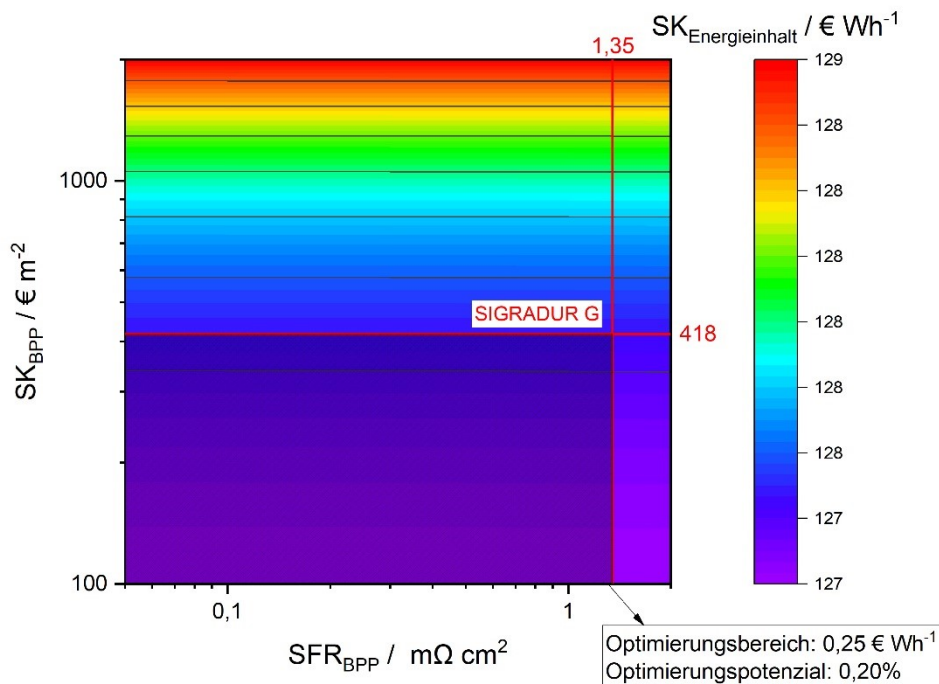


Abbildung 58. Einfluss der spezifischen Kosten der Bipolarplatte (SK_{BPP}) in Abhängigkeit des flächenspezifischen Widerstands (SFR_{BPP}) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{\text{Energieinhalt}}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} , SK_{BPP} von 418 € m^{-2} und SFR_{BPP} von $1,35 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ bei einer Labor V FB mit 1,67 M, 1,32 W Leistung und 13,2 Wh Energieinhalt und einer genutzten Bipolarplatte SIGRADUR G.

Für die V FBn liegt der für die Optimierung relevante Bereich zwischen 100 € m^{-2} und 418 € m^{-2} sowie $0,05 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ und $1,35 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$. Der Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ beträgt $127,16 \text{ € Wh}^{-1}$, und der Maximalwert liegt bei $127,41 \text{ € Wh}^{-1}$, was einen OB von nur $0,25 \text{ € Wh}^{-1}$ und ein OP von 0,20% ergibt (vgl. **Abbildung 58**).

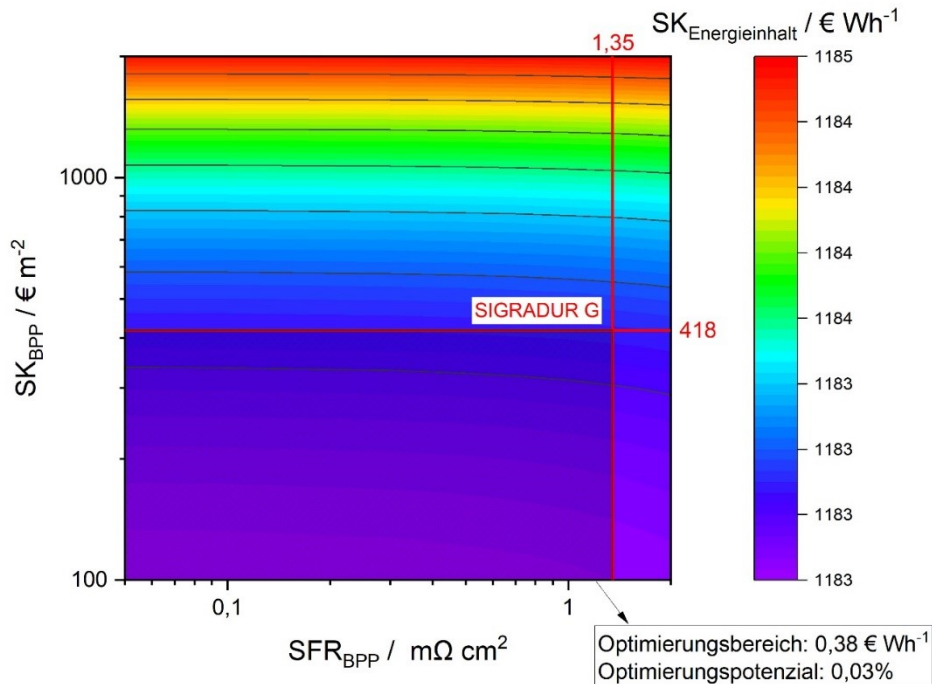


Abbildung 59. Einfluss der spezifischen Kosten der Bipolarplatte (SK_{BPP}) in Abhängigkeit des flächenspezifischen Widerstands (SFR_{BPP}) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} , SK_{BPP} von 418 € m^{-2} und SFR_{BPP} von $1,35 \text{ m} \Omega \text{ cm}^2$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,98 \text{ W}$ Leistung und $9,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt und einer genutzten Bipolarplatte SIGRADUR G.

Bei dieser Sensitivitätsanalyse liegt der für die Optimierung relevante Bereich der MV/TEMPOL FBn zwischen 100 € m^{-2} und 418 € m^{-2} sowie $0,05 \text{ m} \Omega \text{ cm}^2$ und $1,35 \text{ m} \Omega \text{ cm}^2$. Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ beträgt $1182,56 \text{ € Wh}^{-1}$, und der Maximalwert liegt bei $1182,94 \text{ € Wh}^{-1}$. Daraus ergibt sich ein OB von $0,38 \text{ € Wh}^{-1}$ und ein OP von nur $0,03\%$ (vgl. **Abbildung 59**).

Auch das Verhalten bei dieser Optimierungsfrage ist für beide FB-Typen qualitativ identisch und unterscheidet sich lediglich in der quantitativen Ausprägung der $SK_{Energieinhalt}$. Die Reduktion des SFR_{BPP} wirkt sich verringernd auf die benötigte Anzahl der Zellstapel und auf das erforderliche Elektrolytvolumen aus. Die $SK_{Energieinhalt}$ haben hierauf keinen Einfluss. Sie wirken sich lediglich als Faktor im Bereich Leistung der FBn aus, da die Bipolarplatten dort verbaut sind. Die betrachteten SFR -Werte sind jedoch so niedrig, dass das Modell durchgehend eine benötigte Zellstapelanzahl von 1 berechnet, sodass keine signifikanten kostenreduzierenden Effekte darstellbar sind. Die Unterschiede bei den $SK_{Energieinhalt}$ ergeben sich im Modell ausschließlich durch den geringeren Bedarf an Elektrolytvolumen bei niedrigerem SFR_{BPP} . Diese Einsparungen beim Elektrolytvolumen sind jedoch so gering, dass das OP in dieser Fragestellung nahezu vernachlässigbar ist.

7.2.1.1.7. Spezifische Kosten der Elektrode über flächenspezifischem Widerstand der Elektrode

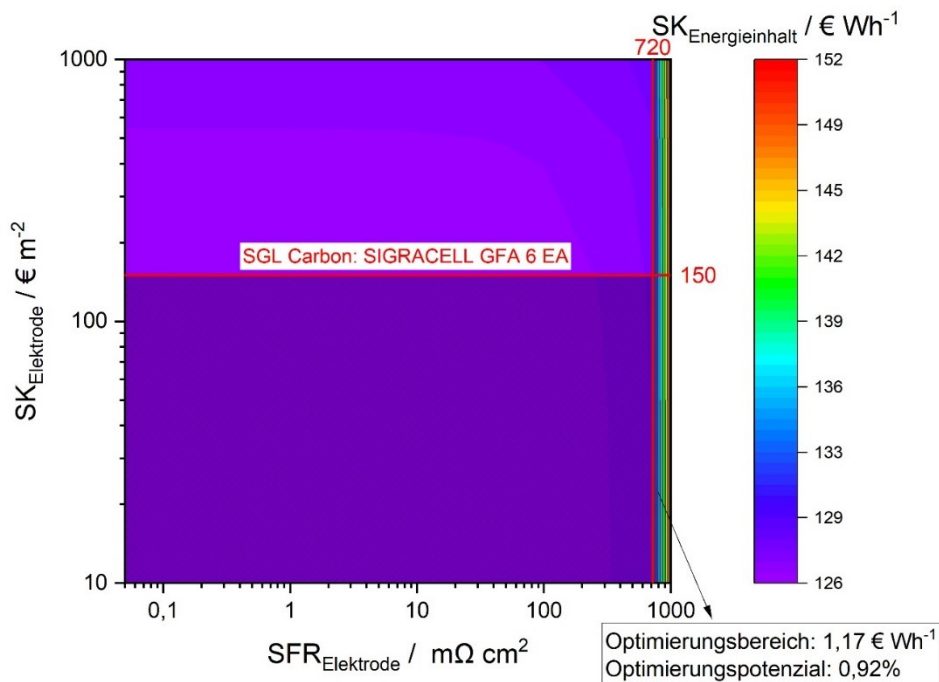


Abbildung 60. Einfluss der spezifischen Kosten der Elektrode ($SK_{Elektrode}$) in Abhängigkeit des flächenspezifischen Widerstands ($SFR_{Elektrode}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} , $SK_{Elektrode}$ von 150 € m^{-2} und $SFR_{Elektrode}$ von $720 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ bei einer Labor VFB mit 1,67 M, 1,32 W Leistung und 13,2 Wh Energieinhalt und einer genutzten Elektrode SGL Carbon: SGRACELL GFA 6 EA.

Die für die Optimierung relevante Fläche der VFBn wird bei dieser Optimierungsfrage zwischen 10 € m^{-2} und 150 € m^{-2} sowie $0,05 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ und $720 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ aufgespannt. Der Minimalwert des $SK_{Energieinhalt}$ beträgt $126,24 \text{ € Wh}^{-1}$, und der Maximalwert liegt bei $127,41 \text{ € Wh}^{-1}$, was einen OB von $1,17 \text{ € Wh}^{-1}$ und ein OP von 0,92% ergibt (vgl. **Abbildung 60**).

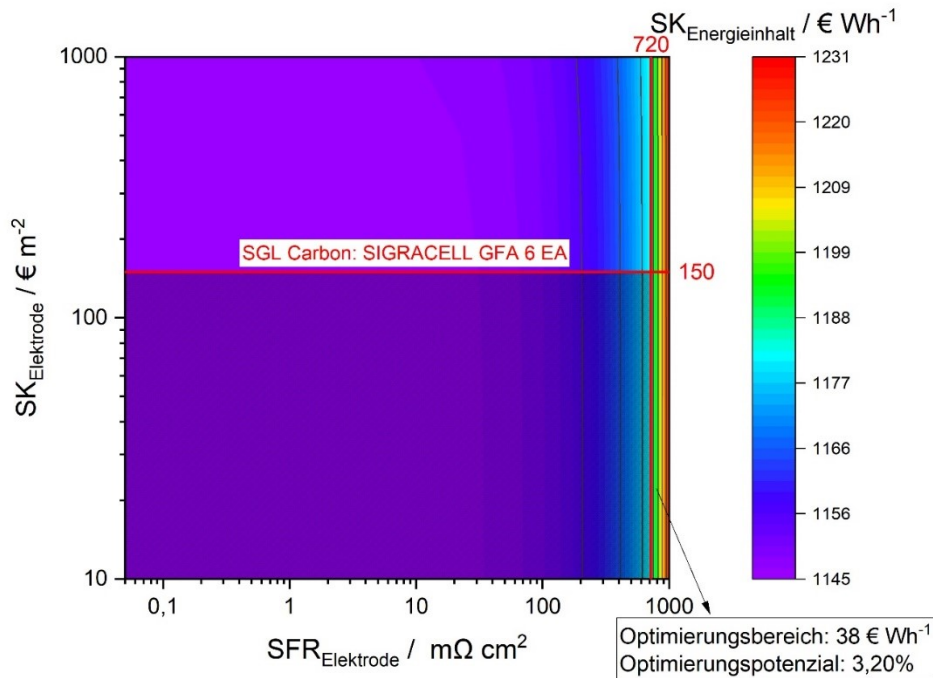


Abbildung 61. Einfluss der spezifischen Kosten der Elektrode ($SK_{Elektrode}$) in Abhängigkeit des flächenspezifischen Widerstands ($SFR_{Elektrode}$) auf die spezifischen Energieeinkaufskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} , $SK_{Elektrode}$ von 150 € m^{-2} und $SFR_{Elektrode}$ von 720 mΩ cm^2 bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,98 \text{ W}$ Leistung und $9,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt und einer genutzten Elektrode SGL Carbon: Sigracell GFA 6 EA.

In **Abbildung 61** ist zu sehen, dass auch für die MV/TEMPOL FBn die relevanten Grenzen zwischen 100 € m^{-2} und 150 € m^{-2} sowie $0,05 \text{ mΩ cm}^2$ und 720 mΩ cm^2 liegen. Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ beträgt $1145,04 \text{ € Wh}^{-1}$ und der Maximalwert $1182,94 \text{ € Wh}^{-1}$, was einen OB von 38 € Wh^{-1} und ein OP von $3,20\%$ ergibt.

Auch bei der Elektrode führt die Reduzierung des SFR zu einer Verringerung der benötigten Zellstapelanzahl und des erforderlichen Elektrolytvolumens. Da die Elektrode ebenfalls in den Zellstapeln verbaut ist, wirken sich die $SK_{Elektrode}$ nur auf den Bereich Leistung der FBn aus. Die Differenzen in den $SK_{Energieinhalt}$ innerhalb der oben genannten Grenzen resultieren ausschließlich aus dem verringerten Elektrolytvolumenbedarf bei niedrigeren $SFR_{Elektrode}$. Diese kostensparenden Effekte sind jedoch so gering, dass das OP nur minimal ausfällt.

Sowohl in **Abbildung 60** als auch **Abbildung 61** ist deutlich zu erkennen, dass eine Erhöhung des $SFR_{Elektrode}$ zu einer sprunghaften Erhöhung der benötigten Zellstapelanzahl führt. Dies wird dadurch begründet, dass bei einem Wert von ca. 1000 mΩ cm^2 die erforderliche Anzahl der Zellstapel im Modell auf 2 steigt, wodurch die zu berücksichtigenden Kosten im Bereich Leistung nahezu verdoppelt werden.

7.2.1.1.8. Spezifische Kosten der Gasdiffusionsschicht über flächenspezifischem Widerstand der Gasdiffusionsschicht

In den untersuchten Durchflussbatterien wurde die Gasdiffusionsschicht GDS090S der Firma QuinTech eingesetzt, da sie neben ihrer hohen elektrischen Leitfähigkeit durch eine gute Kompressibilität und eine homogene Mikrostruktur eine zuverlässige Kontaktierung zwischen Stromabnehmer und Bipolarplatte ermöglicht (vgl. Anhang A).

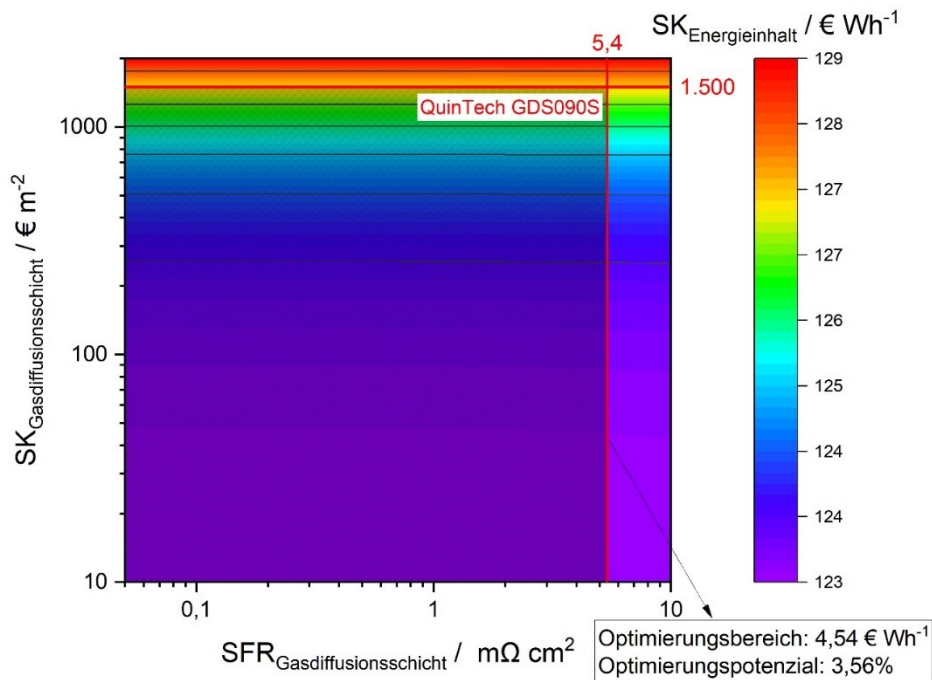


Abbildung 62. Einfluss der spezifischen Kosten des Gasdiffusionsschicht ($SK_{Gasdiffusionsschicht}$) in Abhängigkeit des flächenspezifischen Widerstands ($SFR_{Gasdiffusionsschicht}$) auf die spezifischen Energieeinkaufskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} , $SK_{Gasdiffusionsschicht}$ von 1500 € m^{-2} und $SFR_{Gasdiffusionsschicht}$ von $5,4 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ bei einer Labor V FB mit $1,67 \text{ M}$, $1,32 \text{ W}$ Leistung und $13,2 \text{ Wh}$ Energieinhalt und der genutzten Gasdiffusionsschicht QuinTech GDS090S.

Die $SK_{Energieinhalt}$ bei der Optimierungsfrage zum $SFR_{Gasdiffusionsschicht}$ und den $SK_{Gasdiffusionsschicht}$ sind in **Abbildung 62** dargestellt. Der für die V FBn relevante Bereich liegt zwischen 10 € m^{-2} und 1500 € m^{-2} sowie $0,05 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ und $5,4 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$.

Die $SK_{Energieinhalt}$ reichen von einem Minimalwert von $122,87 \text{ € Wh}^{-1}$ bis zu einem Maximalwert von $127,41 \text{ € Wh}^{-1}$, was einen OB von $4,54 \text{ € Wh}^{-1}$ und ein OP von $3,56\%$ ergibt.

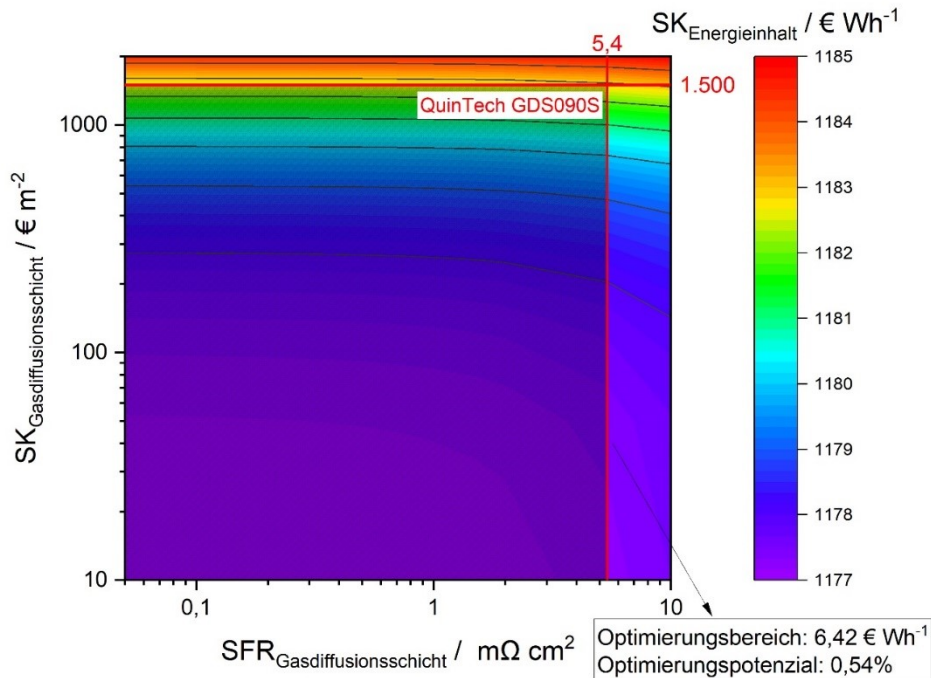


Abbildung 63. Einfluss der spezifischen Kosten der Gasdiffusionsschicht ($SK_{Gasdiffusionsschicht}$) in Abhängigkeit des flächenspezifischen Widerstands ($SFR_{Gasdiffusionsschicht}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} , $SK_{Gasdiffusionsschicht}$ von 1500 € m^{-2} und $SFR_{Gasdiffusionsschicht}$ von $5,4 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,98 \text{ W}$ Leistung und $9,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt und der genutzten Gasdiffusionsschicht QuinTech GDS090S.

Für die MV/TEMPOL FBn wird die für die Optimierung relevante Fläche ebenfalls zwischen 10 € m^{-2} und 1500 € m^{-2} sowie $0,05 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ und $5,4 \text{ m}\Omega \text{ cm}^2$ aufgespannt (vgl. **Abbildung 63**). Die $SK_{Energieinhalt}$ liegen zwischen einem Minimalwert von $1176,52 \text{ € Wh}^{-1}$ und einem Maximalwert von $1182,94 \text{ € Wh}^{-1}$, was einen OB von $6,42 \text{ € Wh}^{-1}$ und ein OP von $0,54\%$ ergibt.

Die Sensitivitätsanalyse bezüglich dieser Optimierungsfrage für die Gasdiffusionsschicht hatte die gleichen Ergebnisse wie bei den anderen widerstandstragenden Komponenten. Auch hier wird die Reduzierung der benötigten Zellstapelanzahl und des Elektrolytvolumens durch die Verringerung des $SFR_{Gasdiffusionsschicht}$ erreicht. Der kostenbeeinflussende Effekt der $SK_{Gasdiffusionsschicht}$ überwiegt jedoch den Beitrag des SFR . Dies ist in der Erhöhung der $SK_{Energieinhalt}$ im oberen Bereich der beiden Graphen in **Abbildung 62** und **Abbildung 63** zu erkennen.

7.2.1.2. Ergebnisse ausgewählter Optimierungsfragen verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien im Labor mit den Elektrolytenpaaren Vanadium/Vanadium, MV/TEMPOL und AQDS/BQDS

In diesem Unterkapitel wurden V FBn mit 1,67 M, MV/TEMPOL FBn mit 0,5 M und eine AQDS/BQDS FBn mit 0,1 M betrachtet. Da auch AQDS/BQDS FBn untersucht wurden, wurde entgegen den vorherigen Untersuchungen ein Betriebszustand mit einer Stromdichte von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ und nicht von 25 mA cm^{-2} gewählt. Dies sollte das frühe Erreichen der Grenzstromdichte, hohe Konzentrationsüberpotenziale und den vermehrten Eintritt möglicher Nebenreaktionen verhindern.^{287–289}

Mit der selbstentwickelten Stand-Alone-Software FLOTE⁶⁵ konnte der Zeitaufwand zur Erstellung der Datenbasis für die notwendigen Sensitivitätsanalysen deutlich reduziert werden. So konnten größere und datenstärkere Matrizen für die Optimierungsfragen erstellt werden. Dadurch war es auch möglich, in diesem Unterkapitel die Werte der Variablen anzugeben, bei denen das Optimum im untersuchten Bereich erreicht wurde. Bei einigen Untersuchungen wurde diese höhere Auflösung genutzt, um innerhalb der Untersuchungsgrenzen der einzelnen Variablen einen Teil der Grafik zu vergrößern, um die Charakteristika der jeweiligen Optimierungsfrage grafisch darzustellen. Diese Vergrößerung hat jedoch keinen Einfluss auf das Optimierungspotenzial oder den Optimierungsbereich.

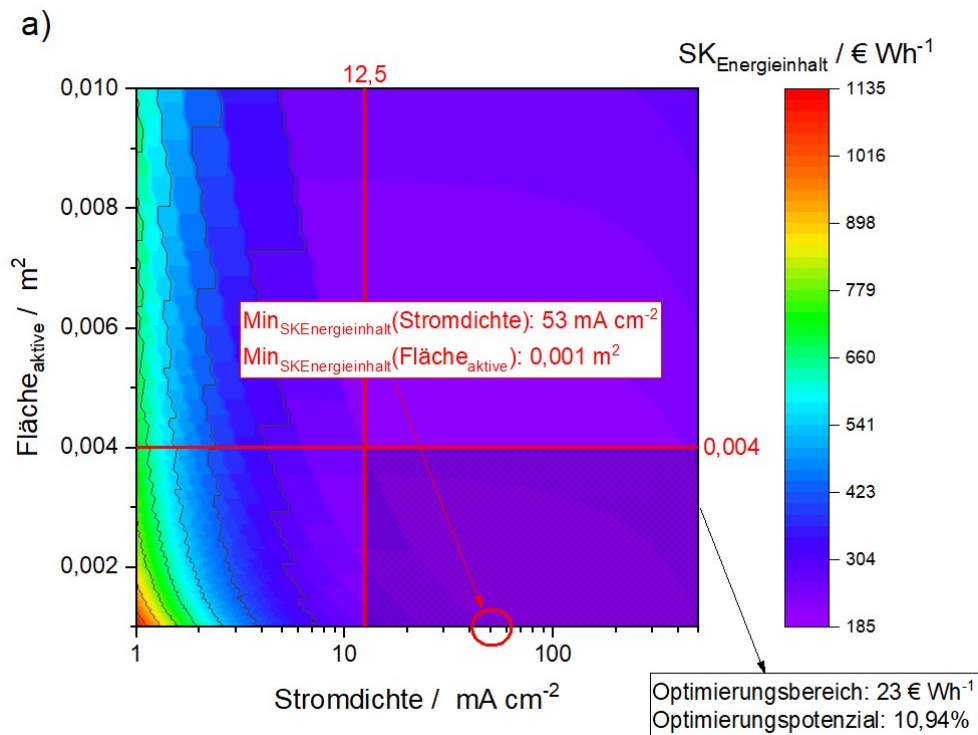
Zudem wurden zur Berechnung des Optimierungspotenzials und des Optimierungsbereichs die genaueren Gleichungen Gl. 46 und Gl. 48 genutzt, die den bereits erreichten Betriebspunkt der FB berücksichtigen.

Die folgenden Untersuchungen beinhalten Variationen der Stromdichte, der Konzentration der aktiven Spezies, der effektiven Zellspannung, des inneren Widerstands und der aktiven Fläche. Die Variationen der spezifischen Komponentenkosten in Abhängigkeit von deren flächenspezifischem Widerstand (siehe Unterkapitel 7.2.1.1.5 bis 1177.2.1.1.8) wurden in diesen Untersuchungen nicht mehr betrachtet, da deren Optimierungspotenziale über die FB-Typen hinweg durchweg gering waren.

Die Stromdichten wurden für alle FBn zwischen 1 mA cm^{-2} und 500 mA cm^{-2} untersucht. Der Bereich der *Konzentration_{aktive Spezies}* wurde aufgrund der Ergebnisse der vorherigen Untersuchungen leicht reduziert und liegt nun zwischen $0,01 \text{ mol L}^{-1}$ und $2,4 \text{ mol L}^{-1}$, statt vorher 4 mol L^{-1} . Während die obere Grenze anhand der maximalen Löslichkeit von AQDS/BQDS^{15,189} gewählt wurde, orientiert sich die untere Grenze an der niedrigsten im Labor verwendeten Molarität ($0,1 \text{ mol L}^{-1}$) ergänzt um einen weiteren Wert, der noch eine Größenordnung darunter liegt. Der Untersuchungsbereich der $U_{\text{Zelle eff}}$ lag zwischen 0,3 V und 2 V. Die untere Grenze ergibt sich aus den im Labor verwendeten Spannungen, die obere Grenze basiert auf Studien zu FBn mit wässrigen Elektrolyten und berücksichtigt die Grenze der Wasserstoff- oder Sauerstoffentwicklung in wässrigen FBn^{130,278}. Die Betriebspunkte lagen bei 1,32 V für V FBn, 0,98 V für MV/TEMPOL FBn und 0,49 V für AQDS/BQDS FBn.

Zur Ermittlung sinnvoller Grenzen für den inneren Widerstand wurde dieser mittels elektrochemischer Impedanzspektroskopie für jeden FB-Typ gemessen: für die 1,67 M VFBn bei 0,0242 Ω , für die MV/TEMPOL FBn bei 0,087 Ω und für die 0,1 M AQDS/BQDS FBn bei 0,070 Ω . Der Untersuchungsbereich für die Variation der Größe der aktiven Fläche lag zwischen 0,001 m² und 0,01 m², wobei die durchgehend genutzte Geometrie der Labor-FBn eine aktive Fläche von 0,004 m² hatte.

7.2.1.2.1. Aktive Fläche über Stromdichte



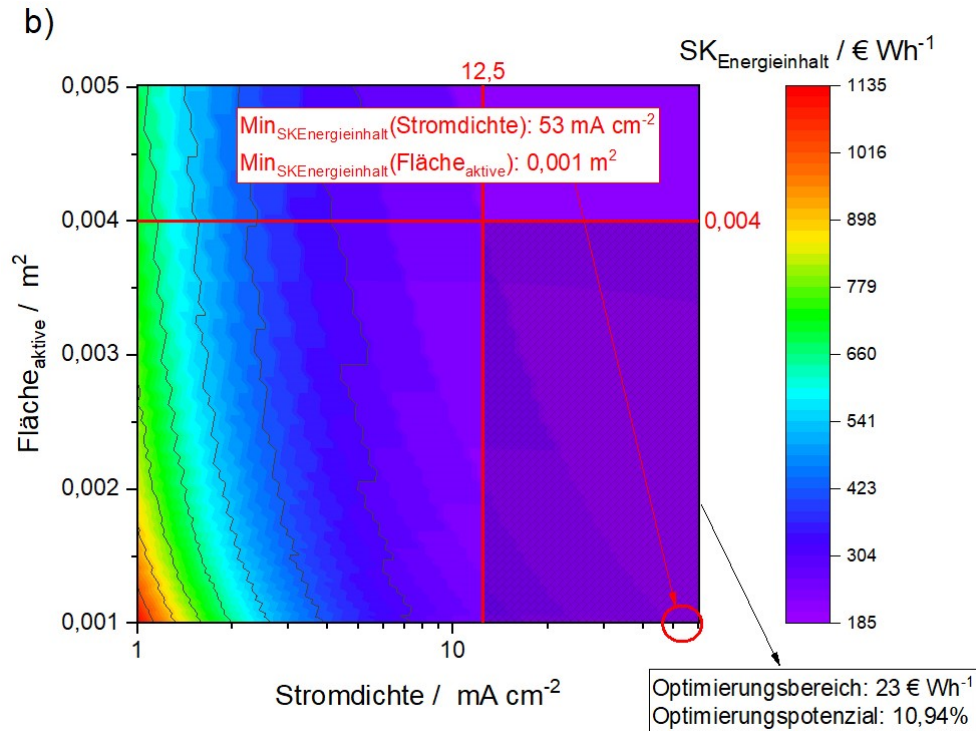


Abbildung 64. Einfluss der aktiven Fläche ($Fläche_{aktiv}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm⁻² Stromdichte und 0,004 m² $Fläche_{aktiv}$ bei einer Labor V FB mit 1,67 M, 0,68 W Leistung und 6,8 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Die Sensitivitätsanalyse der 1,67 M V FBn ergab, dass die für die Optimierung relevante Fläche zwischen 12,5 mA cm⁻² und 500 mA cm⁻² sowie 0,001 m² und 0,004 m² liegt (vgl. **Abbildung 64**). Die $SK_{Energieinhalt}$ variieren dabei zwischen einem Minimalwert von 185,53 € Wh⁻¹ und einem Maximalwert von 208,32 € Wh⁻¹, was zu einem *OB* von 23 € Wh⁻¹ und einem *OP* von 10,94% führt. Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ wird bei einer Stromdichte von 53 mA cm⁻² und einer $Fläche_{aktiv}$ von 0,001 m² erreicht.

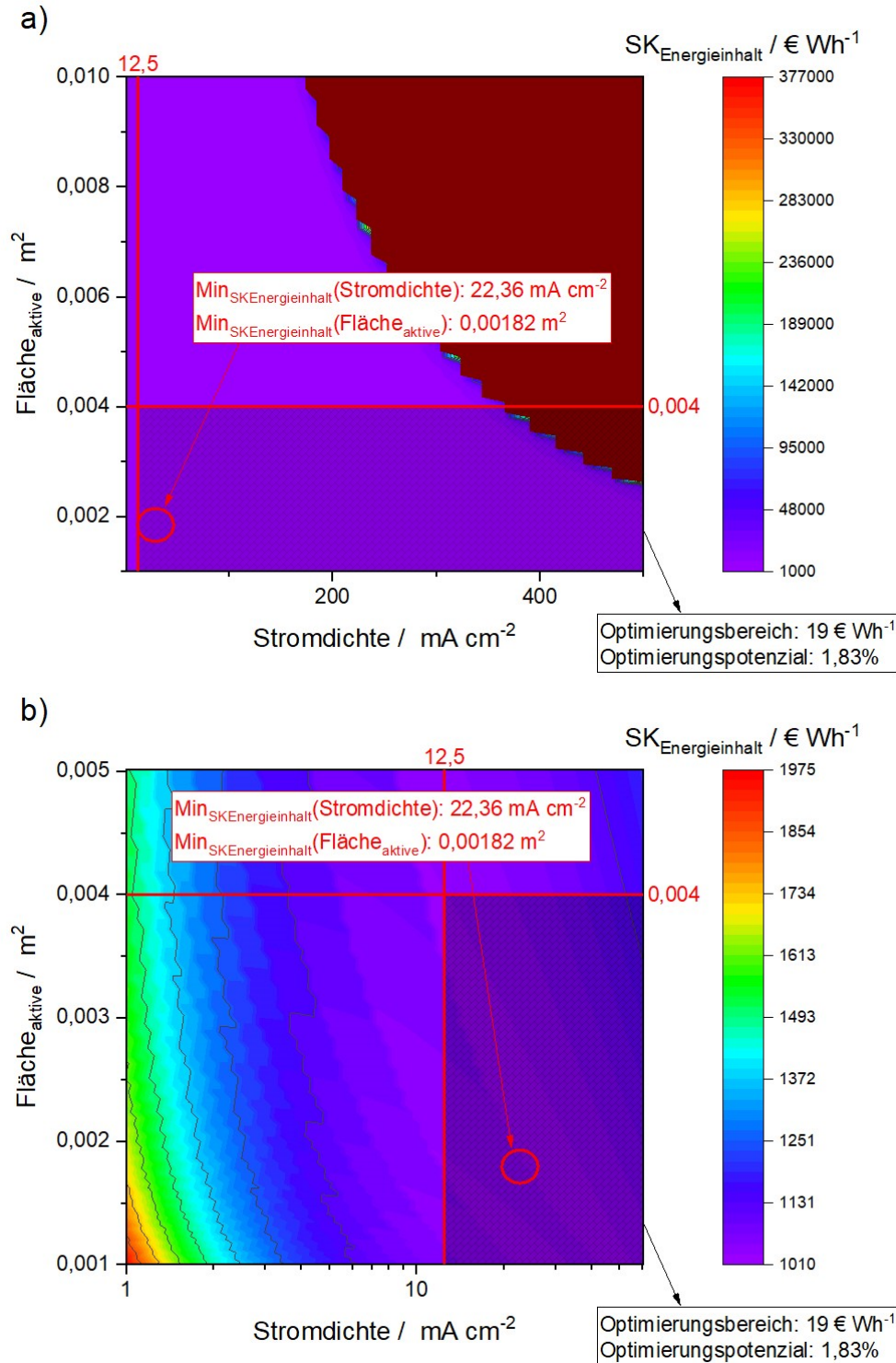


Abbildung 65. Einfluss der aktiven Fläche ($Fläche_{aktive}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm⁻² Stromdichte und 0,004 m² Fläche_{aktive} bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit 0,5 M, 0,55 W Leistung und 5,53 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Für die 0,5 M MV/TEMPOL FBn wurde die für die Optimierung relevante Fläche zwischen $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ und 500 mA cm^{-2} sowie $0,001 \text{ m}^2$ und $0,004 \text{ m}^2$ aufgespannt (vgl. **Abbildung 65**). Der Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ liegt bei $1012,32 \text{ € Wh}^{-1}$, während der Maximalwert bei $1031,25 \text{ € Wh}^{-1}$ liegt, was einen OB von 19 € Wh^{-1} und ein OP von 1,83% ergibt. Der Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wird bei einer Stromdichte von $23,79 \text{ mA cm}^{-2}$ und einer $Fläche_{\text{aktive}}$ von $0,00182 \text{ m}^2$ erreicht.

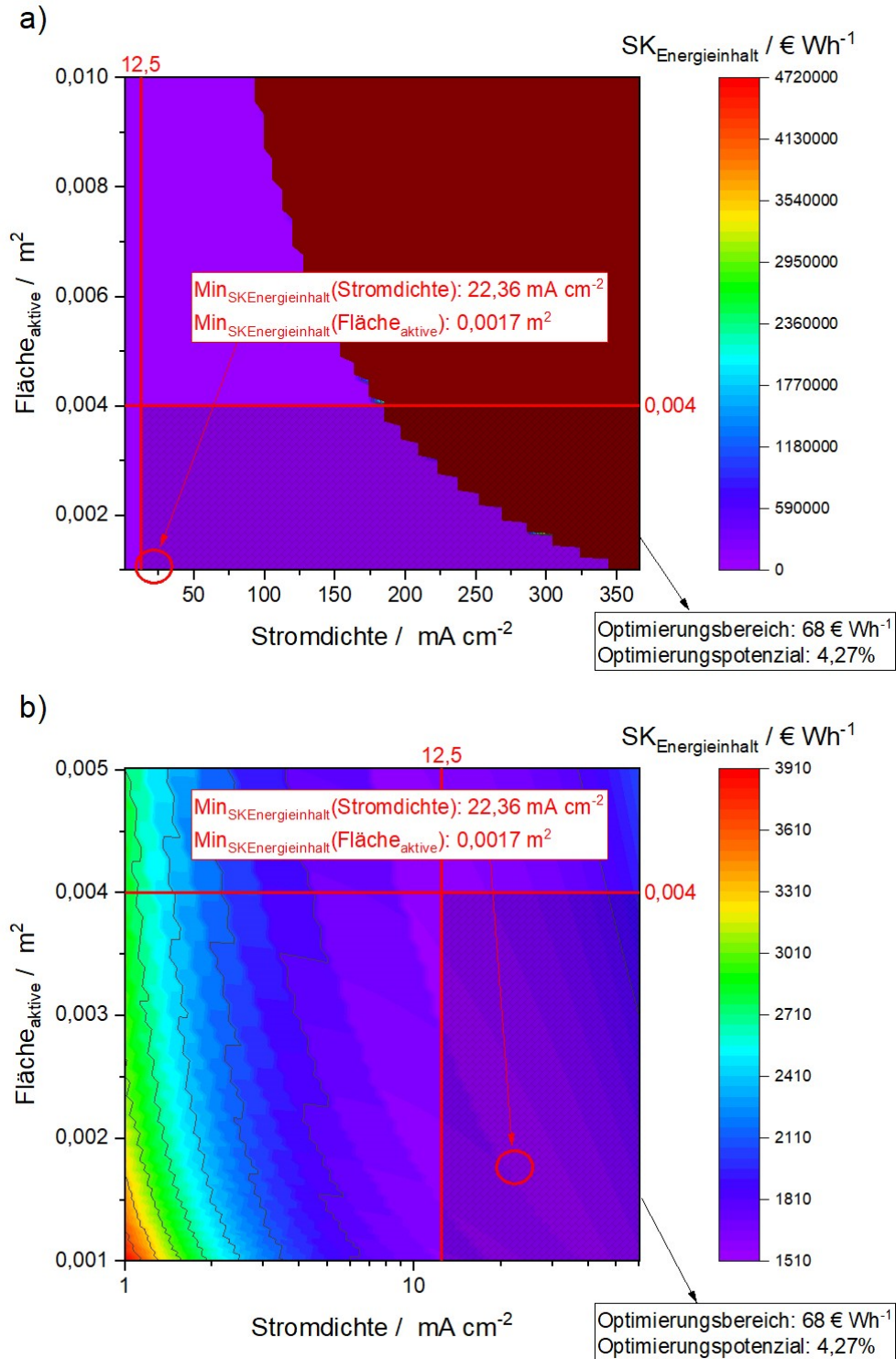


Abbildung 66. Einfluss der aktiven Fläche ($Fläche_{aktive}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm⁻² Stromdichte und 0,004 m² $Fläche_{aktive}$ bei einer Labor AQDS/BQDS FB mit 0,1 M, 0,18 W Leistung und 1,8 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Auch bei den 0,1 M AQDS/BQDS FBn wurde die für die Optimierung relevante Fläche zwischen $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ und 500 mA cm^{-2} sowie $0,001 \text{ m}^2$ und $0,004 \text{ m}^2$ aufgespannt (vgl. **Abbildung 66**). Der *OB* von 68 € Wh^{-1} ergibt sich aus der Differenz zwischen dem Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ von $1516,77 \text{ € Wh}^{-1}$ und dem Maximalwert von $1584,43 \text{ € Wh}^{-1}$, was ein *OP* von 4,27% ergibt. Der Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wird bei einer Stromdichte von $22,36 \text{ mA cm}^{-2}$ und einer $Fläche_{\text{aktive}}$ von $0,0017 \text{ m}^2$ erreicht.

Der vergrößerte Bereich, der zur besseren Veranschaulichung beim Vergleich aller FB-Typen dieser Optimierungsfrage gewählt wurde, liegt bei einer $Fläche_{\text{aktive}}$ zwischen $0,001 \text{ m}^2$ und $0,005 \text{ m}^2$ sowie einer Stromdichte zwischen 1 mA cm^{-2} und 60 mA cm^{-2} .

Das Minimum für die $SK_{\text{Energieinhalt}}$ in mittleren Stromdichtebereichen erklärt sich dadurch, dass mit steigenden Stromdichten die Anzahl der Zellen, die für die Erreichung der benötigten Leistung erforderlich ist, sinkt. Gleichzeitig steigt jedoch das benötigte Elektrolytvolumen aufgrund des R_{innerer} -Drop der Zellen, was zu einer Erhöhung der Kosten im Bereich Energie führt. Da die benötigte Zellanzahl nur ganzzahlig verändert werden kann, sinkt diese nicht unter die Anzahl von einer Zelle, weshalb steigende Stromdichten oberhalb dieses Werts keine kostenmindernde Wirkung mehr auf den Bereich Leistung haben. Mit zunehmender Stromdichte steigt auch das benötigte Elektrolytvolumen, was eine kostensteigernde Wirkung auf den Bereich Energie hat. Daher liegt das Minimum für die $SK_{\text{Energieinhalt}}$ im Bereich mittlerer Stromdichten.

Die Veränderung der $Fläche_{\text{aktive}}$ hat hauptsächlich Auswirkungen auf den Bereich Leistung, da die Anzahl der Zellen mit zunehmender Fläche sinkt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass bei gleichbleibender Stromdichte und größerer $Fläche_{\text{aktive}}$ mehr Energie in gleicher Zeit an die Elektrolyten übertragen werden kann. Das benötigte Elektrolytvolumen steigt mit zunehmender $Fläche_{\text{aktive}}$ nur moderat, weshalb der gegenläufige Effekt weniger stark ausgeprägt ist.

Die niedrigen Molaritäten der MV/TEMPOL FBn und AQDS/BQDS FBn führen im Modell dazu, dass bei steigenden Stromdichten die errechnete benötigte Anzahl der Zellstapel und des Elektrolytvolumens negativ wird. Da dies in der mathematischen Struktur des Modells begründet ist und in der Realität nicht sinnvoll erscheint, werden diese Werte in den Graphen nicht dargestellt.

Für die untersuchten V FBn wurde das Minimum bei einer Stromdichte von 53 mA cm^{-2} ermittelt, während es für die AQDS/BQDS FBn bei $22,36 \text{ mA cm}^{-2}$ und für die MV/TEMPOL FBn bei $23,79 \text{ mA cm}^{-2}$ lag. Dies ist auf die höheren R_{innerer} , die niedrigeren Löslichkeiten und die höheren $SK_{\text{aktive Spezies}}$ zurückzuführen.

7.2.1.2.2. Konzentration der aktiven Spezies über Stromdichte

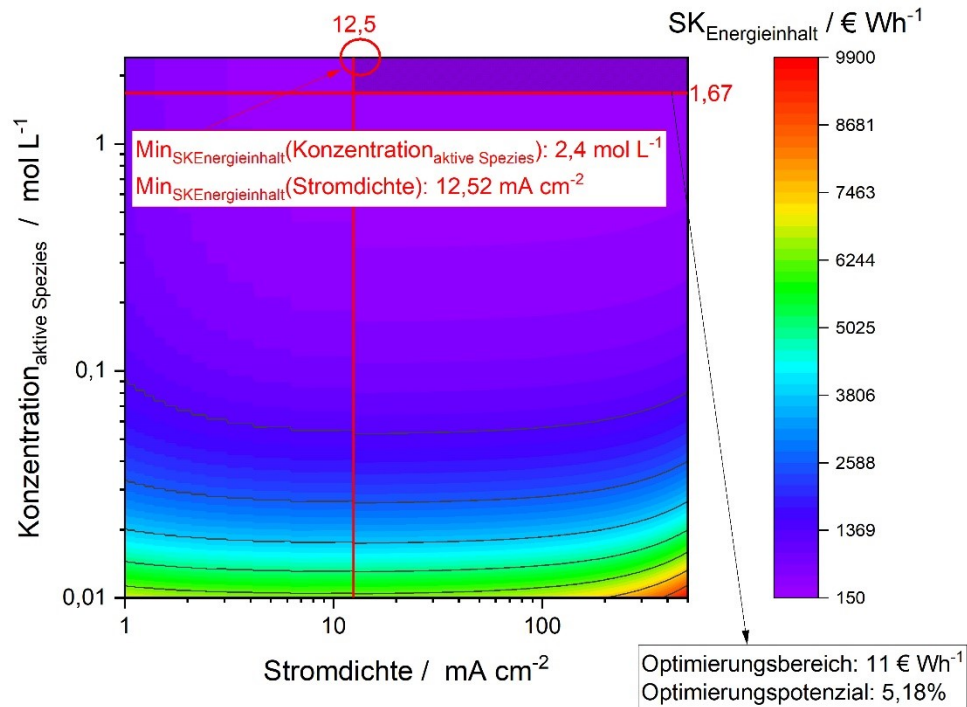


Abbildung 67. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67\text{ M}$ bei einer Labor VFB mit $0,68\text{ W}$ Leistung und $6,8\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Bei dieser Optimierungsfrage wurde die Fläche zur Optimierung für die $1,67\text{ M VFBn}$ zwischen $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ und 500 mA cm^{-2} sowie $1,67\text{ mol L}^{-1}$ und $2,4\text{ mol L}^{-1}$ aufgespannt (vgl. **Abbildung 67**). Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ von $196,96\text{ € Wh}^{-1}$ und der Maximalwert von $207,71\text{ € Wh}^{-1}$ ergaben einen OB von 11 € Wh^{-1} und ein OP von $5,18\%$. Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einer Stromdichte von $12,52\text{ mA cm}^{-2}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $2,4\text{ mol L}^{-1}$ erreicht.

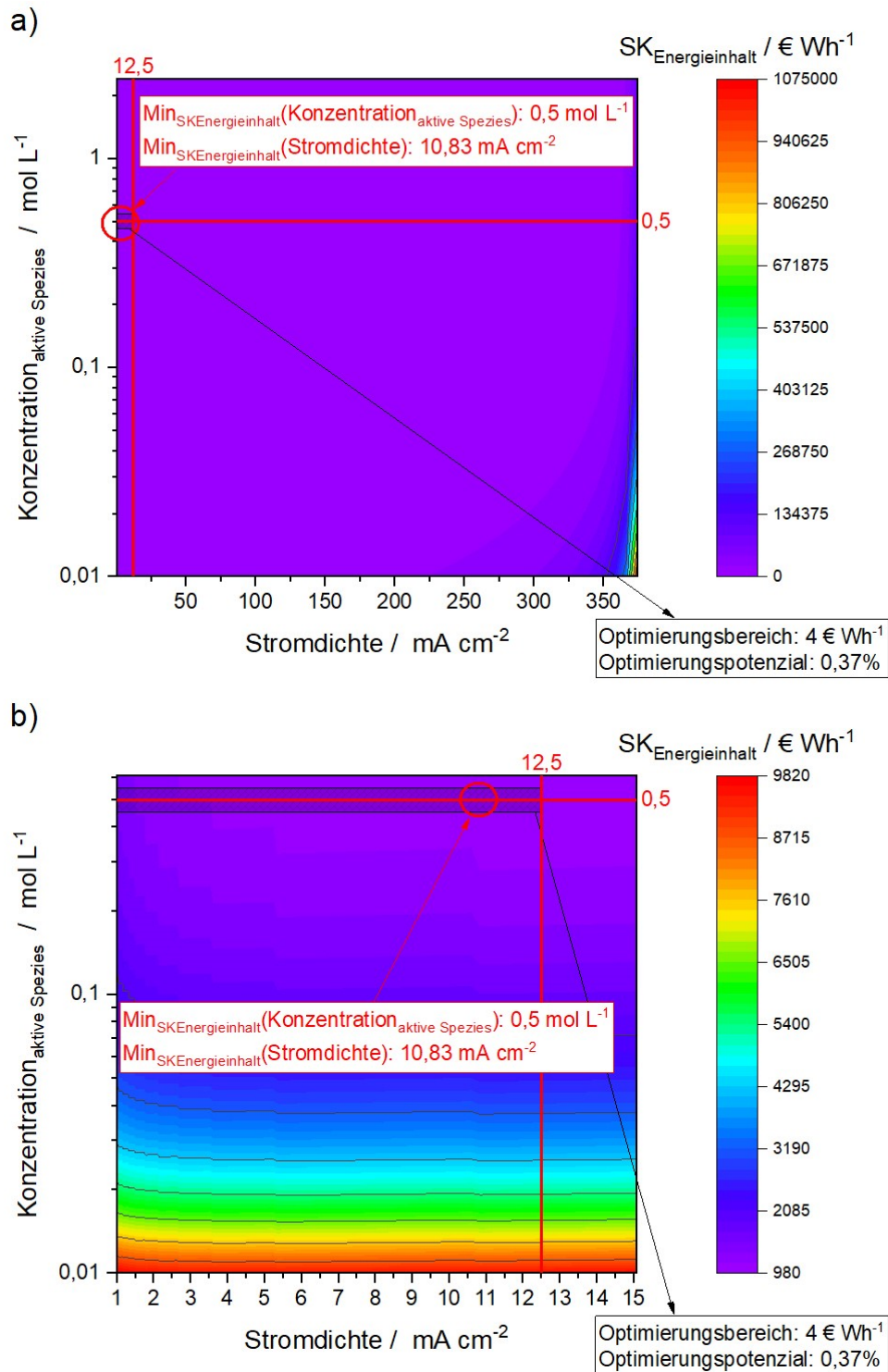
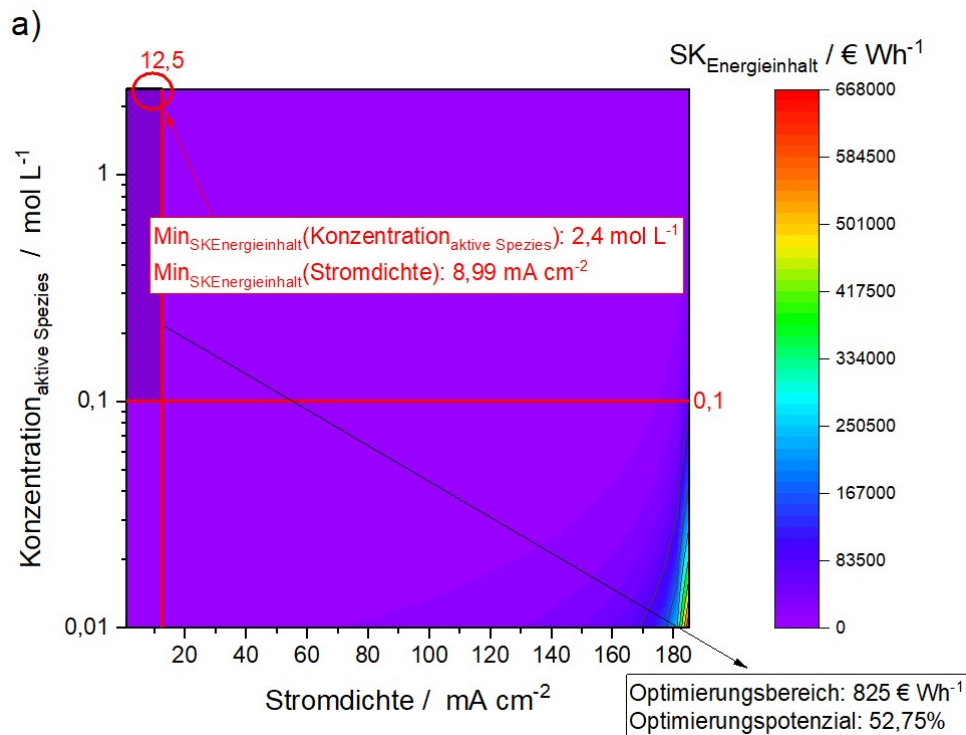


Abbildung 68. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm⁻² Stromdichte und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von 0,5 M bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit 0,5 M mit 0,55 W Leistung und 5,53 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Die 0,5 M MV/TEMPOL FBn hatten die Fläche zur Optimierung zwischen 1 mA cm^{-2} und $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$, begrenzt durch die maximale Löslichkeit der aktiven Spezies²⁷ bei $0,5 \text{ mol L}^{-1}$ (vgl. **Abbildung 68**). Der Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ von $1026,99 \text{ € Wh}^{-1}$ und der Maximalwert von $1030,78 \text{ € Wh}^{-1}$ ergaben einen OB von 4 € Wh^{-1} und ein OP von $0,37\%$. Der Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wurde bei einer Stromdichte von $10,83 \text{ mA cm}^{-2}$ und einer $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ von $0,5 \text{ mol L}^{-1}$ erreicht.



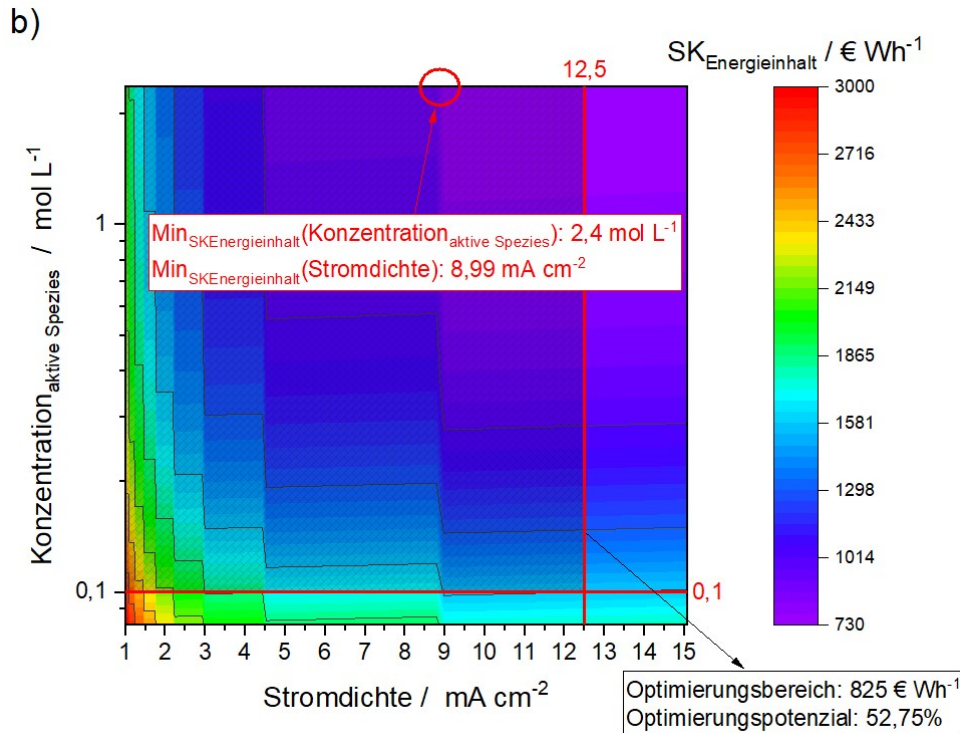


Abbildung 69. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,1 \text{ M}$ bei einer Labor AQDS/BQDS FB mit $0,1 \text{ M}$ mit $0,18 \text{ W}$ Leistung und $1,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Die Fläche zur Optimierung der $0,1 \text{ M}$ AQDS/BQDS FBn wurde zwischen 1 mA cm^{-2} und $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ sowie $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ und $2,4 \text{ mol L}^{-1}$ aufgespannt (vgl. **Abbildung 69**). Mit einem Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ von $738,67 \text{ € Wh}^{-1}$ und einem Maximalwert von $1563,38 \text{ € Wh}^{-1}$ ergibt sich ein OB von 825 € Wh^{-1} und ein OP von 52,75%. Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einer Stromdichte von $8,99 \text{ mA cm}^{-2}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $2,4 \text{ mol L}^{-1}$ erreicht.

Die vergrößerten Bereiche bei dieser Optimierungsfrage wurden nicht mit identischen Grenzen gewählt, da dies nicht zu einer verbesserten Sichtbarkeit der Charakteristika der Isokostenlinien beigetragen hätte. Dies wurde durch die Anwendung leicht unterschiedlicher Grenzen erreicht.

Im Vergleich aller FB-Typen ist an den U-förmigen Isokostenlinien ablesbar, dass bei dieser Optimierungsfrage die $SK_{Energieinhalt}$ der Batterie bei mittleren Stromdichten minimal sind. Werte, die deutlich über oder unter diesen mittleren Werten liegen, erhöhen tendenziell die $SK_{Energieinhalt}$. Die Gründe hierfür wurden bereits im Unterkapitel 7.2.1.2.1 erläutert.

Die spezifischen Kosten sinken mit zunehmender $Konzentration_{aktive\ Spezies}$. Bei höheren Elektrolytkonzentrationen ist das zur Deckung des Energiebedarfs erforderliche

Elektrolytvolumen geringer, was die meisten Investitionskosten (z. B. für den Tank, Pumpen usw.) reduziert. Mehr aktive Spezies ermöglichen es, eine höhere Stromdichte zu erzielen und trotz eines höheren $R_{innerer}$ -Drop die Energieanforderungen zu erfüllen, was gleichzeitig die Anzahl der in den Stapeln benötigten Zellen verringert. Die geringsten Batteriekosten werden also bei mittleren Stromdichten und hohen $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ erreicht.

Das Minimum wurde bei Stromdichten von $12,52\text{ mA cm}^{-2}$ (V FBn), $10,83\text{ mA cm}^{-2}$ (MV/TEMPOL FBn) und $8,99\text{ mA cm}^{-2}$ (AQDS/BQDS FBn) erreicht. Bezüglich der $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ liegt das Minimum stets bei den höchsten erreichbaren Werten, was für die MV/TEMPOL FBn $0,5\text{ mol L}^{-1}$ und für die beiden anderen $2,4\text{ mol L}^{-1}$ beträgt. Die MV/TEMPOL FBn sind aufgrund der maximalen Löslichkeit von $0,5\text{ mol L}^{-1}$ auf diesen Wert beschränkt, was ebenfalls das niedrige OP von 0,37% erklärt.

7.2.1.2.3. Effektive Zellspannung über Stromdichte

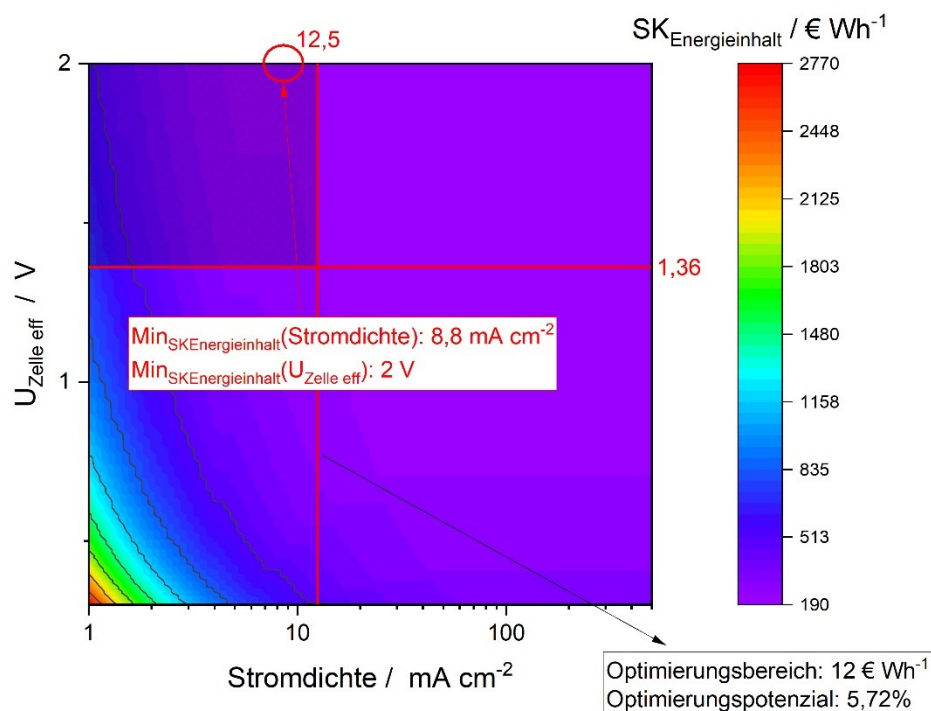


Abbildung 70. Einfluss der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte und einer $U_{Zelle\ eff}$ von $1,36\text{ V}$ bei einer Labor V FB mit $1,67\text{ M}$, $0,68\text{ W}$ Leistung und $6,8\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Abbildung 70 stellt dar, dass die Fläche zur Optimierung bei den $1,67\text{ M}$ MV/TEMPOL FBn zwischen 1 mA cm^{-2} und $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ sowie $1,36\text{ V}$ und 2 V aufgespannt wurde. Der OB von 12 €/Wh^{-1} ergibt sich aus dem Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ von $196,28\text{ €/Wh}^{-1}$ und dem Maximalwert von $208,19\text{ €/Wh}^{-1}$, was ein OP

von 5,72% zur Folge hat. Der Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wurde bei einer Stromdichte von $8,8 \text{ mA cm}^{-2}$ und einer $U_{\text{Zelle eff}}$ von 2 V erreicht.

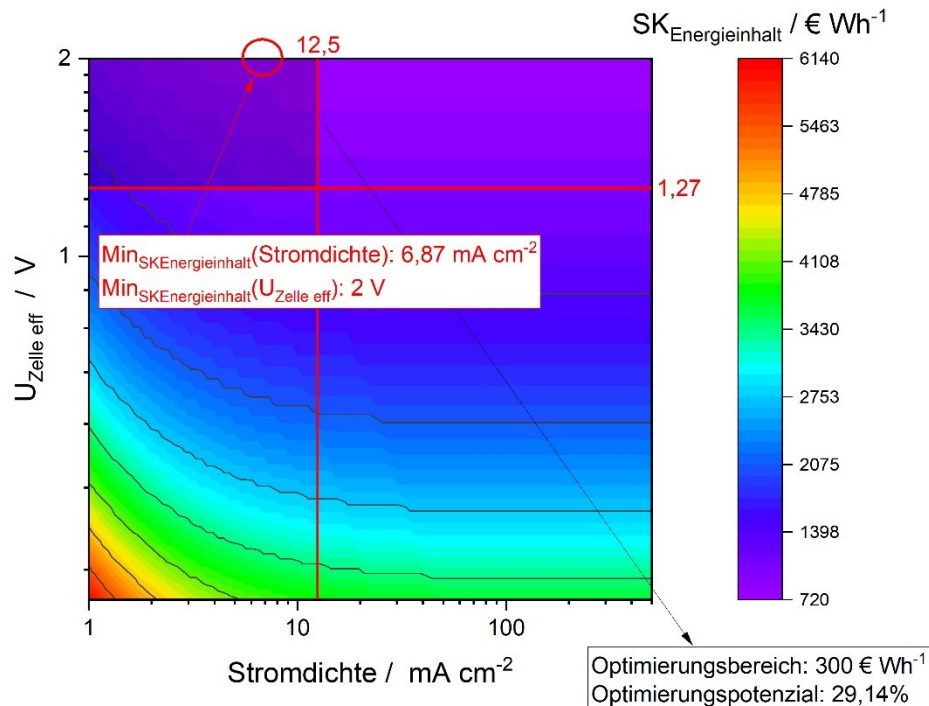


Abbildung 71. Einfluss der effektiven Zellspannung ($U_{\text{Zelle eff}}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{\text{Energieinhalt}}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte und einer $U_{\text{Zelle eff}}$ von $1,27 \text{ V}$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,5 \text{ M}$, $0,55 \text{ W}$ Leistung und $5,53 \text{ Wh}$ Energieinhalt.

Bei den $0,5 \text{ M}$ MV/TEMPOL FBn wurde die Fläche zur Optimierung zwischen 1 mA cm^{-2} und $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ sowie zwischen $1,27 \text{ V}$ und 2 V aufgespannt (vgl. **Abbildung 71**). Der OB von 300 €/Wh^{-1} ergab sich aus dem Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ von $730,02 \text{ €/Wh}^{-1}$ und dem Maximalwert von $1030,21 \text{ €/Wh}^{-1}$, was ein OP von $29,14\%$ zur Folge hatte. Der Minimalwert der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wurde bei einer Stromdichte von $6,87 \text{ mA cm}^{-2}$ und einer $U_{\text{Zelle eff}}$ von 2 V erreicht.

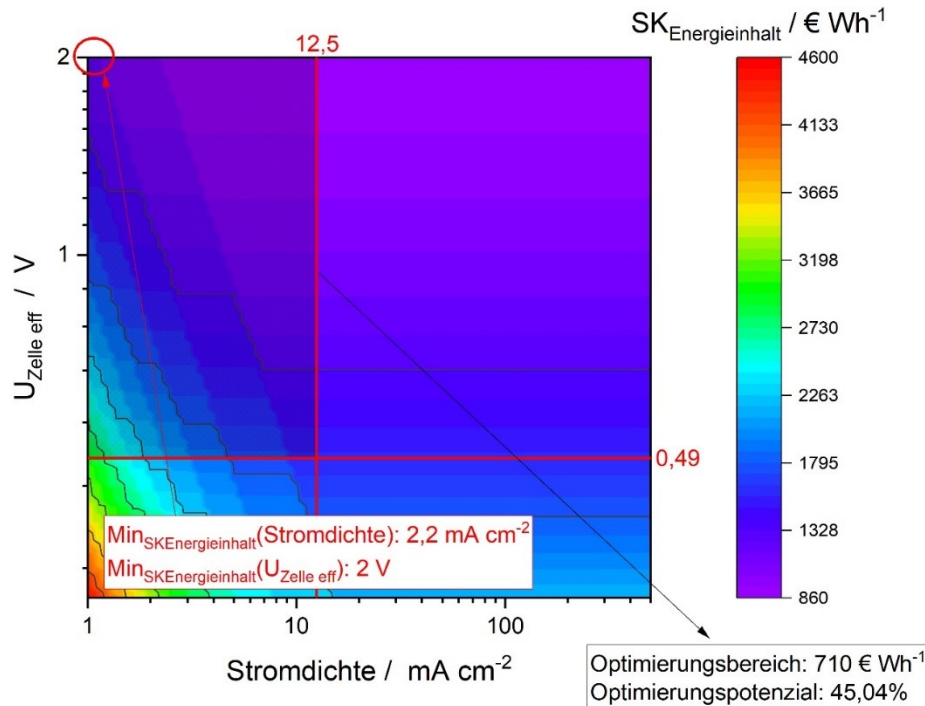


Abbildung 72. Einfluss der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte und einer $U_{Zelle\ eff}$ von $0,49\text{ V}$ bei einer Labor AQDS/BQDS FB mit $0,1\text{ M}$, $0,18\text{ W}$ Leistung und $1,8\text{ Wh}$ Energieinhalt.

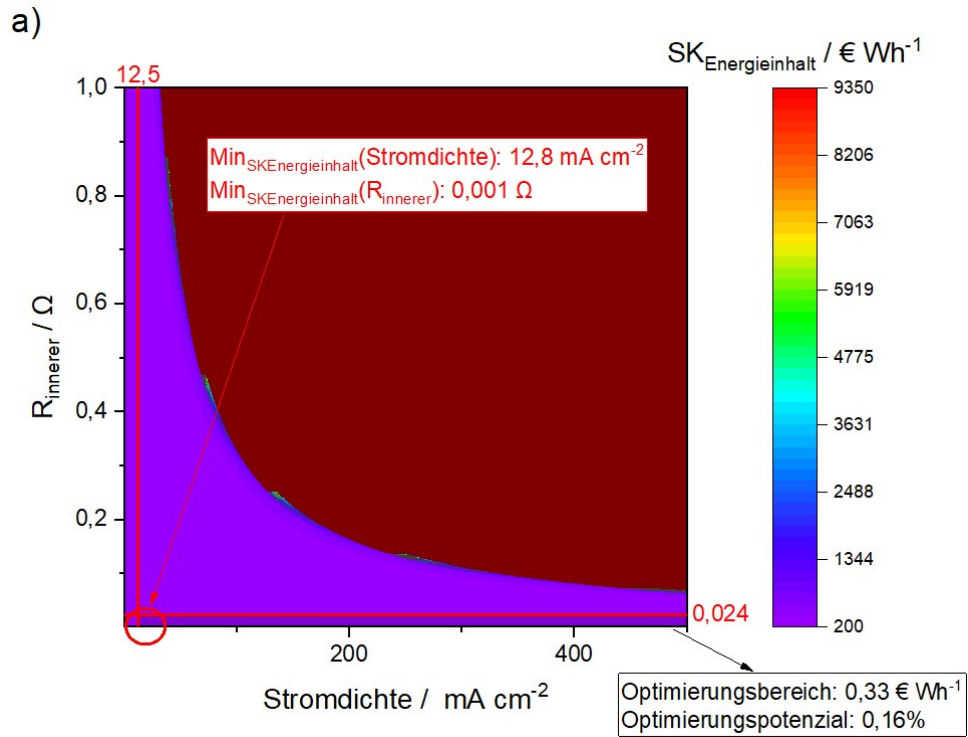
Die $0,1\text{ M}$ AQDS/BQDS FBn wiesen die Flächen zur Optimierung zwischen 1 mA cm^{-2} und $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ sowie zwischen $0,49\text{ V}$ und 2 V auf (vgl. **Abbildung 72**). Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ lag bei $866,72\text{ €/Wh}^{-1}$, der Maximalwert bei $1576,91\text{ €/Wh}^{-1}$, was zu einem OB von 710 €/Wh^{-1} und einem OP von $45,04\%$ führte. Der Minimalwert der $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einer Stromdichte von $2,2\text{ mA cm}^{-2}$ und einer $U_{Zelle\ eff}$ von 2 V erreicht.

Für alle drei untersuchten FB-Typen wurde das Minimum der $SK_{Energieinhalt}$ bei der höchsten $U_{Zelle\ eff}$ von 2 V erreicht. Die $U_{Zelle\ eff}$ bestimmt zusammen mit der Stromstärke direkt die Leistung der FB. Eine Reduzierung der Zellspannung führt zu einer Erhöhung der benötigten Zellanzahl, da die insgesamt zu erreichende Leistung eine festgelegte Größe ist und daher mehr Zellen erforderlich sind. Ebenso steigt das benötigte Elektrolytvolumen, das direkten Einfluss auf die geforderte Speicherzeit von 10 Stunden hat. Beide Effekte wirken sich bei einer Verringerung der Zellspannung kostensteigernd aus, sodass eine hohe $U_{Zelle\ eff}$ aus Kostengründen bevorzugt wird.

Das Minimum bezüglich der Stromdichte findet sich bei niedrigen Werten: $8,8\text{ mA cm}^{-2}$ (V FBn), $6,87\text{ mA cm}^{-2}$ (MV/TEMPOL FBn) und $2,2\text{ mA cm}^{-2}$ (AQDS/BQDS FBn). Dies liegt daran, dass eine Erhöhung der Stromdichte zwar zu einer Verringerung der benötigten Zellanzahl führt, dieser Wert jedoch diskret ist und sinnvollerweise nicht unter 1 reduziert werden kann. Gleichzeitig steigt das benötigte Elektrolytvolumen, was kostensteigernd wirkt. Der kostenreduzierende Effekt der Verringerung der Stromdichte

auf das Elektrolytvolumen ist hingegen kontinuierlich, was das Minimum der $SK_{Energieinhalt}$ bei niedrigen Stromdichten erklärt.

7.2.1.2.4. Innerer Widerstand über Stromdichte



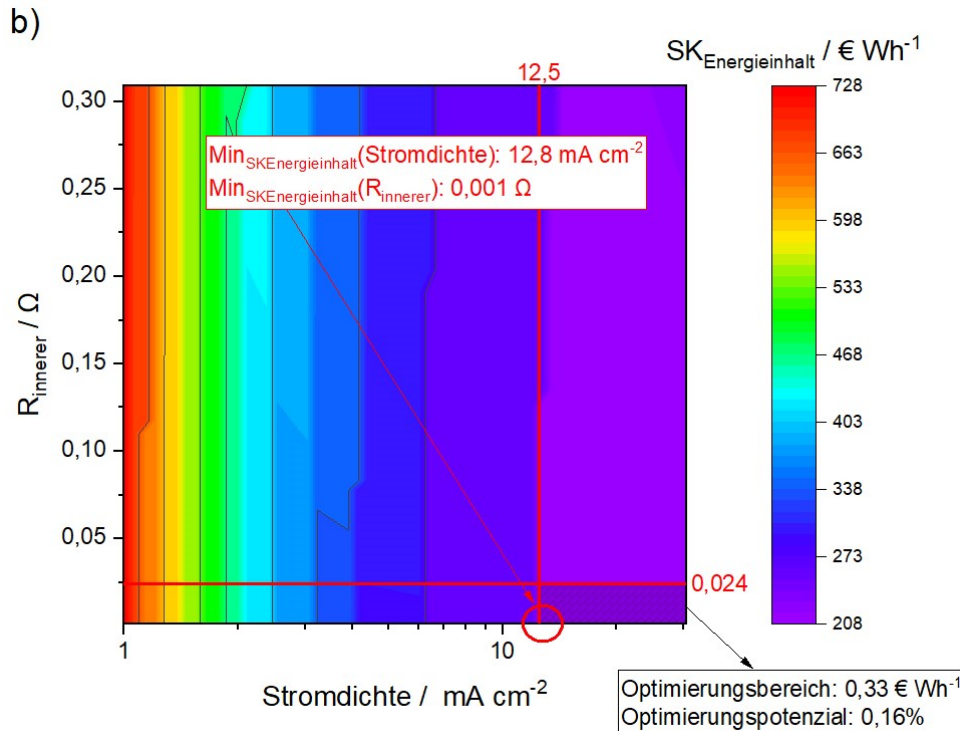


Abbildung 73. Einfluss des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm^{-2} Stromdichte und einem $R_{innerer}$ von 0,024 Ω bei einer Labor V FB mit 1,67 M, 0,68 W Leistung und 6,8 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Die zur Optimierung relevante Fläche der 1,67 M V FBn wurde zwischen 12,5 mA cm^{-2} und 500 mA cm^{-2} sowie zwischen 0,001 Ω und 0,024 Ω aufgespannt (vgl. **Abbildung 73**). Der minimale Wert des $SK_{Energieinhalt}$ von 208,15 € Wh^{-1} und der maximale Wert von 208,47 € Wh^{-1} ergaben einen OB von 0,33 € Wh^{-1} und ein OP von 0,16%. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einer Stromdichte von 12,8 mA cm^{-2} und einem $R_{innerer}$ von 0,001 Ω erreicht.

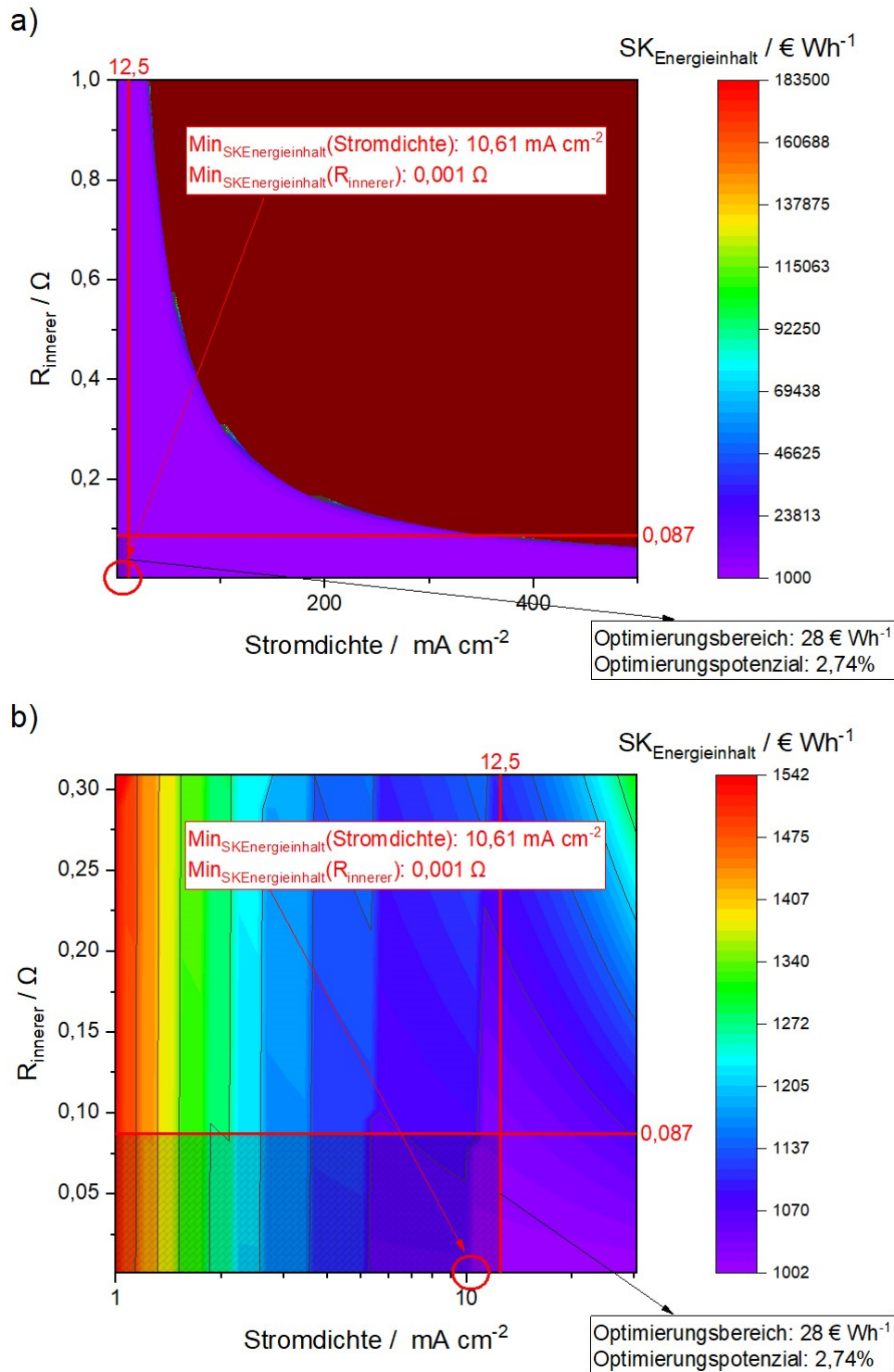
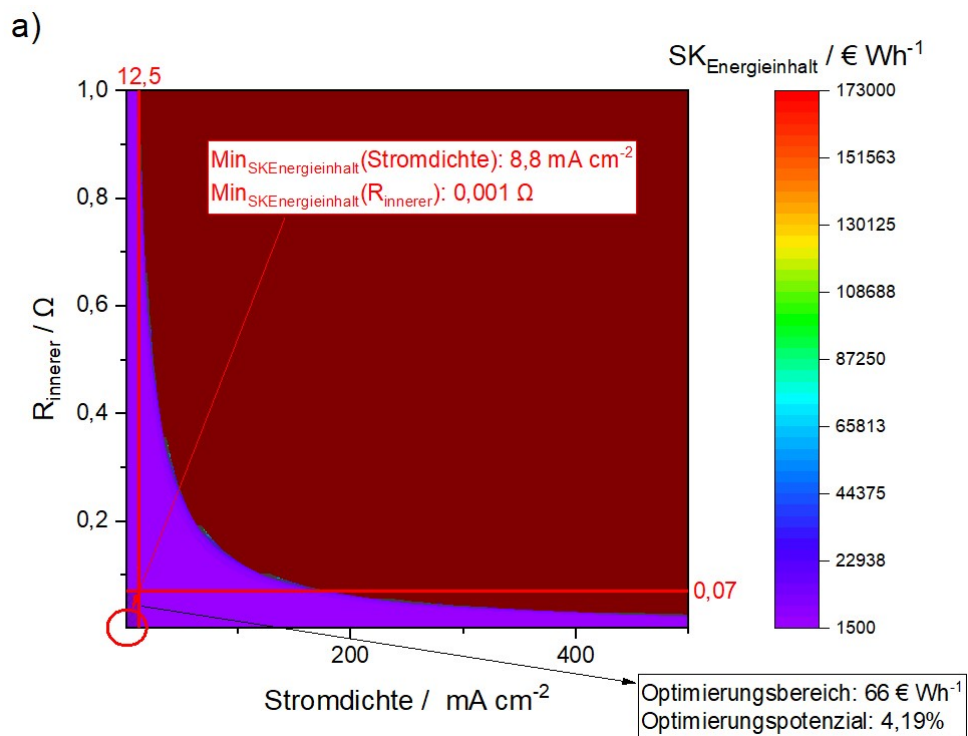


Abbildung 74. Einfluss des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm⁻² Stromdichte und einem $R_{innerer}$ von 0,087 Ω bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit 0,5 M, 0,55 W Leistung und 5,53 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Abbildung 74 stellt dar, dass die Fläche zur Optimierung der 0,5 M MV/TEMPOL FBn zwischen 1 mA cm^{-2} und $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ sowie zwischen $0,001 \Omega$ und $0,087 \Omega$ festgelegt wurde. Der OB von 28 € Wh^{-1} ergab sich aus dem minimalen $SK_{\text{Energieinhalt}}$ von $1002,59 \text{ € Wh}^{-1}$ und dem maximalen Wert von $1030,84 \text{ € Wh}^{-1}$, was ein OP von 2,74% ergibt. Der minimale $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wurde bei einer Stromdichte von $10,61 \text{ mA cm}^{-2}$ und einem R_{innerer} von $0,001 \Omega$ erreicht.



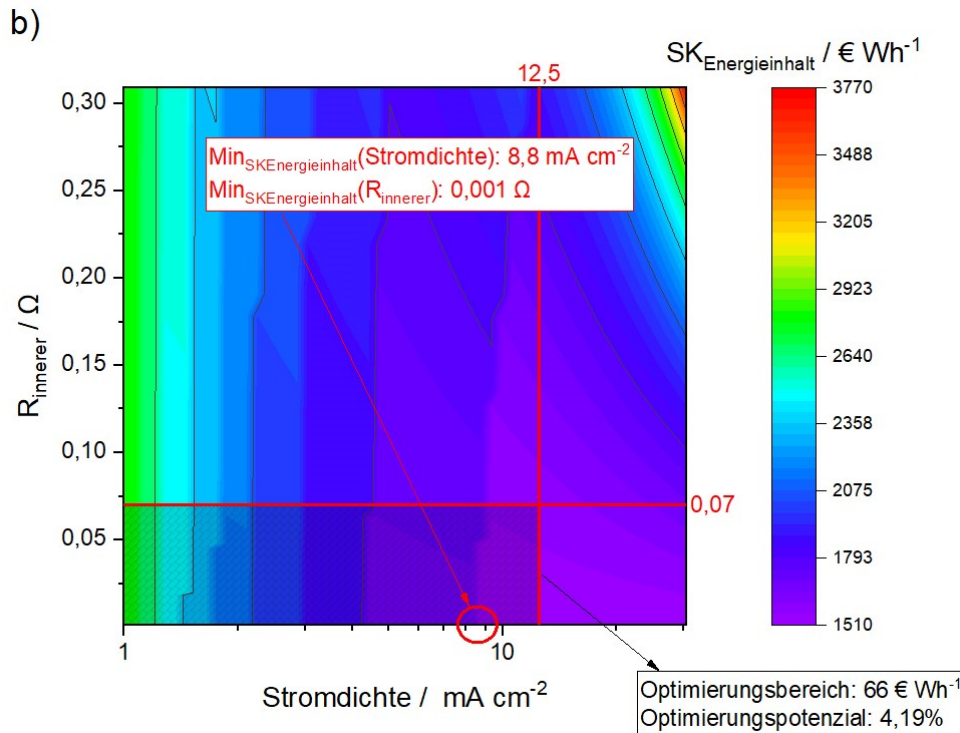


Abbildung 75. Einfluss des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) in Abhängigkeit der Stromdichte auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm⁻² Stromdichte und einem $R_{innerer}$ von 0,07 Ω bei einer Labor AQDS/BQDS FB mit 0,1 M, 0,18 W Leistung und 1,8 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Bei den 0,1 M AQDS/BQDS FBn wurde der Bereich zur Optimierung zwischen 1 mA cm⁻² und 12,5 mA cm⁻² sowie zwischen 0,001 Ω und 0,07 Ω festgelegt (vgl. **Abbildung 75**). Mit einem minimalen $SK_{Energieinhalt}$ von 1517,43 € Wh⁻¹ und einem maximalen Wert von 1583,76 € Wh⁻¹ ergab sich ein *OB* von 66 € Wh⁻¹ und ein *OP* von 4,19%. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einer Stromdichte von 8,8 mA cm⁻² und einem $R_{innerer}$ von 0,001 Ω erreicht.

Der vergrößerte Bereich wurde zur besseren Veranschaulichung im Vergleich aller FB-Typen dieser Optimierungsfrage bei einem $R_{innerer}$ zwischen 0,001 Ω und von 0,31 Ω sowie einer Stromdichte zwischen 1 mA cm⁻² und 31 mA cm⁻² gewählt. Für alle drei untersuchten FB-Typen wurde das Minimum des $SK_{Energieinhalt}$ bei dem geringsten Wert des $R_{innerer}$ von 0,001 Ω erreicht. Eine Reduzierung des $R_{innerer}$ verringert sowohl die Anzahl der benötigten Zellen als auch das erforderliche Elektrolytvolumen, was zu einer Kostenreduktion führt.

Auch bei dieser Optimierungsfrage ist das Minimum bei niedrigen Werten der Stromdichte zu finden (vgl. 7.2.1.2.3). Für die V FB liegt dieses bei 12,8 mA cm⁻², für die MV/TEMPOL FB bei 10,61 mA cm⁻² und für die AQDS/BQDS FB bei 8,8 mA cm⁻².

7.2.1.2.5. Konzentration der aktiven Spezies über effektiver Zellspannung

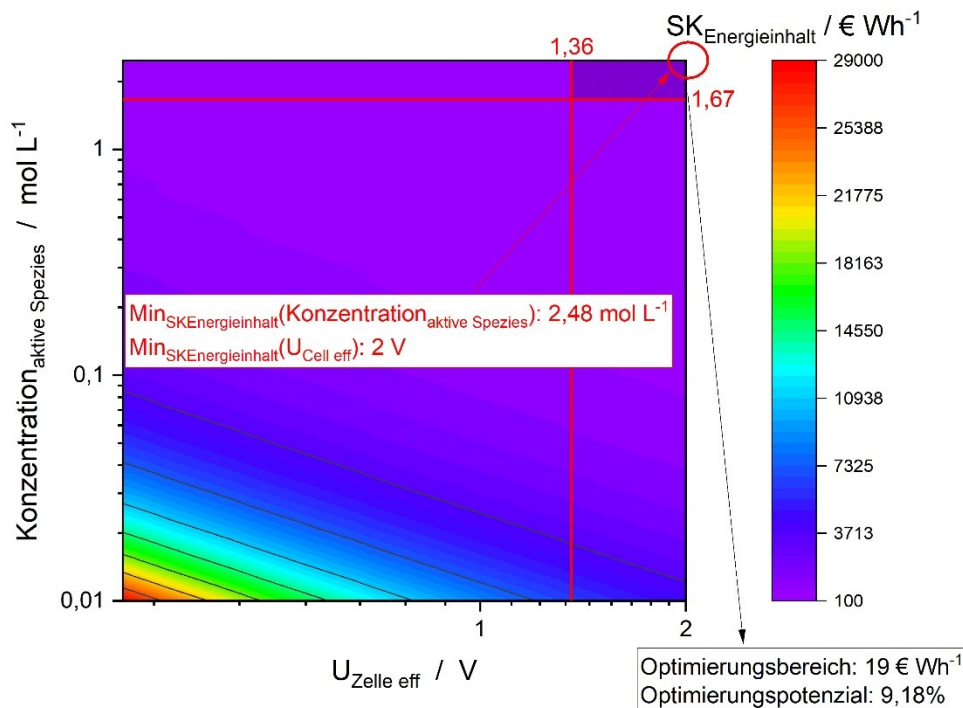


Abbildung 76. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte, $1,36 \text{ V}$ $U_{Zelle\ eff}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67 \text{ M}$ bei einer Labor V FB mit $0,68 \text{ W}$ Leistung und $6,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt.

Der Bereich zur Optimierung bei den $1,67 \text{ M}$ V FBn lag zwischen $1,67 \text{ mol L}^{-1}$ und $2,48 \text{ mol L}^{-1}$ sowie zwischen $1,36 \text{ V}$ und 2 V (vgl. **Abbildung 76**). Aus dem minimalen $SK_{Energieinhalt}$ von $187,91 \text{ € Wh}^{-1}$ und dem maximalen Wert von $206,91 \text{ € Wh}^{-1}$ ergab sich ein OB von 19 € Wh^{-1} und ein OP von $9,18\%$. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einer $U_{Zelle\ eff}$ von 2 V und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $2,48 \text{ mol L}^{-1}$ erreicht.

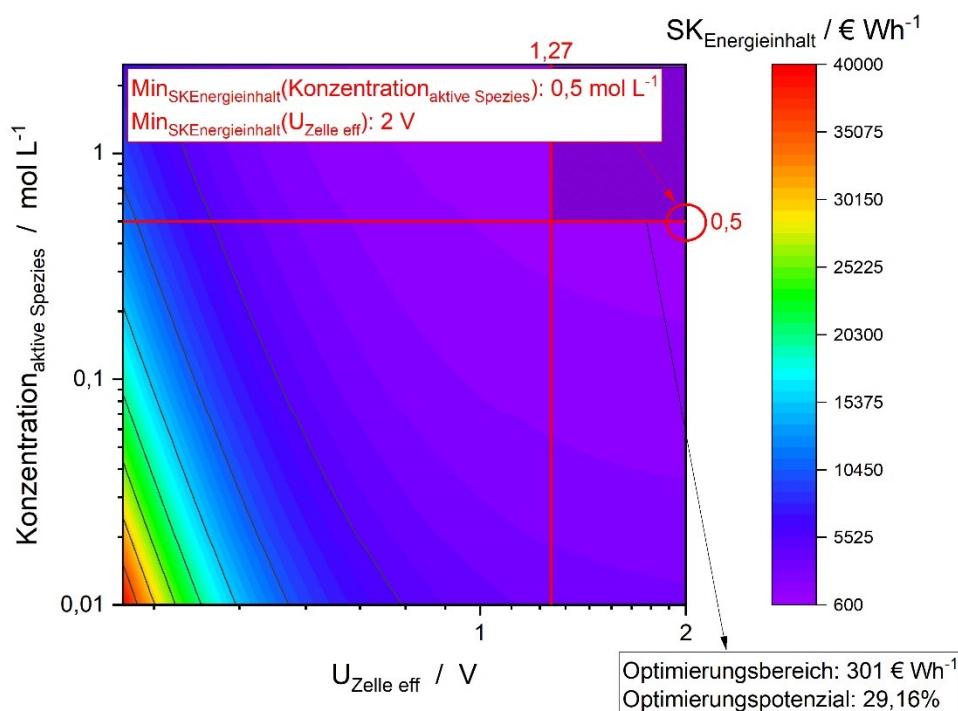


Abbildung 77. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte, $1,27\text{ V } U_{Zelle\ eff}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,5\text{ M}$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,55\text{ W}$ Leistung und $5,53\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Für die $0,5\text{ M}$ MV/TEMPOL FBn lag der Bereich zur Optimierung der maximalen Löslichkeit der aktiven Spezies²⁷ bei $0,5\text{ mol L}^{-1}$ sowie zwischen $1,27\text{ V}$ und 2 V (vgl. **Abbildung 77**). Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ von $731,98\text{ € Wh}^{-1}$ und der maximale Wert von $1033,30\text{ € Wh}^{-1}$ ergaben einen OB von 301 € Wh^{-1} und ein OP von $29,16\%$. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einer $U_{Zelle\ eff}$ von 2 V und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,5\text{ mol L}^{-1}$ erreicht.

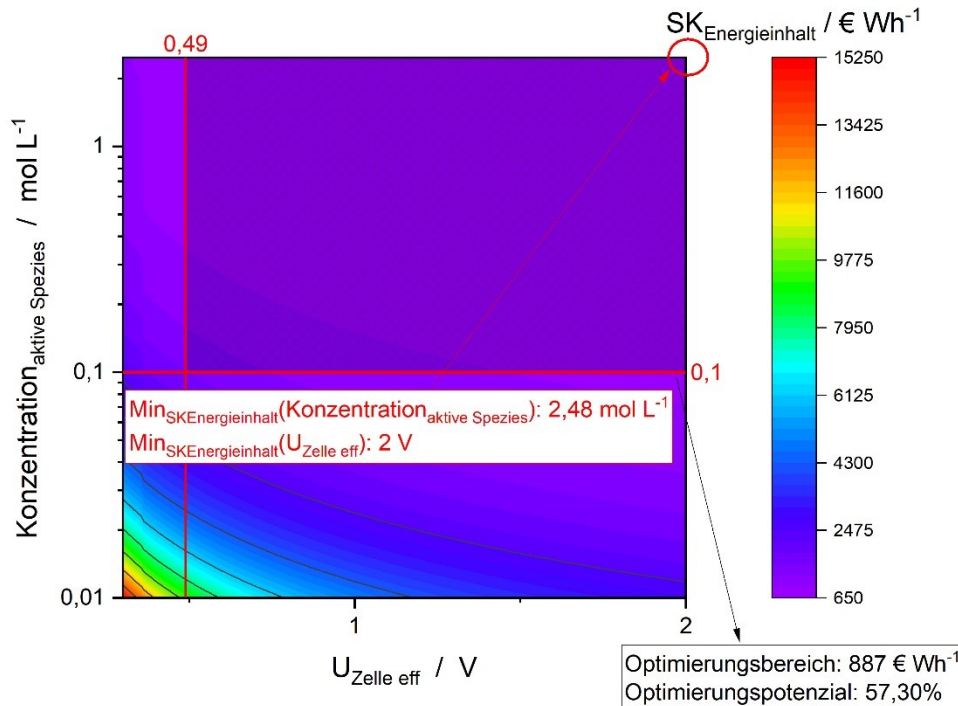


Abbildung 78. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit der effektiven Zellspannung ($U_{Zelle\ eff}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte, $0,49\text{ V}$ $U_{Zelle\ eff}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,1\text{ M}$ bei einer Labor AQDS/BQDS FB mit $0,18\text{ W}$ Leistung und $1,8\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Abbildung 78 bildet den Bereich zur Optimierung der $0,1\text{ M}$ AQDS/BQDS FBn zwischen $0,1\text{ mol L}^{-1}$ und $2,48\text{ mol L}^{-1}$ sowie zwischen $0,49\text{ V}$ und 2 V ab. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ von $660,84\text{ € Wh}^{-1}$ und der maximale Wert von $1547,64\text{ € Wh}^{-1}$ ergaben einen OB von 887 € Wh^{-1} und ein OP von $57,30\%$. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einer $U_{Zelle\ eff}$ von 2 V und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $2,48\text{ mol L}^{-1}$ erreicht.

Bei dieser Optimierungsfrage ist das Minimum des $SK_{Energieinhalt}$ für alle drei untersuchten FB-Typen aus den für bereits diskutierte Optimierungsfragen (vgl. 7.2.1.2.2 und 7.2.1.2.3) bekannten Gründen bei der höchsten $U_{Zelle\ eff}$ und der höchsten erreichbaren $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ gegeben. Innerhalb der Grenzen dieser Optimierungsfrage liegt die höchste $U_{Zelle\ eff}$ für alle drei FB-Typen bei 2 V , und die höchste $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ beträgt für die V FB und die AQDS/BQDS FB $2,48\text{ mol L}^{-1}$ sowie für die MV/TEMPOL FB $0,5\text{ mol L}^{-1}$.

Die V FBn haben bei einer $U_{Zelle\ eff}$ von 2 V und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $2,48\text{ mol L}^{-1}$ die niedrigsten $SK_{Energieinhalt}$. Schon bei einer geringeren $U_{Zelle\ eff}$ von $1,36\text{ V}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $1,67\text{ mol L}^{-1}$ im Betriebspunkt steigen die $SK_{Energieinhalt}$ bereits an. Das Optimierungspotenzial bleibt mit etwa 9% vergleichsweise gering, was auf die bereits günstige Ausgangssituation und die technische Reife des Systems hinweist. Allerdings ist bekannt, dass $U_{Zelle\ eff}$ oberhalb

von 1,7 V zu einer erhöhten elektrochemischen Degradation führen können, was sich langfristig negativ auf die Lebensdauer der Batterie auswirkt.^{14,118}

Die MV/TEMPOL FBn weisen ein deutlich höheres Optimierungspotenzial von etwa 29% auf, wobei die $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ aufgrund der Löslichkeitsgrenze bei $0,5\text{ mol L}^{-1}$ konstant bleibt. Hier wirkt sich allein die Variation der $U_{Zelle\ eff}$ erheblich auf die $SK_{Energieinhalt}$ aus. Während bei 2 V ein Minimum von etwa 732 € Wh^{-1} erreicht wird, steigen die $SK_{Energieinhalt}$ bei 1,27 V auf über 1000 € Wh^{-1} an. Die begrenzte $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ stellt ein wesentliches strukturelles Hindernis dar, das in zukünftiger Forschung nach besseren Elektrolytkompositionen oder Moleküldesign künftig untersucht werden sollte.²¹ Hinzu kommt, dass bei organischen FBn wie MV/TEMPOL häufig Stabilitätsprobleme und Nebenreaktionen auftreten, die bei hoher Spannung noch verstärkt werden können.²⁹⁰

Das größte Optimierungspotenzial haben die AQDS/BQDS FBn mit rund 57%. Ausgangspunkt ist hier ein vergleichsweise ineffizienter Zustand bei 0,49 V $U_{Zelle\ eff}$ und $0,1\text{ mol L}^{-1}$ $Konzentration_{aktive\ Spezies}$. Durch die Erhöhung beider Parameter auf 2 V bzw. $2,48\text{ mol L}^{-1}$ lassen sich die $SK_{Energieinhalt}$ deutlich senken. Dies ist typisch für organische Redoxsysteme, bei denen hohe $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ theoretisch erreichbar sind. Für Anthrachinon- und Benzochinon-basierte Systeme wurden bereits Konzentrationen über $1,5\text{ mol L}^{-1}$ im Labor realisiert.²⁶³ Dennoch bleibt diese Technologie empfindlich gegenüber Konzentrationsänderungen, pH-Schwankungen und Zersetzungsreaktionen, was die praktische Umsetzung auf Systemebene bislang limitiert.²⁹¹

Trotz der Unterschiede zwischen den betrachteten Systemen zeigen alle drei FB-Typen ein einheitliches Verhalten: Die höchsten $SK_{Energieinhalt}$ entstehen stets bei niedriger $U_{Zelle\ eff}$ und gleichzeitig niedriger $Konzentration_{aktive\ Spezies}$. Dies ist durch den reduzierten Energieinhalt und die ineffiziente Nutzung der Systemkomponenten erklärbar. Eine gleichzeitige Erhöhung beider Parameter ist daher zwingend notwendig, um ökonomisch attraktive Betriebspunkte zu erreichen. Während die V FBn dabei bereits nahe an ihrer technischen und wirtschaftlichen Optimierung operiert, bestehen bei den organischen Systemen, insbesondere bei AQDS/BQDS FBn, noch deutliche Entwicklungs- und Effizienzreserven.

7.2.1.2.6. Aktive Fläche über innerem Widerstand

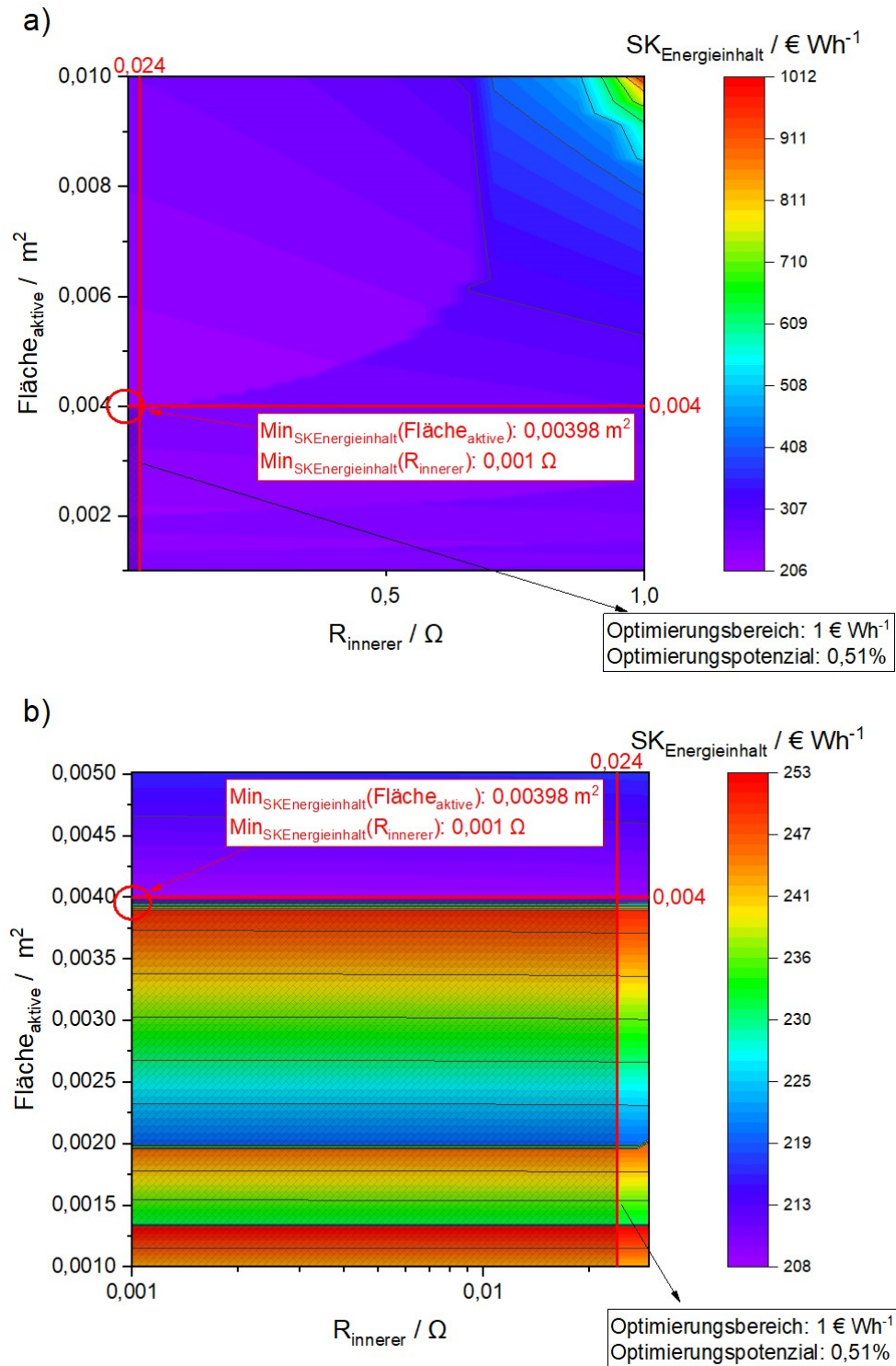


Abbildung 79. Einfluss der aktiven Fläche ($Fläche_{aktiv}$) in Abhängigkeit des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte, $0,024 \Omega$ $R_{innerer}$ und einer $Fläche_{aktiv}$ von $0,004 \text{ m}^2$ bei einer Labor V FB mit $0,68 \text{ W}$ Leistung und $6,8 \text{ Wh}$ Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

In **Abbildung 79** ist zu sehen, dass für die 1,67 M V FBn der Bereich zur Optimierung zwischen $0,001 \Omega$ und $0,024 \Omega$ sowie zwischen $0,001 \text{ m}^2$ und $0,004 \text{ m}^2$ liegt. Zwischen dem minimalen $SK_{\text{Energieinhalt}}$ von $209,06 \text{ € Wh}^{-1}$ und dem maximalen Wert von $207,99 \text{ € Wh}^{-1}$ ergibt sich ein OB von 1 € Wh^{-1} und ein OP von $0,51\%$. Der minimale $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wurde bei einem R_{innerer} von $0,001 \Omega$ und einer $Fläche_{\text{aktive}}$ von $0,00398 \text{ m}^2$ erreicht.

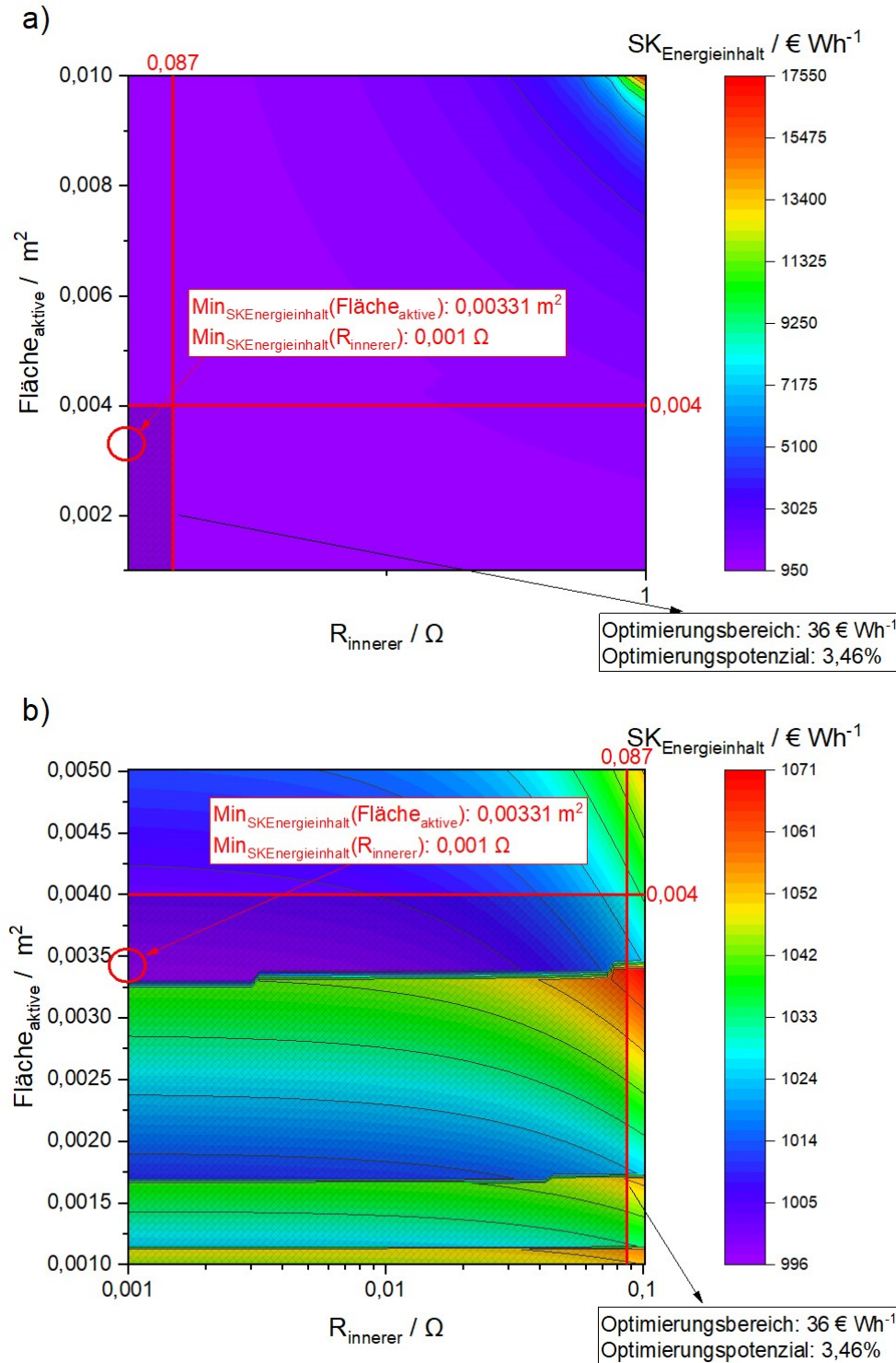
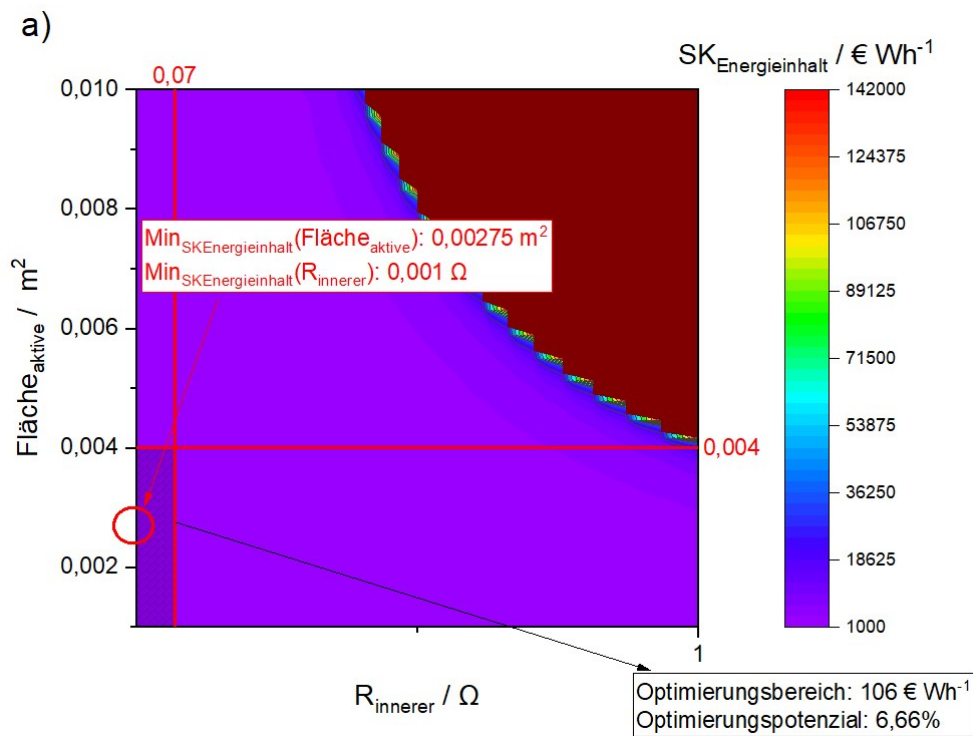


Abbildung 80. Einfluss der aktiven Fläche ($Fläche_{aktiv}$) in Abhängigkeit des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte, $0,087 \Omega$ $R_{innerer}$ und einer $Fläche_{aktiv}$ von $0,004 \text{ m}^2$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,55 \text{ W}$ Leistung und $5,53 \text{ Wh}$ Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Bezüglich dieser Optimierungsfrage wurde der Bereich zur Optimierung bei den 0,5 M MV/TEMPOL FBn zwischen $0,001 \Omega$ und $0,087 \Omega$ sowie zwischen $0,001 \text{ m}^2$ und $0,004 \text{ m}^2$ festgelegt (vgl. **Abbildung 80**). Der OB von 36 € Wh^{-1} und das OP von $3,46\%$ ergibt sich aus dem minimalen $SK_{\text{Energieinhalt}}$ von $995,79 \text{ € Wh}^{-1}$ und dem maximalen Wert von $1031,45 \text{ € Wh}^{-1}$. Der minimale $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wurde bei einem R_{innerer} von $0,001 \Omega$ und einer aktiven Fläche von $0,00331 \text{ m}^2$ erreicht.



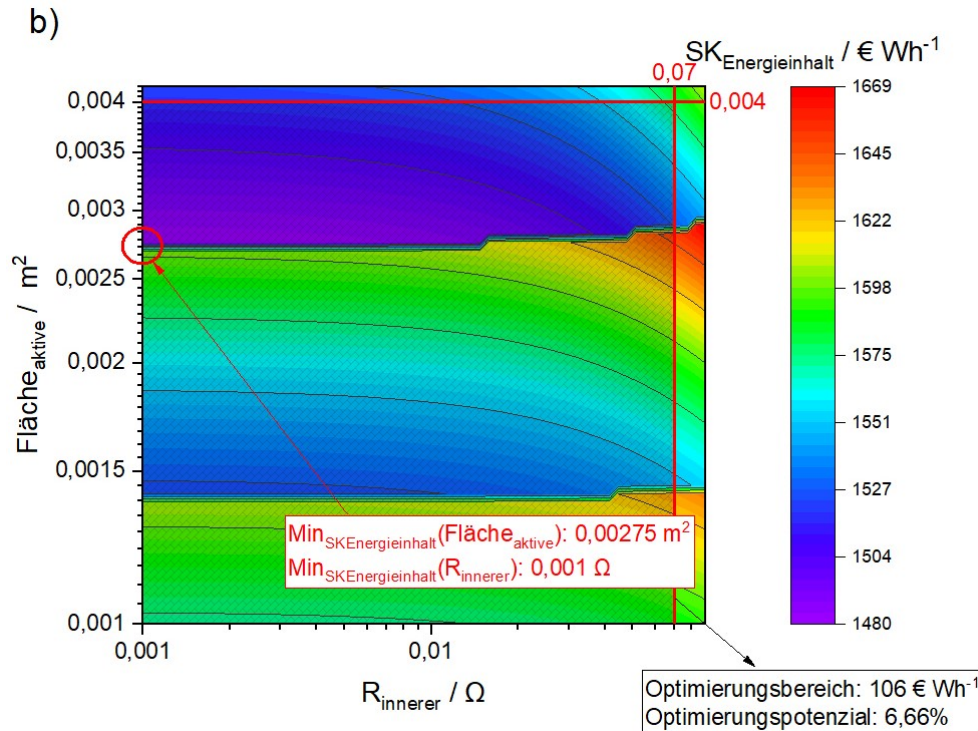


Abbildung 81. Einfluss der aktiven Fläche ($Fläche_{aktive}$) in Abhängigkeit des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm⁻² Stromdichte, 0,07 Ω $R_{innerer}$ und einer $Fläche_{aktive}$ von 0,004 m² bei einer Labor AQDS/BQDS FB mit 0,18 W Leistung und 1,8 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Bei den 0,1 M AQDS/BQDS FBn war der Bereich zur Optimierung zwischen 0,001 Ω und 0,007 Ω sowie zwischen 0,001 m² und 0,004 m² gegeben (vgl. **Abbildung 81**). Zwischen dem minimalen $SK_{Energieinhalt}$ von 1480,16 € Wh⁻¹ und dem maximalen Wert von 1585,68 € Wh⁻¹ ergab sich ein OB von 106 € Wh⁻¹ und ein OP von 6,66%. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einem $R_{innerer}$ von 0,001 Ω und einer $Fläche_{aktive}$ von 0,00275 m² erreicht.

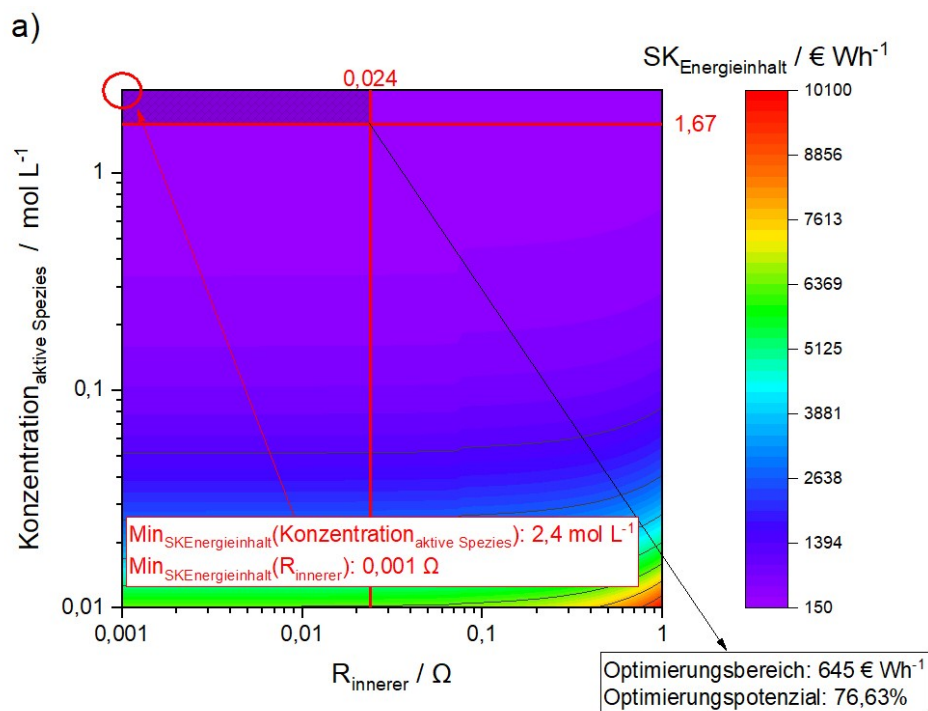
Der vergrößerte Bereich wurde zur besseren Veranschaulichung im Vergleich aller FB-Typen dieser Optimierungsfrage auf eine aktive Fläche zwischen 0,001 m² und von 0,005 m² sowie einen $R_{innerer}$ zwischen 0,001 Ω und 0,102 Ω gewählt. Das Minimum des $SK_{Energieinhalt}$ ist bei dieser Optimierungsfrage für alle drei untersuchten FB-Typen bei dem niedrigsten $R_{innerer}$ zu finden (vgl. 7.2.1.2.4). Für die $Fläche_{aktive}$ liegt das Minimum bei mittleren Werten, die etwas niedriger sind als die tatsächlich bei den Laborzellen genutzten (vgl. **Tabelle 13**).

Wie bereits bekannt, wirkt sich die Veränderung der $Fläche_{aktive}$ hauptsächlich auf den Bereich Leistung aus, da die benötigte Anzahl der Zellen bei steigender $Fläche_{aktive}$ sinkt (vgl. 7.2.1.2.1). Für alle drei untersuchten FB-Typen liegt das Minimum des $SK_{Energieinhalt}$ also bei einem $R_{innerer}$ von 0,001 Ω. Die Werte für die $Fläche_{aktive}$ liegen innerhalb der Grenzen dieser untersuchten Optimierungsfrage bei 0,00398 m² für die V FB, 0,00331 m² für die MV/TEMPOL FB und 0,00275 m² für die AQDS/BQDS FB.

Da die Zellanzahl eine diskrete Größe ist, führt ihre Variation bei Änderung der $Fläche_{aktive}$ zu einem stufenweisen Verlauf der $SK_{Energieinhalt}$. Demgegenüber ist das Elektrolytvolumen als kontinuierliche Variable direkt an die geforderte Kapazität angepasst, da die dazu notwendige Anpassung des benötigten Elektrolytvolumens einfach möglich ist. Diese unterschiedliche mathematische Charakteristik, also diskret bei der Zellanzahl, stetig beim Elektrolytvolumen, erklärt das beobachtete stufenweise Verhalten der spezifischen Energieinhaltskosten (vgl. **Abbildung 79 b**), **Abbildung 80 b**) und **Abbildung 81 b**)). Obwohl dieser Effekt grafisch deutlich hervortritt, ist sein praktischer Einfluss gering, was auch anhand der geringen Optimierungspotenziale erkennbar ist.

Im nicht vergrößerten Bereich der Abbildungen zeigt sich jedoch für alle drei FB-Typen, dass eine gleichzeitige Erhöhung von $R_{innerer}$ und $Fläche_{aktive}$ zu signifikant höheren $SK_{Energieinhalt}$ führt. Das führt für solche technoökonomisch ungünstigen Parameter zu 5- bis 150-fach höheren $SK_{Energieinhalt}$, was die Relevanz einer optimalen Parameterauslegung unterstreicht.

7.2.1.2.7. Konzentration der aktiven Spezies über innerem Widerstand



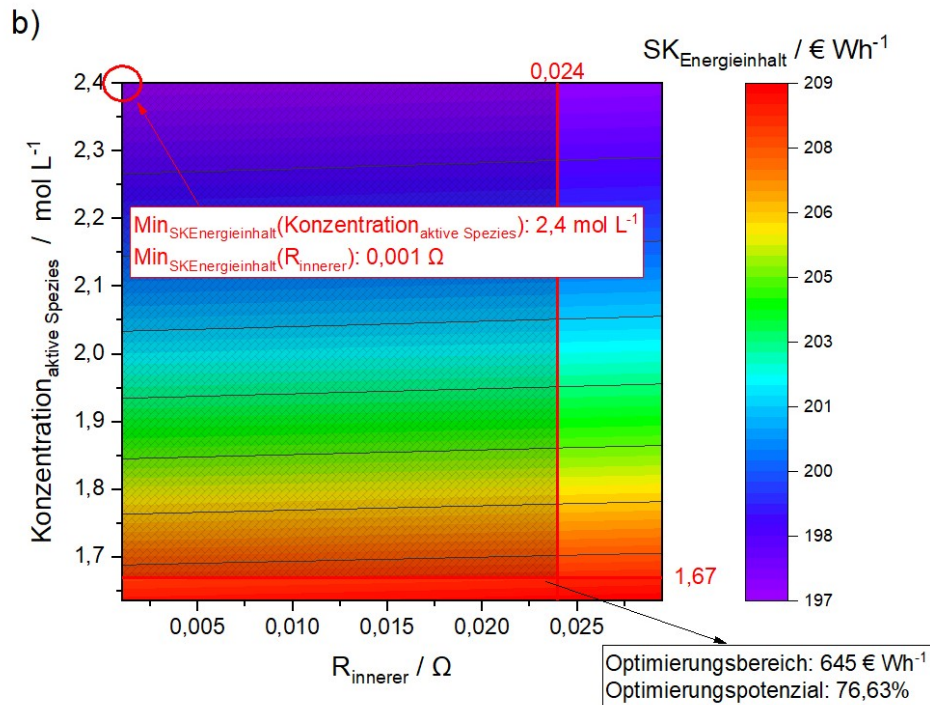


Abbildung 82. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von 12,5 mA cm⁻² Stromdichte, 0,024 Ω $R_{innerer}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von 1,67 M bei einer Labor VFB mit 0,68 W Leistung und 6,8 Wh Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Für die 1,67 M VFBn wurde der Bereich zur Optimierung zwischen 0,001 Ω und 0,024 Ω sowie zwischen 1,67 mol L⁻¹ und 2,4 mol L⁻¹ gegeben (vgl. **Abbildung 82**). Der OB von 645 € Wh⁻¹ und das OP von 76,63% ergaben sich aus dem minimalen $SK_{Energieinhalt}$ von 196,73 € Wh⁻¹ und dem maximalen Wert von 841,72 € Wh⁻¹. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einem $R_{innerer}$ von 0,001 Ω und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von 2,4 mol L⁻¹ erreicht.

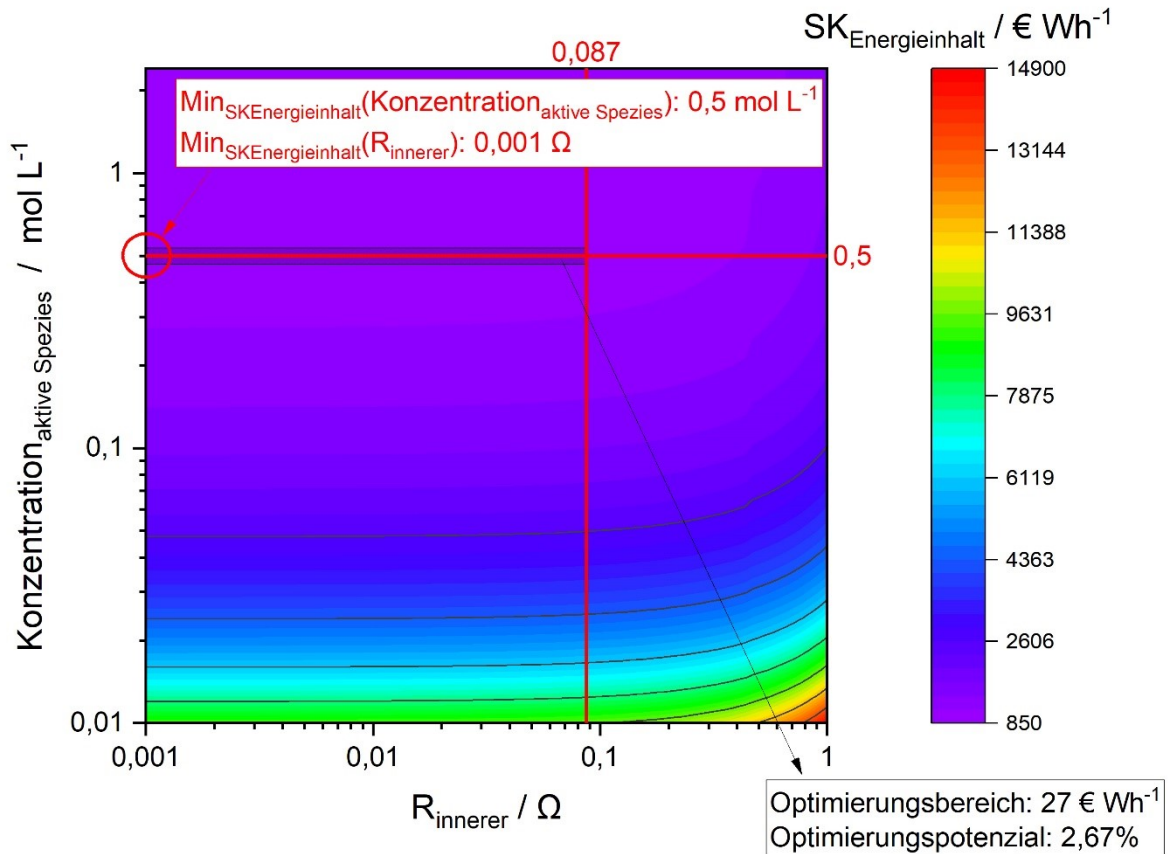


Abbildung 83. Einfluss der Konzentration der aktiven Spezies ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte, $0,087\text{ }\Omega$ $R_{innerer}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,5\text{ M}$ bei einer Labor MV/TEMPOL FB mit $0,55\text{ W}$ Leistung und $5,53\text{ Wh}$ Energieinhalt.

Bei den $0,5\text{ M}$ MV/TEMPOL FBn wurde der Bereich zur Optimierung zwischen zwischen $0,001\text{ }\Omega$ und $0,087\text{ }\Omega$ sowie bei der maximalen Löslichkeit der aktiven Spezies²⁷ von $0,5\text{ mol L}^{-1}$ aufgespannt (vgl. **Abbildung 83**). Zwischen dem minimalen $SK_{Energieinhalt}$ von $996,99\text{ € Wh}^{-1}$ und dem maximalen Wert von $1024,35\text{ € Wh}^{-1}$ ergab sich ein *OB* von 27 € Wh^{-1} und ein *OP* von $2,67\%$. Der minimale $SK_{Energieinhalt}$ wurde bei einem $R_{innerer}$ von $0,001\text{ }\Omega$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,5\text{ mol L}^{-1}$ erreicht.

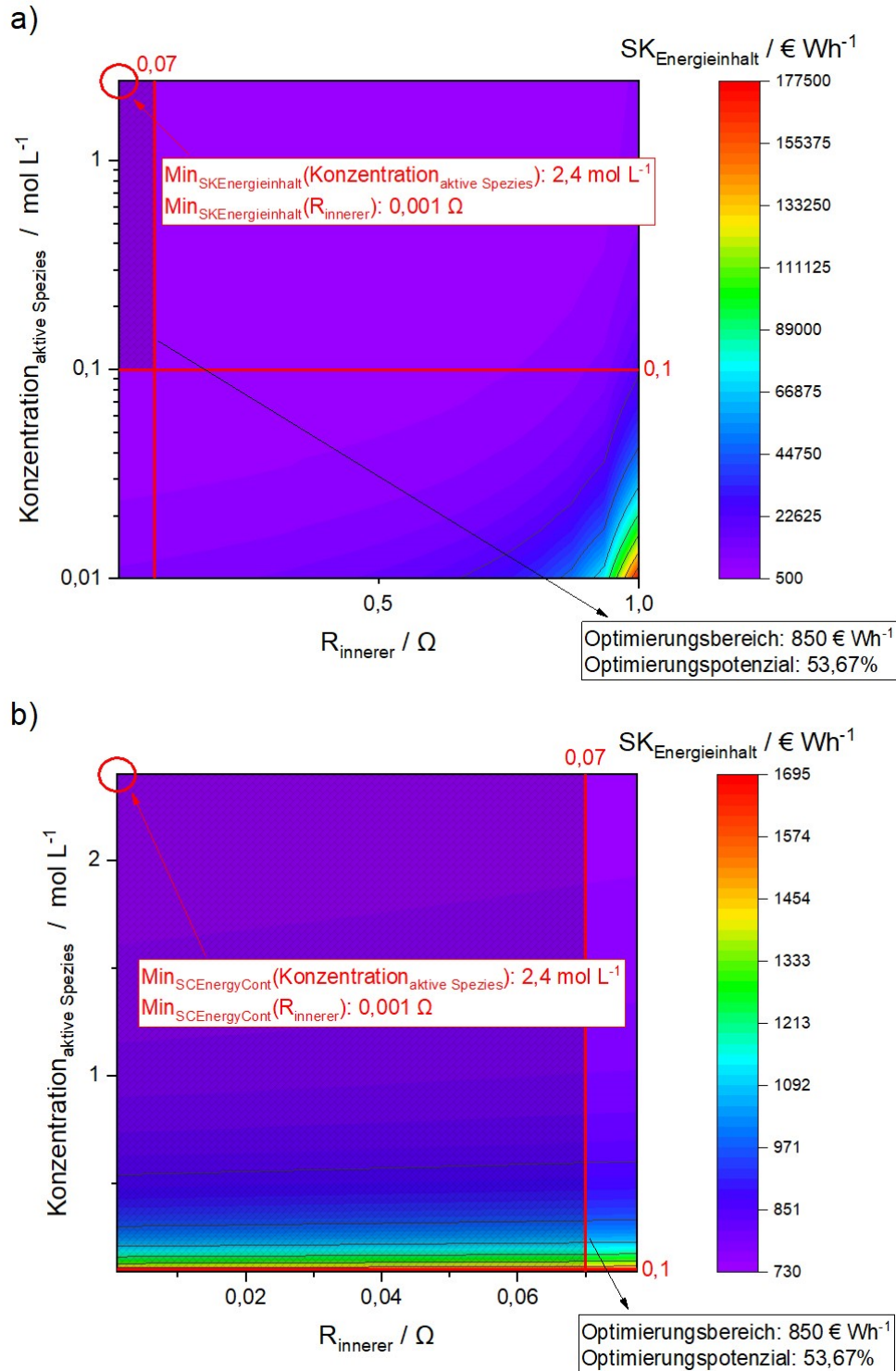


Abbildung 84. Einfluss der Konzentration ($Konzentration_{aktive\ Spezies}$) in Abhängigkeit des inneren Widerstands ($R_{innerer}$) auf die spezifischen Energieinhaltskosten ($SK_{Energieinhalt}$) inklusive des Optimierungspotenzials auf Grundlage eines Betriebszustands von $12,5\text{ mA cm}^{-2}$ Stromdichte, $0,07\text{ }\Omega$ $R_{innerer}$ und einer $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ von $0,1\text{ M}$ bei einer Labor AQDS/BQDS FB mit $0,18\text{ W}$ Leistung und $1,8\text{ Wh}$ Energieinhalt innerhalb der a) untersuchten Grenzen und b) in einem vergrößerten Bereich.

Abbildung 84 bildet den Bereich zur Optimierung für die 0,1 M AQDS/BQDS FBn zwischen $0,001 \Omega$ und $0,07 \Omega$ sowie zwischen $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ und $2,4 \text{ mol L}^{-1}$ ab. Der OB von 850 € Wh^{-1} und das OP von $53,67\%$ ergaben sich aus dem minimalen $SK_{\text{Energieinhalt}}$ von $733,35 \text{ € Wh}^{-1}$ und dem maximalen Wert von $1582,81 \text{ € Wh}^{-1}$. Der minimale $SK_{\text{Energieinhalt}}$ wurde bei einem R_{innerer} von $0,001 \Omega$ und einer $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ von $2,4 \text{ mol L}^{-1}$ erreicht.

Bei dieser Optimierungsfrage wurde die Grafik für die MV/TEMPOL FB nicht vergrößert, da die maximale Löslichkeit die $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ limitiert. Für die beiden anderen FB-Typen wurden unterschiedliche Grenzen gewählt, da identische Grenzen nicht zu einer besseren Sichtbarkeit der Charakteristika der Isokostenlinien beigetragen hätten. Dies wurde durch die Anwendung leicht unterschiedlicher Grenzen erreicht.

Das Minimum für den $SK_{\text{Energieinhalt}}$ liegt bei dieser Optimierungsfrage für alle drei untersuchten FB-Typen, aus den bei bereits diskutierten Optimierungsfragen bekannten Gründen (vgl. 7.2.1.2.2 und 7.2.1.2.4), bei dem niedrigsten R_{innerer} und der höchsten erreichbaren $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$. Innerhalb der Grenzen dieser untersuchten Optimierungsfrage ist der niedrigste R_{innerer} für alle drei FB-Typen bei $0,001 \Omega$ und die höchste $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ für die V FB und die AQDS/BQDS FB bei $2,4 \text{ mol L}^{-1}$ sowie für die MV/TEMPOL FB bei $0,5 \text{ mol L}^{-1}$.

Die $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ sowie der R_{innerer} stellen Parameter dar, die maßgeblich die elektrochemische Leistungsfähigkeit und die Wirtschaftlichkeit von Durchflussbatterien beeinflussen. Eine Erhöhung des R_{innerer} bedingt verstärkte ohmsche Verluste, welche die Betriebsspannung reduzieren und damit die Leistung der FB mindert. Parallel führt eine reduzierte $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ zu geringerer nutzbarer Kapazität und limitiert somit die Energiedichte des Systems. Aufgrund der direkten Kopplung dieser Parameter an die Effizienz und Energiedichte führen Verschlechterungen unmittelbar zu höheren $SK_{\text{Energieinhalt}}$, da der Aufwand für Materialsynthese und Zellkomponenten pro gespeicherter Energieeinheit steigt.^{21,34,292,293} Eine gezielte Optimierung von $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ und R_{innerer} ist daher für die Kostenreduktion und Leistungssteigerung essenziell.²⁵⁶ So treten bei allen untersuchten FB-Typen die höchsten $SK_{\text{Energieinhalt}}$ bei Kombinationen aus hohem R_{innerer} und niedriger $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ auf.²⁹⁴

Bei den V FBn eröffnet die breite Spanne für die $Konzentration_{\text{aktive Spezies}}$ in Verbindung mit einem niedrigen R_{innerer} ein substantielles OP von $76,63\%$, was die Eignung dieses Systems für kostenkritische Anwendungen unterstreicht.¹³¹

Für die MV/TEMPOL FBn beschränkt die geringe Löslichkeit der aktiven Spezies das OP erheblich. Mit nur $2,67\%$ verbleibt kaum Spielraum für wirtschaftlich relevante Verbesserungen. Selbst bei minimalem R_{innerer} lassen sich keine signifikanten Reduktionen der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ realisieren. Dies deutet darauf hin, dass Fortschritte primär auf molekularer Ebene erforderlich sind, beispielsweise durch die Entwicklung neuartiger, löslichkeitsstabiler organischer Elektrolyte.²⁹⁵

Die AQDS/BQDS FBn ermöglichen innerhalb des betrachteten Rahmens eine Reduktion der $SK_{\text{Energieinhalt}}$ um bis zu $53,67\%$. Der starke Einfluss beider Parameter auf die Kostenstruktur unterstreicht, dass die wirtschaftliche Wettbewerbsfähigkeit dieses

Systems maßgeblich von elektrolytischen und konstruktiven Verbesserungen abhängt. Insbesondere Optimierungen hinsichtlich Leitfähigkeit und Erhöhung der *Konzentration_{aktive Spezies}* stellen wesentliche Hebel für eine Kostenreduktion dar.²⁶¹

7.3. Nutzung des Optimierungspotenzials zur Priorisierung von Optimierungsfragen

Arbeiten zu technischen Verbesserungen von Batterien konzentrieren sich regelmäßig auf die Erhöhung der Kapazität oder Leistung. Es ist oft bekannt, welche Veränderungen an den Komponenten zu einer Verbesserung dieser Leistungsmerkmale führen (bspw. ist die Verringerung des Widerstands der Elektrode erstrebenswert, da sie den $R_{innerer}$ verringert). Durch die Erweiterung der Fragestellung um eine technoökonomische Betrachtung stellt sich jedoch auch die Frage, ob sich die jeweilige Verbesserung wirtschaftlich lohnt. Ein Material mit geringfügig schlechteren Widerstandswerten könnte aus technoökonomischer Sicht bevorzugt werden, wenn es günstiger ist und somit weniger Kosten verursacht. Solche Zusammenhänge lassen sich durch ein technoökonomisches Modell abbilden, was ebenfalls durch die Sensitivitätsanalysen bestätigt wird.

Das ermittelte Optimierungspotenzial ermöglicht es, die untersuchten Optimierungsfragen in eine technoökonomische Priorisierungsreihenfolge zu bringen. Auf diese Weise lässt sich eine begründete Aussage darüber treffen, welche der untersuchten Verbesserungen den größten Einfluss haben.

7.3.1. Diskussion ausgewählter Optimierungsfragen verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien mit dem Betriebspunkt einer Stromdichte von 25 mA cm^{-2}

Mit dem Betriebszustand einer Stromdichte von 25 mA cm^{-2} wurden die FB-Typen 1,67 M V FBn und 0,5 M MV/TEMPOL FBn untersucht. Von den acht im Modell analysierten Optimierungsfragen befassen sich die ersten vier mit dem Einfluss der spezifischen Kosten der Komponenten, die zum Innenwiderstand beitragen, sowie deren spezifischem Flächenwiderstand im Hinblick auf die spezifischen Energieinhaltskosten. Dahinter steht die Annahme, dass durch den Einsatz teurerer Materialien mit deutlich geringerem spezifischem Widerstand der Innenwiderstand signifikant reduziert werden könnte, sodass sich die höheren Materialkosten durch eine verbesserte Systemeffizienz insgesamt wirtschaftlich lohnen würden. Die letzten vier Optimierungsfragen basieren auf bereits untersuchten und publizierten Fragestellungen.⁴³

Die acht Optimierungsfragen, die im Rahmen von Sensitivitätsanalysen mit dem Modell untersucht wurden, sind die folgenden:

- $SK_{Membran}$ in Abhängigkeit vom $SFR_{Membran}$
- $SK_{Elektrode}$ in Abhängigkeit vom $SFR_{Elektrode}$
- $SK_{Gasdiffusionsschicht}$ in Abhängigkeit vom $SFR_{Gasdiffusionsschicht}$
- SK_{BPP} in Abhängigkeit vom SFR_{BPP}
- $SK_{aktive\ Spezies}$ in Abhängigkeit der $U_{Zelle\ eff}$
- $R_{innerer}$ in Abhängigkeit der Stromdichte
- $U_{Zelle\ eff}$ in Abhängigkeit der Stromdichte
- $Konzentration_{aktive\ Spezies}$ in Abhängigkeit der Stromdichte

Die Optimierungspotenziale dieser Fragen sind in **Abbildung 85** dargestellt. Die Zahlenwerte sowie eine Priorisierungsreihenfolge der Optimierungsfragen für die jeweiligen FB-Typen sind in **Tabelle 10** aufgeführt. Auf dieser Grundlage lässt sich der zu erwartende technoökonomische Erfolg der jeweiligen Optimierungsfragen für die beiden FB-Typen vergleichend diskutieren.

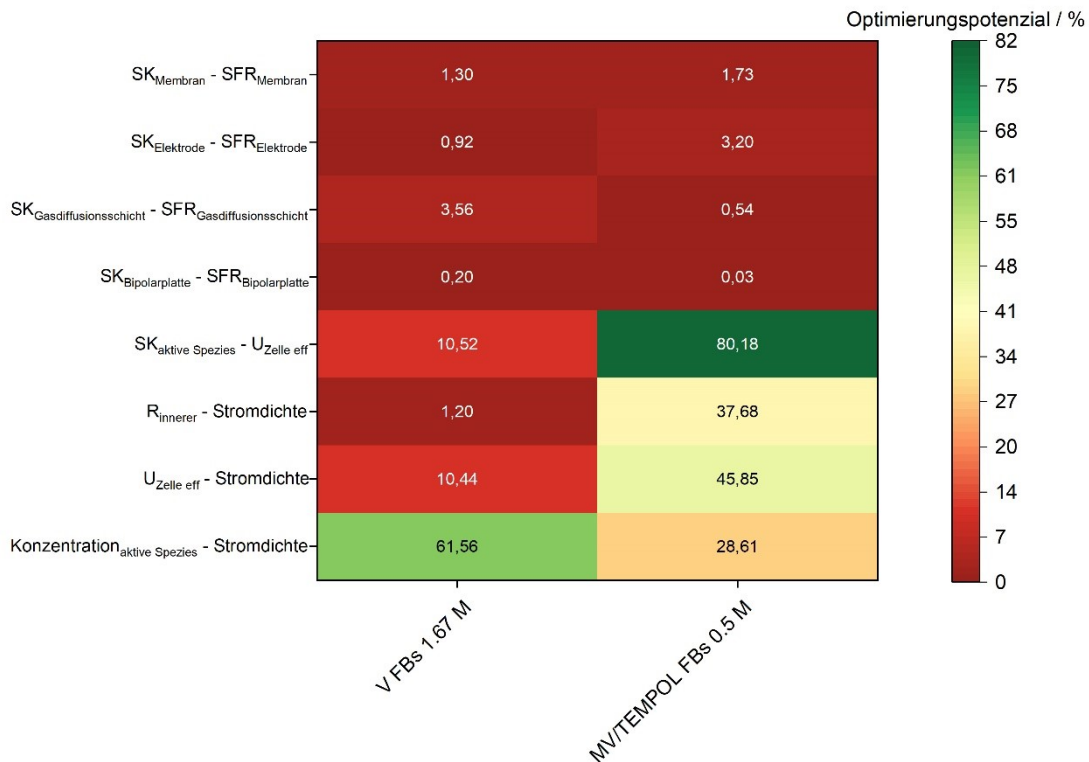


Abbildung 85. Optimierungspotenziale der durchgeführten Sensitivitätsanalysen bezüglich der spezifischen Energieinhaltskosten von FBn im Labormaßstab mit Elektrolytenpaaren von 1,67 M Vanadium/Vanadium und solchen mit 0,5 M MV/TEMPOL auf Grundlage des Betriebszustands von 25 mA cm^{-2} .

Tabelle 10. Technoökonomische Priorisierung der Optimierungspotenziale bezüglich der spezifischen Energieinhaltskosten bei den untersuchten Durchflussbatterien im Labormaßstab mit Elektrolytenpaaren von 1,67 M Vanadium/Vanadium und solchen mit 0,5 M MV/TEMPOL auf Grundlage des Betriebszustands von 25 mA cm⁻².

untersuchte Optimierungsfrage		Durchflussbatterie			
		V FBn 1,67 M		MV/TEMPOL FBn 0,5 M	
		Rang	Optimierungs- potenzial [%]	Rang	Optimierungs- potenzial [%]
a)	SK _{Membran} - SFR _{Membran}	5	1,30	6	1,73
b)	SK _{Elektrode} - SFR _{Elektrode}	7	0,92	5	3,20
c)	SK _{Gasdiffusionsschicht} - SFR _{Gasdiffusionsschicht}	4	3,56	7	0,54
d)	SK _{Bipolarplatte} - SFR _{Bipolarplatte}	8	0,20	8	0,03
e)	SK _{aktive Spezies} - U _{Zelle eff}	2	10,52	1	80,18
f)	R _{innerer} - Stromdichte	6	1,20	3	37,68
g)	U _{Zelle eff} - Stromdichte	3	10,44	2	45,85
h)	Konzentration _{aktive Spezies} - Stromdichte	1	61,56	4	28,61

Die durchgeführten Sensitivitätsanalysen ergaben für beide FB-Typen im Labormaßstab bei 25 mA cm⁻², dass die Optimierungspotenziale für die komponentenweise Variation des flächenspezifischen Widerstands und der spezifischen Kosten der jeweiligen widerstandstragenden Komponente maximal im niedrigen einstelligen Prozentbereich liegen. Dies bedeutet, dass keine signifikanten Steigerungen der Wirtschaftlichkeit in Bezug auf die spezifischen Energieinhaltskosten zu erwarten sind (vgl. **Tabelle 10** a - d). Die Ergebnisse aus der Betrachtung der V FBn und der MV/TEMPOL FBn sind im Detail wie folgt:

Für die V FBn ergab sich das größte Optimierungspotenzial von 61,56% durch eine Erhöhung der Stromdichte in Kombination mit einer gleichzeitigen Erhöhung der Konzentration der aktiven Spezies. Eine einseitige Erhöhung nur einer dieser Variablen führt nicht zu diesem Effekt, da bei sehr niedriger Stromdichte die Anzahl der benötigten Zellen, um die geforderte Leistung zu erreichen, sehr hoch wird, während das für die zu erreichende Speicherzeit benötigte Volumen der Elektrolyten zu gering ist. Mit steigender Stromdichte verringert sich die benötigte Zellenanzahl jedoch deutlich. Allerdings steigt aufgrund des erhöhten inneren Widerstands der Zellen auch das erforderliche Volumen der Elektrolyten erheblich an.

Die weiteren untersuchten Optimierungspotenziale für die V FBn liegen deutlich niedriger, zwischen 0,20% und 10,44%, da Komponenten, die direkt am elektrochemischen Prozess und Ladungstransfer beteiligt waren, bereits vergleichsweise niedrige Kosten aufwiesen. Die größten Kostenverursacher im Laboraufbau waren die Komponenten, die dem allgemeinen Aufbau oder der Lagerung der Elektrolyten dienten (z. B. Tanks, Durchflussrahmen, Dichtungen und Fittings). Die Optimierung der Stromdichte und der Konzentration der aktiven Spezies beeinflusst das Volumen der Elektrolyten, was zu einer proportionalen Steigerung der absoluten Kosten für die Tanks führt. Dies erklärt das große Optimierungspotenzial. Diese lineare Skalierung der Kosten ist jedoch insbesondere für industrielle Anwendungen problematisch, da erwartete Skaleneffekte^{119,180,296,297} und mögliche kostengünstigere Materialien für die Tanks nicht berücksichtigt werden. Eine Anpassung des Modells sollte daher Skalierungsfunktionen für die einzelnen Komponenten enthalten, die entweder auf den ermittelten Werten verschiedener Durchflussbatterien mit unterschiedlichen Skalierungen basieren oder wirtschaftliche Gesetzmäßigkeiten wie Skaleneffekte und Grenzkosten berücksichtigen. Zudem sollte die zeitliche Dimension in Form von Lebenszykluskosten einfließen, wie exemplarisch bei der Betrachtung der Elektrolyten in Kapitel 6.3.4 dargestellt wurde.

Die MV/TEMPOL FBn wiesen das größte Optimierungspotenzial von 80,18% bei Reduktion der spezifischen Kosten der aktiven Spezies und Erhöhung der effektiven Zellspannung auf. Dies ist hauptsächlich auf die im Labormaßstab hohen spezifischen Kosten der aktiven Spezies zurückzuführen, bei denen signifikante Reduktionen durch ökonomische Skaleneffekte möglich erscheinen. Die effektive Zellspannung kann aufgrund des begrenzten Potenzialfensters der wässrigen Lösung nicht unbegrenzt erhöht werden. Die Optimierung von effektiver Zellspannung und Stromdichte sollte jedoch aufgrund eines Optimierungspotenzials von 45,85% weiter untersucht werden. Die hohen Kosten der Elektrolyte, die insbesondere in Bezug auf die effektive Zellspannung relevant sind, spielten dabei eine wesentliche Rolle. Das dritthöchste Optimierungspotenzial von 37,68% (innerer Widerstand und Stromdichte) ist ebenfalls aufgrund der hohen Kosten der Elektrolyte von Bedeutung, da diese durch den inneren Widerstand und das damit verbundene Elektrolytvolumen beeinflusst werden.

Auch die Konzentration der aktiven Spezies bei gleichzeitiger Variation der Stromdichte zeigte mit 28,61% ein nennenswertes Optimierungspotenzial. Im Vergleich zu den V FBn ist der Einfluss zwar geringer, bleibt jedoch ein relevanter Hebel. Die Optimierung des Elektrodenmaterials mit einem Optimierungspotenzial von 3,20% weist ein leicht höheres Potenzial auf als bei den V FBn, was auf die Optimierungsmöglichkeiten mit Hinblick auf eine Reduzierung des Innenwiderstandes der Zelle bei organischen Elektrolyten hinweisen könnte. Das Optimierungspotenzial der Membran lag mit 1,73% geringfügig über dem der V FBn und könnte in weiterführenden Untersuchungen durch alternative Membranmaterialien untersucht werden. Die Gasdiffusionsschicht zeigte bei den MV/TEMPOL FBn mit lediglich 0,54% ein sehr geringes Optimierungspotenzial, was auf die im Labormaßstab bereits hinreichend guten Eigenschaften des gewählten Materials zurückzuführen sein könnte. Das geringste Optimierungspotenzial ergab sich bei der Bipolarplatte mit 0,03 %, was nahelegt, dass in dieser Komponente unter den gegebenen Bedingungen keine signifikanten wirtschaftlichen Verbesserungen mehr zu erwarten sind.

7.3.2. Diskussion ausgewählter Optimierungsfragen verschiedener organischer und anorganischer Durchflussbatterien mit dem Betriebspunkt einer Stromdichte von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$

Im Betriebszustand bei einer Stromdichte von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ wurden die FB-Typen 1,67 M V FBn, 0,5 M MV/TEMPOL FBn und 0,1 M AQDS/BQDS FBn untersucht. Die sieben ausgewählten Optimierungsfragen, die in den Sensitivitätsanalysen mithilfe des Modells betrachtet wurden, lauten wie folgt:

- a) $U_{\text{Zelle eff}}$ in Abhängigkeit vom $\text{Konzentration}_{\text{aktive Spezies}}$
- b) R_{innerer} in Abhängigkeit vom $\text{Konzentration}_{\text{aktive Spezies}}$
- c) R_{innerer} in Abhängigkeit vom $\text{Fläche}_{\text{aktive}}$
- d) Stromdichte in Abhängigkeit vom R_{innerer}
- e) Stromdichte in Abhängigkeit der $U_{\text{Zelle eff}}$
- f) Stromdichte in Abhängigkeit der $\text{Konzentration}_{\text{aktive Spezies}}$
- g) Stromdichte in Abhängigkeit der $\text{Fläche}_{\text{aktive}}$

Aufgrund der vorangegangenen Erfahrungen (vgl. **Tabelle 10** a – d) wurde auf die Untersuchung der komponentenweisen Variation des flächenspezifischen Widerstands und der spezifischen Kosten der jeweiligen widerstandstragenden Komponente verzichtet. Stattdessen wurden sieben Optimierungsfragen ausgewählt, bei denen erwartet wird, dass beide Variablen sowohl den Bereich der Energie als auch der Leistung beeinflussen. Damit ist ein Kosteneffekt entweder durch die benötigte Anzahl an Zellen oder durch das erforderliche Elektrolytvolumen zu erwarten. Beides lässt einen deutlichen Einfluss auf die spezifischen Energieinhaltskosten erwarten.

Die Optimierungspotenziale dieser sieben Optimierungsfragen sind in **Abbildung 86** dargestellt.

Tabelle 11 stellt die numerischen Werte sowie die Priorisierungsreihenfolge der Optimierungsfragen für die jeweiligen FB-Typen dar. Auf dieser Grundlage erfolgt eine vergleichende Diskussion der drei FB-Typen in Bezug auf den zu erwartenden technoökonomischen Erfolg der jeweiligen Optimierungsfrage.

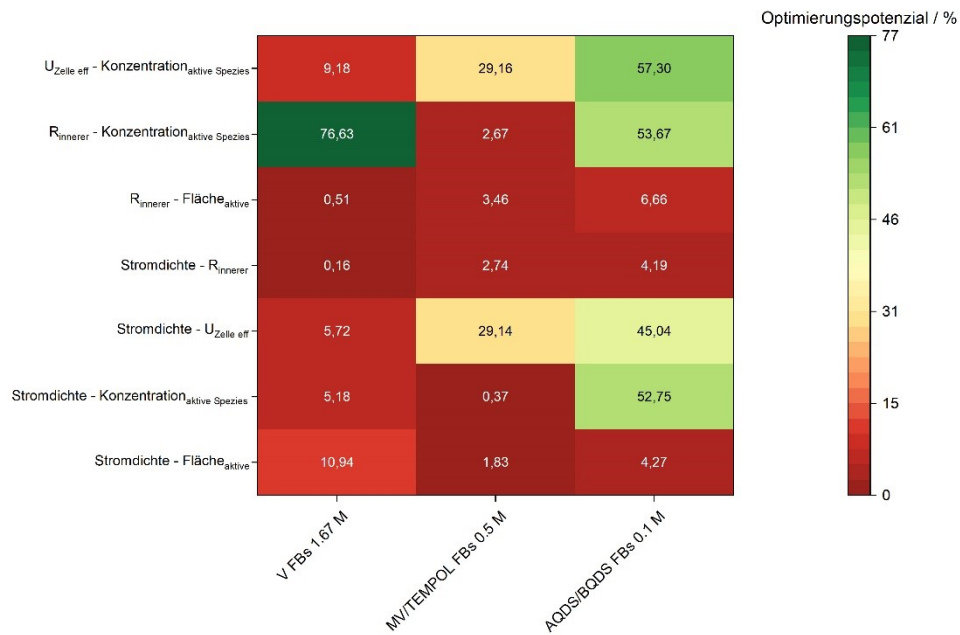


Abbildung 86. Optimierungspotenziale der durchgeführten Sensitivitätsanalysen bezüglich der spezifischen Energieinhaltskosten von Durchflussbatterien im Labormaßstab mit Elektrolytenpaaren von 1,67 M Vanadium/Vanadium, 0,5 M MV/TEMPOL und solchen mit 0,1 M AQDS/BQDS auf Grundlage des Betriebszustands von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$.

Tabelle 11. Technoökonomische Priorisierung der Optimierungspotenziale bezüglich der spezifischen Energieinhaltskosten bei den untersuchten Durchflussbatterien im Labormaßstab mit Elektrolytenpaaren von 1,67 M Vanadium/Vanadium, 0,5 M MV/TEMPOL und solchen mit 0,1 M AQDS/BQDS auf Grundlage des Betriebszustands von $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$.

untersuchte Optimierungsfrage		Durchflussbatterie					
		V FBn 1,67 M		MV/TEMPOL FBn 0,5 M		AQDS/BQDS FBn 0,1 M	
		Rang	Opti- mie- rungs- poten- zial [%]	Rang	Opti- mie- rungs- poten- zial [%]	Rang	Opti- mie- rungs- poten- zial [%]
a)	$U_{\text{Zelle eff}}$ - Konzentration _{aktive Spezies}	3	9,18	1	29,16	1	57,30
b)	R_{innerer} - Konzentration _{aktive Spezies}	1	76,63	5	2,67	2	53,67
c)	R_{innerer} - Fläche _{aktive}	6	0,51	3	3,46	5	6,66
d)	Stromdichte - R_{innerer}	7	0,16	4	2,74	7	4,19
e)	Stromdichte - $U_{\text{Zelle eff}}$	4	5,72	2	29,14	4	45,04
f)	Stromdichte - Konzentration _{aktive Spezies}	5	5,18	7	0,37	3	52,75
g)	Stromdichte - Fläche _{aktive}	2	10,94	2	1,83	6	4,27

Die größtenteils niedrigen Werte der Optimierungspotenziale für die V FBn resultieren daraus, dass dieser FB-Typ im betrachteten Bereich bereits weitgehend optimiert ist. Das größte Optimierungspotenzial bei den V FBn, mit 76,63%, ergibt sich durch die Erhöhung der Konzentration der aktiven Spezies und gleichzeitiger Verringerung des inneren Widerstands. Dieser Wert ist sogar im Vergleich zu den Optimierungspotenzialen der V FBn bei der genutzten Stromdichte von 25 mA cm^{-2} der höchste. Dies lässt sich dadurch erklären, dass sowohl die Verringerung des inneren Widerstands als auch die Erhöhung der Konzentration der aktiven Spezies innerhalb der untersuchten Grenzen dazu führt, dass das benötigte Elektrolytvolumen für dieselbe Speicherzeit sinkt. Infolgedessen verringert sich die Menge des benötigten Elektrolyts und insbesondere sinkt auch die Anzahl der benötigten Tanks, die bei den Durchflussbatterien im Labormaßstab überproportional hohe Kosten verursachen (vgl. **Abbildung 25**). Auch unter diesen Betriebsbedingungen sind ähnliche kostenreduzierende Effekte durch Skaleneffekte²⁹⁶ zu erwarten. Die zweit- und dritthöchsten Optimierungspotenziale von 10,94% für die Kombination aus Stromdichte und aktiver Fläche sowie 9,18% für die Kombination aus effektiver Zellspannung und Konzentration der aktiven Spezies sind mehr als siebenmal geringer. Dies liegt daran, dass die Erhöhung der effektiven Zellspannung, die Verringerung der aktiven Fläche und die Erhöhung der Stromdichte

vorrangig Auswirkungen auf die Anzahl der benötigten Zellstapel haben, die jedoch nicht unter Eins reduziert werden kann, weshalb weitere Optimierungen im Modell keine zusätzlichen Effekte mehr hervorrufen. Die anderen Optimierungspotenziale liegen mit weniger als 6% deutlich niedriger.

Bei den MV/TEMPOL FBn sind die höchsten Optimierungspotenziale im Zusammenhang mit der Erhöhung der effektiven Zellspannung zu finden. Sowohl die Erhöhung der effektiven Zellspannung in Kombination mit der Konzentration der aktiven Spezies als auch mit der Stromdichte führt zu einem Optimierungspotenzial von etwa 29%. Beide Optimierungsfragen wirken sich sowohl durch die Reduzierung des benötigten Elektrolytvolumens als auch durch eine Verringerung der benötigten Zellstapel positiv aus. Der Betrieb der MV/TEMPOL FBn bei der höchstmöglichen effektiven Zellspannung trägt daher im Vergleich zu den anderen untersuchten Optimierungsstrategien am meisten zur Kostenreduzierung bei. Alle anderen untersuchten Optimierungsfragen weisen Optimierungspotenziale von weniger als 3,5% auf.

Bei den AQDS/BQDS FBn gibt es deutlichen Spielraum für Kostensenkungen durch Optimierungen.²⁹⁸ Einige Parameter tragen jedoch nicht wesentlich zur Gesamtoptimierung bei, wie etwa Stromdichte, innerer Widerstand und aktive Fläche. Die Kombinationen dieser Parameterpaare ergeben Optimierungspotenziale von nur knapp 5%, während alle anderen Kombinationen zwischen 45% und 57% erreichen. Die höchsten Optimierungspotenziale resultieren aus der Erhöhung der effektiven Zellspannung und der Konzentration der aktiven Spezies. Diese Erhöhungen bringen jedoch Herausforderungen mit sich, da bei den AQDS/BQDS FBn niedrige effektive Zellspannungen genutzt werden mussten, um einen möglichst nebenreaktionsfreien Betrieb zu gewährleisten. Aufgrund von Grenzen bei der tatsächlich erreichten Löslichkeit des eingesetzten AQDS/BQDS konnten zudem nur sehr geringe Konzentrationen der aktiven Spezies im Bereich von 0,1 mol L⁻¹ bis 0,3 mol L⁻¹ untersucht werden, was weit unterhalb der maximalen Löslichkeit von AQDS/BQDS in H₂SO₄ liegt, die etwa 1 mol L⁻¹ beträgt.¹⁵

7.4. Nutzung des Optimierungspotenzials zur Eingrenzung der Optimierungsfragen und Bestimmung eines optimierten Betriebszustands

Die grundsätzliche Frage nach einem optimierten Parametersatz für die jeweilige FB ergibt sich technoökonomisch aus den dargestellten Optimierungsansätzen des Modells. Der direkte Weg zur Berechnung dieses Parametersatzes führt über partielle Differentialgleichungen.

Dabei bilden die Batterieparameter $(x, y, z, \dots)$ einen vollständigen Parametersatz (X) .

$$X = (x, y, z, \dots) \quad \text{Gl. 49}$$

Beispielhafte Batterieparameter sind unter anderem die Stromstärke, die Konzentration der aktiven Spezies und weitere (vgl. Anhang D). Die Kostenfunktion eines einzelnen Parameters ist $C(x)$. Das Minimum dieser Kostenfunktion ergibt sich aus der Lösung der Gleichung Gl. 50:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) C(x) = 0 \quad \text{Gl. 50}$$

Die Kostenfunktion des kompletten Parametersatzes für die FB sei dann:

$$C(X) = C(x, y, z, \dots) \quad \text{Gl. 51}$$

Hat $C(X)$ ein Minimum, so kann dieses durch die Lösung der partiellen Differentialgleichung (Gleichung Gl. 52) ermittelt werden, wobei angenommen wird, dass alle Parameter unabhängig voneinander sind:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} + \dots\right) C(x, y, z, \dots) = 0 \quad \text{Gl. 52}$$

Die Lösung dieser Gleichung liefert die Werte der Parameter für das absolute Minimum der Kosten $(x_{\min}, y_{\min}, z_{\min}, \dots)$ des gesamten Parametersatzes. Diese Parameterwerte stimmen jedoch nicht zwingend mit den Werten des Kostenminimums der jeweiligen einzelnen Parameter (siehe Gleichung Gl. 50) überein.

Die bereits erwähnte Vielzahl möglicher Optimierungsfragen des im Modell abgebildeten Systems stellt ein Maß für die Komplexität dieses Systems dar. Diese Komplexität erschwert die Implementierung einer solchen direkten mathematischen Methode zur Minimierung der Kostenfunktion, da sie den Rechenaufwand erhöht und die Darstellung der Ergebnisse verkompliziert. Zudem haben die auftretenden Differentialgleichungen nicht immer Lösungen und erfordern die Einführung von Randbedingungen sowie zusätzlicher mathematischer Ansätze, um Lösungen zu finden. Eine analytische Lösung gestaltet sich in solchen Fällen schwierig, da sie oft mehr als drei Dimensionen umfasst, was die Visualisierung der physikalischen Interpretation erschwert.

Im Folgenden wird eine Methode vorgestellt, die es ermöglicht, einen optimierten Parametersatz ohne den Einsatz von Differentialgleichungen mithilfe eines iterativen

Ansatzes abzuschätzen. Die im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse ermittelten minimalen Werte $SK_{Energieinhalt, min}$ sind ebenso bekannt wie die $SK_{Energieinhalt, Betriebspunkt}$ (vgl. Unterkapitel 7.2). Das dabei erhaltene Parameterpaar x_{min} und y_{min} stellt die Parameterwerte der untersuchten Variablen beim Kostenminimum der jeweiligen Optimierungsfrage dar. Dieses Kostenminimum gilt jedoch nur im Kontext der spezifischen Optimierungsfrage bezüglich der Variablen x und y . Eine andere Optimierungsfrage der Variablen y und z , würde unterschiedliche Parameterwerte y_{min} und z_{min} ergeben. Die beiden in der jeweiligen Optimierungsfrage kostenminimierten Parameter $y_{min, xy}$ und $y_{min, yz}$ können sich folglich unterscheiden, obwohl sie dieselbe Variable beschreiben.

Um den kostenminimierten Parameter aus allen untersuchten Optimierungsfragen abzuleiten, wird ein Ansatz zur Gewichtung der unterschiedlichen Ergebnisse für $y_{min, xy}$, $y_{min, yz}$ usw. verwendet. Hierzu werden die OPs (siehe Gleichung Gl. 45 bzw. Gleichung Gl. 46) herangezogen, die ausschließlich auf einer paarweisen Sensitivitätsanalyse von Komponenten basieren und eine qualitative Aussage darüber erlauben, inwieweit der jeweils ermittelte Parameterwert zu einer Optimierung beitragen kann.

So ergibt sich der Parameterwert für y_{min} wie folgt:

$$y_{min} = \frac{y_{min, xy} \cdot OP_{xy} + y_{min, yz} \cdot OP_{yz}}{OP_{xy} + OP_{yz}} \quad \text{Gl. 53}$$

Für n Parameter und k mögliche paarweise Kombinationen dieser Parameter lässt sich dieser Ansatz für den Parameter x wie folgt verallgemeinern:

$$x_{min} = \frac{x_{min, xy} \cdot OP_{xy} + x_{min, zx} \cdot OP_{zx} + \dots}{OP_{xy} + OP_{zx} + \dots} = \frac{\sum_{i=1, j=1}^k OP_{x_i y_j} \cdot x_{min, x_i y_j}}{\sum_{i=1, j=1}^n OP_{x_i y_j}} \quad \text{Gl. 54}$$

Am Beispiel der untersuchten AQDS/BQDS FB (vgl. Unterkapitel 7.2.1.2) lässt sich der kostenoptimierte Parameterwert für die Stromdichte berechnen. Die berücksichtigten Parameterwerte sind:

22,36 mA cm⁻² mit einem Optimierungspotenzial von 4,27% (vgl. **Abbildung 66**),
 8,99 mA cm⁻² mit einem Optimierungspotenzial von 52,75% (vgl. **Abbildung 69**),
 2,2 mA cm⁻² mit einem Optimierungspotenzial von 45,04% (vgl. **Abbildung 72**) und
 8,8 mA cm⁻² mit einem Optimierungspotenzial von 4,19% (vgl. **Abbildung 66**).

Daraus ergibt sich unter Anwendung der Gleichung Gl. 54 die folgende Berechnung:

$$Stromdichte_{min} = \frac{(22,36 \cdot 4,27 + 8,99 \cdot 52,75 + 2,2 \cdot 45,04 + 8,8 \cdot 4,19) \text{ mA cm}^{-2}}{4,27 + 52,75 + 45,04 + 4,19} \quad \text{Gl. 55}$$

Daraus ergibt sich ein kostenoptimierter Parameterwert der untersuchten AQDS/BQDS FB für die Stromdichte von 6,64 mA cm⁻².

In gleicher Weise können auch die anderen Parameterwerte kostenoptimiert bestimmt werden. Durch die Auswahl der Parameter, die nach dem Zusammenbau der Zelle noch verändert werden können, sowie deren paarweise Sensitivitätsanalysen untereinander, lässt sich ein kostenoptimierter Betriebszustand aller derartigen Parameter ableiten.

8. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die experimentelle und technoökonomische Leistung von organischen Durchflussbatterien (MV/TEMPOL und AQDS/BQDS) mit anorganischen Durchflussbatterien (Vanadium/Vanadium) verglichen. Diese Durchflussbatterien wurden im Labor selbst aufgebaut, mit unterschiedlichen Stromdichten betrieben und die ermittelten Werte sowohl als technische als auch als ökonomische Datenbasis für die anschließende Modellierung verwendet.

Bei den MV/TEMPOL-Durchflussbatterien wurde vor den Zyklenexperimenten ein Aktivierungszyklus mit niedriger Stromdichte ($0,025 \text{ mA cm}^{-2}$) durchgeführt, um das System in einen elektrochemischen Gleichgewichtszustand zu überführen. Durch diesen Schritt werden Redoxreaktionen vollständig aktiviert und instabile Zwischenprodukte abgebaut, wodurch ein reproduzierbarer Ausgangszustand geschaffen wird. Die Notwendigkeit solcher Aktivierungszyklen lässt sich durch die dynamische Verschiebung der Gleichgewichte der Redoxreaktionen erklären, welche sonst durch kinetische Hürden oder Nebenreaktionen zu unerwünschten Instabilitäten führen können^{299,300}. Ähnliche Verfahren sind in der elektrochemischen Charakterisierung von organischen Redoxmaterialien sowie in Redox-Flow-Batterien etabliert, um eine stabile Ausgangsbasis sicherzustellen^{95,301}. Dies war durch eine starke Reduzierung des inneren Widerstands nach der Aktivierung festzustellen. Aufgrund der bekannten maximalen Löslichkeit der aktiven Spezies in wässrigen Lösungen wurde eine Maximalkonzentration von $0,5 \text{ mol L}^{-1}$ gewählt.

Stabile AQDS/BQDS Durchflussbatterien wurden über ausreichend viele Zyklen in den angegebenen Elektrolytzusammensetzungen bis zu einer maximalen Konzentration der aktiven Spezies von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ und innerhalb eines Spannungsbereichs von $0,15 \text{ V}$ bis $0,9 \text{ V}$ gefunden.

Die in den Zyklen festgestellten niedrigen Coulombeffizienzen der MV/TEMPOL-Durchflussbatterien deuteten auf Nebenreaktionen während der Zyklen hin. Im Gegensatz dazu wiesen die AQDS/BQDS-Durchflussbatterien nahezu keine Nebenreaktionen auf, was sich in Coulombeffizienzen nahe 100% widerspiegelte. Insgesamt zeigten die organischen Durchflussbatterien deutlich niedrigere Spannungseffizienzen als die Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien. Dies könnte auf eine ausgeprägte Konzentrationspolarisation zurückzuführen sein, die durch Diffusions- und Migrationseinschränkungen beim Ladungstransport verursacht wird.⁷ Darüber hinaus könnten auch kinetische Limitierungen der Elektrodenreaktionen zu den beobachteten Effizienzverlusten beigetragen haben. Langsame Elektronentransferraten führen zu Überspannungen, die sowohl die Spannungseffizienz als auch die Leistungsdichte negativ beeinflussen^{233,259}. Die untersuchten AQDS/BQDS-Durchflussbatterien wiesen zudem eine deutlich geringere Leistungsdichte im Vergleich zu den Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien auf. Dies ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass anstelle der erwarteten Zwei-Elektronentransferreaktion lediglich eine Ein-Elektronenreaktion ablief, wodurch der theoretisch mögliche Ladungstransport pro Molekül reduziert wurde.^{302,303} Auch hier könnten kinetische Barrieren, beispielsweise durch instabile Zwischenstufen oder durch langsame Umsetzungen, eine Rolle gespielt haben.²³³

Diese Arbeit belegt, dass auf der Grundlage einer umfassenden technoökonomischen Modellierung Bewertungen von unterschiedlichen Optimierungsansätzen von

Durchflussbatterien getroffen werden können. Um eine systemübergreifende Vergleichbarkeit verschiedener Durchflussbatterien zu gewährleisten, bieten sich grundsätzlich leistungs- oder energiespezifische Kosten an. In dieser Arbeit wurden die energiespezifischen Kosten (€ Wh^{-1}) als Messgröße definiert, welche die Kosten in Bezug auf die Kapazität normiert.

Die Anzahl der Komponenten der in dieser Arbeit modellierten standardisierten Durchflussbatterie führt kombinatorisch zu über 40.000 Optimierungsfragen. Daher wurde eine vollständige Optimierungsuntersuchung aller Komponenten der Durchflussbatterie nicht durchgeführt. Zur Reduzierung dieser Komplexität wurde der Ansatz gewählt, Sensitivitätsanalysen für jeweils zwei Eingangsvariablen durchzuführen, die als Optimierungsfrage verstanden werden. Dabei wurden Erkenntnisse aus Materialeigenschaften als Rahmenbedingungen verwendet, um die Analyse zu verfeinern. Mathematisch wurden partielle Ableitungen dieser paarweisen Betrachtung im Modell genutzt, um Hinweise zu Optimierungsmöglichkeiten zu geben.

Die ausschließliche technoökonomische Darstellung solcher Optimierungsansätze mithilfe absoluter Zahlen greift jedoch zu kurz, weshalb in dieser Arbeit auch weitergehende Einordnungen vorgenommen wurden. So wurde die relative Größe des Optimierungspotenzials eingeführt, die den zusätzlichen Vorteil bietet, die Optimierungsfragen untereinander vergleichbar zu machen. Erst in zweiter Priorität wurde der Optimierungsbereich betrachtet, der die absoluten Einsparungen widerspiegelt. Die Priorisierung der für die jeweilige Durchflussbatterie zu favorisierenden Optimierungsfragen erfolgte demzufolge auf Basis der ermittelten Optimierungspotenziale.

Bei den Untersuchungen auf Basis der mit einer Stromdichte von 25 mA cm^{-2} betriebenen Durchflussbatterien ergab sich für die Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien in erster Linie durch eine weitere Erhöhung der Konzentration der aktiven Spezies die Möglichkeit einer technoökonomischen Optimierung in Verbindung mit mittleren Stromdichten (Optimierungspotenzial von 61,56%). Auch eine Erhöhung der effektiven Zellspannung, kombiniert mit einer Verringerung der spezifischen Kosten der aktiven Spezies und mittleren Stromdichten, ist betrachtenswert (Optimierungspotenzial von 10,52% bzw. 10,44%), wenngleich bei diesem Ansatz weniger starke Auswirkungen auf die energiespezifischen Kosten zu erwarten sind als beim erstgenannten Ansatz. Für die MV/TEMPOL Durchflussbatterien ist durch die Verringerung der spezifischen Kosten der aktiven Spezies in Verbindung mit einer Erhöhung der effektiven Zellspannung eine deutliche technoökonomische Optimierung zu erwarten (Optimierungspotenzial von 80,18%). Darüber hinaus erscheinen Ansätze zur Erhöhung der effektiven Zellspannung bei mittleren bis hohen Stromdichten, der Erhöhung der Stromdichte bei Verringerung des inneren Widerstands sowie der Verringerung des inneren Widerstands bei mittleren Stromdichten (Optimierungspotenziale von 45,85%, 37,68% und 28,61%) zur Verringerung der energiespezifischen Kosten erfolgversprechend.

Die mit $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ durchgeführten Untersuchungen bestätigten für die Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien die höchste Priorität für eine technoökonomische Optimierung durch Erhöhung der Konzentration der aktiven Spezies in Verbindung mit einer Verringerung des inneren Widerstands (Optimierungspotenzial von 76,63%). Auch eine Erhöhung der Stromdichte in Verbindung mit einer Erhöhung der aktiven Fläche (Optimierungspotenzial von 10,94%) sowie eine Erhöhung der effektiven Zellspannung in Verbindung mit einer Erhöhung der Konzentration der aktiven Spezies

(Optimierungspotenzial von 9,18%) versprechen eine Verringerung der energiespezifischen Kosten. Diese Verringerung ist jedoch bei den beiden letztgenannten Kombinationen in deutlich geringerem Ausmaß zu erwarten als bei der erstgenannten. Auch für die MV/TEMPOL Durchflussbatterien bestätigte sich die technoökonomisch erfolgversprechende Option der Erhöhung der effektiven Zellspannung in Verbindung mit einer konstant hohen Konzentration der aktiven Spezies und einer moderaten Verringerung der Stromdichte (Optimierungspotenziale von 29,16% und 29,14%). Die Untersuchungen der AQDS/BQDS Durchflussbatterien identifizierten die vielversprechendsten Möglichkeiten zur technoökonomischen Optimierung durch Erhöhung der Konzentration der aktiven Spezies, kombiniert mit einer Erhöhung der effektiven Zellspannung, einer Verringerung des inneren Widerstands sowie einer moderaten Reduktion der Stromdichte (Optimierungspotenziale von 57,30%, 53,67% und 52,75%). Darüber hinaus wurde eine ähnlich erfolgversprechende Möglichkeit zur Reduzierung der energiespezifischen Kosten durch eine Erhöhung der effektiven Zellspannung in Verbindung mit einer Verringerung der Stromdichte ermittelt (Optimierungspotenzial von 45,04%).

Es ergaben sich also für die unterschiedlichen FB-Typen verschiedene Optimierungsansätze zur Minimierung der energiespezifischen Kosten. Dies ist zum einen in der deutlich unterschiedlichen Kostenstruktur der im Labormaßstab genutzten Durchflussbatterien begründet, aber auch die unterschiedlichen technischen Eigenschaften führten zu den unterschiedlichen Bewertungen hinsichtlich der Eignung der jeweiligen Optimierungsfrage.

Allgemein wurde festgestellt, dass die Elektrolyte der organischen Durchflussbatterien im Labormaßstab um den Faktor 20 (MV/TEMPOL) bzw. 7 (AQDS/BQDS) teurer waren als die Vanadium-Elektrolyte. Aufgrund ihrer Verfügbarkeit, Sicherheit und Ungiftigkeit sind AQDS/BQDS-Elektrolyte jedoch vielversprechend, was durch kostensenkende Skaleneffekte einer großindustriellen Produktion weiter gestärkt werden könnte. Damit könnten AQDS/BQDS Durchflussbatterien eine kostengünstige Alternative zu Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien darstellen.

Während der umfangreichen Untersuchungen zur Erstellung der Datenbasis für die Sensitivitätsanalysen wurde das Excel-basierte Modell parallel in die Python-basierte Stand-Alone-Software „FLOW battery Techno-Economics (FLOTE)“ überführt. Mit dieser Software konnte die Auflösung der für die Darstellung der Sensitivitätsanalysen notwendigen Matrizen erhöht und gleichzeitig der Arbeitsaufwand durch Automatisierung deutlich minimiert werden.

Ein weiterer Teil dieser Arbeit befasste sich mit der Dimension der zeitlichen Nutzung von Durchflussbatterien. Dieser Ansatz erweiterte den ersten Schritt der Sensitivitätsanalysen, der quasi die technoökonomische Optimierung des Anfangszustands der Durchflussbatterie darstellt, um die Dimension der Nutzung über die Zeit mithilfe von Degradationsuntersuchungen. Der technoökonomische Ansatz wurde durch die Definition einer Halbwertsdegradation ergänzt, wobei die Annahme zugrunde lag, dass nach dieser Degradation der komplette Elektrolyt erneuert werden muss.

Bei den untersuchten Durchflussbatterietypen traten unterschiedliche Degradationsverläufe auf, die von der Konzentration der aktiven Spezies sowie der während des Ladens und Entladens verwendeten Stromdichte abhängen. Die 0,3 M

Vanadium/Vanadium Durchflussbatterie, die mit 50 mA cm^{-2} betrieben wurde, erreichte mit 721 Zyklen bis zur Halbwertsdegradation die mit Abstand geringste relative Degradation. Im Gegensatz dazu wies die $1,67 \text{ M}$ Vanadium/Vanadium Durchflussbatterie bei einer Stromdichte von $37,5 \text{ mA cm}^{-2}$ mit 59 Zyklen bis zur Halbwertsdegradation die höchste relative Degradation auf. Eine weitere $1,67 \text{ M}$ Vanadium/Vanadium-Durchflussbatterie, betrieben bei 50 mA cm^{-2} , erreichte nach 90 Zyklen die Halbwertsdegradation und damit ebenfalls eine ausgeprägte relative Degradation. Die MV/TEMPOL Durchflussbatterien wiesen mit 119 Zyklen ($0,5 \text{ M}$; 25 mA cm^{-2}), 153 Zyklen ($0,3 \text{ M}$; $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$) sowie 202 Zyklen ($0,1 \text{ M}$; $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$) bis zur Halbwertsdegradation eine mittlere relative Degradation in vergleichbaren Größenordnungen auf. Bei den AQDS/BQDS Durchflussbatterien mit einer Konzentration der aktiven Spezies von $0,3 \text{ mol L}^{-1}$ nahm die relative Degradation mit steigender Stromdichte deutlich zu; bei 5 mA cm^{-2} wurde eine Halbwertsdegradation nach 217 Zyklen erreicht, wohingegen sich diese bei einer Verdopplung der Stromdichte auf 76 Zyklen reduzierte.

Um eine mehrjährige Nutzung zu simulieren, wurde ein Umfang von 1400 Zyklen bei diesen Durchflussbatterien technoökonomisch untersucht. Es wurde angenommen, dass nach Erreichen der Halbwertsdegradation der komplette Elektrolyt ausgetauscht werden muss, wodurch die Kosten des Elektrolyten wiederholt anfallen. Für den Vergleich wurden die spezifischen Kapazitätsdichtekosten als technoökonomische Kenngröße genutzt. Der Vergleich machte deutlich, dass die Herstellungskosten der Elektrolyte einen erheblichen Einfluss auf die Höhe der spezifischen Kapazitätsdichtekosten ausüben. So hatten die Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien mit bis zu $185,74 \text{ € L Ah}^{-1}$ die niedrigsten spezifischen Kapazitätsdichtekosten. Die AQDS/BQDS Durchflussbatterien waren mit bis zu $829,19 \text{ € L Ah}^{-1}$ etwa viermal so teuer. Mit bis zu $3433,02 \text{ € L Ah}^{-1}$ hatten die MV/TEMPOL Durchflussbatterien die höchsten spezifischen Kosten, was sie im Vergleich zu den AQDS/BQDS Durchflussbatterien etwa viermal so teuer und im Vergleich zu den Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien sogar etwa 18-mal so teuer machten. Es ließ sich ebenfalls feststellen, dass eine niedrige Konzentration der aktiven Spezies in Kombination mit einer auf die Durchflussbatterie abgestimmten Stromdichte einen messbar positiven technoökonomischen Einfluss ausübt, da hierdurch die relative Degradation reduziert werden konnte. Zwei der untersuchten Durchflussbatterien konnten durch diese Betriebsbedingungen bezüglich der spezifischen Kapazitätsdichtekosten sogar eine niedrigere Dimension erreichen als die anderen Durchflussbatterien desselben Typs. Die $0,1 \text{ M}$ MV/TEMPOL Durchflussbatterie, die mit $12,5 \text{ mA cm}^{-2}$ betrieben wurde, erreichte mit $1058,42 \text{ € L Ah}^{-1}$ die Dimension der AQDS/BQDS Durchflussbatterien, und die $0,3 \text{ M}$ Vanadium/Vanadium Durchflussbatterie, die mit 50 mA cm^{-2} betrieben wurde, war mit Abstand die günstigste Durchflussbatterie in diesem Vergleich.

Um die 1400 Zyklen dieser Untersuchung realistisch einzuordnen, ist zu berücksichtigen, dass moderne Vanadium-Redox-Flow-Batterien in kommerziellen Anwendungen typischerweise auf Lebensdauern von über 10000 bis 20000 Lade- und Entladezyklen ausgelegt sind.^{21,180} Je nach Anwendung kann dies einer Betriebsdauer von 10 bis 20 Jahren entsprechen, wobei pro Tag durchschnittlich ein bis mehrere vollständige Zyklen durchlaufen werden. Im Vergleich dazu stellt die hier simulierte Zyklenzahl von 1400 eine eher konservative Abschätzung dar und entspricht etwa einem Jahr zyklusintensiver Nutzung (z. B. bei vier Zyklen pro Tag), was wiederum die wirtschaftliche Bedeutung der Elektrolytkosten im Kurzzeitbetrieb besonders hervorhebt.

Es wurde deutlich, dass die Reduzierung der Elektrolytherstellungskosten bei gleichzeitiger Reduzierung der relativen Degradation durch eine darauf abgestimmte Stromdichte einen erheblichen positiven technoökonomischen Effekt auf den gesamten Lebenszyklus von Durchflussbatterien hat.

Zusätzlich wurde in dieser Arbeit ein Ansatz vorgeschlagen, mit dem die Frage nach einem technoökonomisch optimierten Parametersatz für Betriebszustände der einzelnen Komponenten praktikabel angegangen werden kann. Mathematisch gesehen entspricht die Suche nach einem absolut besten Parametersatz der Suche nach dem absoluten Minimum einer n-dimensionalen Funktion. Die Anzahl der Komponenten und die Tatsache, dass einige Komponenten mehr als nur eine Variable für das Modell liefern, machen diesen mathematischen Ansatz jedoch zu einem hochkomplexen Problem. Aus diesem Grund wurde in dieser Arbeit ein Ansatz entwickelt, der das Optimierungspotenzial zur Gewichtung der einzelnen Ergebnisse der Optimierungsfragen nutzt, die allesamt eine Variable gemeinsam haben. Dadurch kann mit vergleichsweise überschaubarem mathematischen Aufwand ein optimierter Parametersatz erstellt werden.

Ausblick

Die in den Untersuchungen festgestellten Schwächen der organischen Durchflussbatterien im Vergleich zu den Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien verdeutlichen, dass zukünftige Studien aus technoökonomischen Gesichtspunkten besonders auf die Verbesserung der Löslichkeit und Stabilität konzentrierter Elektrolyte sowie auf die Erweiterung des Betriebsspannungsfensters abzielen sollten. Andere Parameter wie der Innenwiderstand und die Elektrodenfläche haben nur einen geringen Einfluss auf die Kosten.

Insbesondere die im Vergleich zu den Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien noch geringen Spannungseffizienzen der untersuchten organischen Durchflussbatterien könnten möglicherweise durch den Einsatz geeigneter Additive und durch Anpassung der Elektrolytflussraten verbessert werden. Dies könnte dazu beitragen, die erwähnte Konzentrationspolarisation zu verringern. Bei den AQDS/BQDS Durchflussbatterien könnte es zudem lohnend sein, kationendurchlässige Membranen zu untersuchen. Weitere Untersuchungen dieser Durchflussbatterien mittels zyklischer Voltammetrie könnten die Vermutung bestätigen, dass statt der erwarteten Zwei-Elektronentransferreaktion nur eine einzelne Elektronentransferreaktion stattgefunden hat und auch die Gründe dafür klären.

Es ist jedoch hervorzuheben, dass sich alle durchgeführten technoökonomischen Bewertungen ausschließlich auf Laborzellen beziehen. Industrielle Großanlagen sind deutlich komplexer und bringen zusätzliche Kosten- und Strukturkomplexitäten mit sich, die im Labormaßstab nicht abgebildet sind (vgl. **Abbildung 8** und **Abbildung 9**). Bei industriellen Systemen sind signifikante Skaleneffekte zu erwarten, die zu deutlichen Kostensenkungen führen können.^{119,180,297,304,305}

Beispielsweise zeigen technoökonomische Analysen schon seit längerem, dass die Systemkosten von Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien durch erhöhte Produktionsvolumina von über 350 \$/kWh auf unter 100 \$/kWh reduziert werden können.²⁹⁷ Darüber hinaus betonen Übersichtsarbeiten die Notwendigkeit, technoökonomische Bewertungen von Laborsystemen in den Kontext industrieller Anwendungen zu überführen, um eine realistische Kostenabschätzung zu ermöglichen.^{119,180,304,305}

Die Ergebnisse der Optimierungsfragen lassen sich aufgrund der erwähnten Kostenstruktur nicht direkt und linear auf Durchflussbatterien im größeren Maßstab übertragen, da hier teilweise noch überproportionale Einsparungen zu erwarten sind, etwa durch Effekte der Economy of Scale. Dennoch liefern die vorliegenden Resultate wichtige Anhaltspunkte zur Identifizierung relevanter Einflussfaktoren sowie zur Entwicklung skalierbarer Optimierungsstrategien.

Durch die Nutzung der Stand-Alone-Software FLOTE⁶⁵ (siehe Unterkapitel 4.4 und 4.5) wird es in zukünftigen Untersuchungen möglich sein, sehr schnell und detailliert Sensitivitätsanalysen zu einer Vielzahl von Optimierungsfragen durchzuführen. Eine direkte Einbindung der Software in Simulationslandschaften ist ebenfalls denkbar, da die softwareseitigen Schnittstellen in Python vergleichsweise einfach in andere Software integriert oder von dieser genutzt werden können. So kann das angepasste, softwarebasierte Modell, das durch neue und erweiterte Optimierungsfragen unter Einbeziehung der jeweiligen Skalierungsfunktionen weiterentwickelt wurde, in einer Simulationslandschaft als Energiespeichersystem integriert werden. Diese könnte dann auch zur Untersuchung einer längeren Nutzungsphase verwendet werden.

Die Anwendung der Methode zur Identifizierung eines technoökonomisch optimierten Parametersatzes wird es ermöglichen, die technoökonomische Performance einer konkreten Durchflussbatterie hinsichtlich energiespezifischer, leistungsspezifischer oder Gesamtkosten zu verbessern. Gerade im Hinblick auf die spätere Umsetzung im industriellen Maßstab bietet dieser methodische Ansatz ein fundiertes Werkzeug zur strategischen Entscheidungsunterstützung bei der Technologieentwicklung. Trotz möglicher Herausforderungen bei der praktischen Umsetzung deuten die Ergebnisse auf signifikante Potenziale hin. Diese Arbeit soll dazu anregen, die Machbarkeit organischer Durchflussbatterien zu diskutieren und Optimierungsstrategien für das Upscaling vorzuschlagen.

Zusammenfassend lassen sich folgende Ansätze zur weiteren Optimierung von Durchflussbatterien festhalten:

- Ermittlung von komponentenweisen Optimierungspotenzialen als Grundlage für die Entscheidung weiterer Forschungsarbeiten mit dem Ziel einer möglichst effizienten Kostenoptimierung.
- Untersuchung der erreichbaren Skaleneffekte bei den Komponenten mit dem höchsten Optimierungspotenzial (z. B. Elektrolytkosten).
- Erweiterung des technoökonomischen Modells durch Integration der ermittelten Skaleneffekte.
- Erweiterung des technoökonomischen Modells durch Integration der zeitlichen Nutzung, basierend auf Degradationsmessungen.
- Nutzung der Methode der mit Optimierungspotenzial gewichteten Ergebnisse der Optimierungsfragen, um technoökonomisch sinnvollere Parametersätze für die Betriebszustände einer konkreten Durchflussbatterie zu identifizieren.

Anhänge

A. Aufbau Durchflussbatterie

In diesem Anhang wird der standardisierte Zellaufbau der im Labor verwendeten Zellen (Vanadium/Vanadium, MV/TEMPOL und AQDS/BQDS) detailliert erklärt. Es wird auf **Abbildung 7** Bezug genommen.

Die Laborzelle war durch eine Membran in zwei symmetrische Halbzellen unterteilt. In jeder Kammer strömte die Elektrolytlösung über Einlässe in der End- und Isolationsplatte in den Durchflussrahmen (grüne bzw. orange Pfeile), der den aktiven Reaktionsraum bereitstellte. In diesem Raum fand die Elektronentransferreaktion an der Oberfläche der Elektrode statt. Die Elektronen wanderten dann über die Bipolarplatte, die den Rahmen auf der Rückseite verschloss, zum Stromabnehmer, der mit dem Messgerät verbunden war. Abschließend verließen die Elektrolyte die Zelle durch die diagonal gegenüberliegenden Ausgänge in der Endplatte.

Zu den Funktionen im Einzelnen:

(1) Endplatten:

Die beiden Endplatten sorgten für die mechanische Stabilität des Zellaufbaus. Sie waren durch 14 Schrauben fest miteinander verbunden und übten Druck auf die inneren Komponenten aus, um eine stabile Struktur zu gewährleisten. Jede Endplatte war mit vier Löchern ausgestattet, von denen jeweils zwei als Ein- und Auslass für den Elektrolyten dienten.

(2) Isolationsplatten:

Die Isolationsplatten befanden sich zwischen dem Stromabnehmer und der Endplatte jeder Halbzelle. Sie verhinderten den direkten elektrischen Kontakt zwischen diesen beiden leitfähigen Komponenten und vermieden somit einen Kurzschluss.

(3a und b) Fittinge und Rohrverschlusskappen:

Die Fittinge wurden in die Öffnungen der End- und Isolationsplatten für den Elektrolytkreislauf eingeschraubt. Dadurch konnten die Schläuche, durch die die Elektrolytlösungen zur Zelle gepumpt wurden, mit der Zelle verbunden werden. Die Löcher, die nicht als Ein- oder Auslass dienten, wurden mit Rohrverschlusskappen verschlossen.

(4 und 10) Dichtungen:

In jeder Halbzelle wurden insgesamt drei Dichtungen an verschiedenen Stellen verwendet, um ein Auslaufen des Elektrolyten zu verhindern. Diese Dichtungen wurden auf die Größe der Isolationsplatte zugeschnitten und je nach Anwendung entweder gelocht oder mit Aussparungen versehen. Zwischen der Isolationsplatte und dem Rahmen dienten Dichtungen dazu, den Stromabnehmer und die Gasdiffusionsschicht präzise über dem Reaktionsraum im Durchflussrahmen zu fixieren und die Ein- und Auslässe für den Elektrolytdurchfluss an der Zellinnenseite abzudichten. Die Dichtungen zwischen dem Rahmen und der Membran verhinderten das Austreten des Elektrolyten zwischen diesen Komponenten.

(5) Stromabnehmer:

Der Stromabnehmer stellte den elektrischen Kontakt zwischen der Zelle und dem Messgerät her, wodurch der Elektronenfluss von einer Halbzelle zur anderen ermöglicht wurde. Der Stromabnehmer war passgenau auf die Größe der Bipolarplatte zugeschnitten und gewährleistete die elektrische Verbindung.

(6) Gasdiffusionsschicht:

Die Gasdiffusionsschicht war zwischen Stromabnehmer und Bipolarplatte positioniert, um den elektrischen Kontaktwiderstand zu minimieren. Verwendet wurde hierfür ein Carbon Paper ohne zusätzliche Mikroporenschicht (MPL) oder hydrophobe PTFE-Beschichtung. Aufgrund seiner offenporigen Mikrostruktur, hohen elektrischen Leitfähigkeit und mechanischen Anpassungsfähigkeit trägt das Material wesentlich zu einer gleichmäßigen Druckverteilung und einer effizienten elektrischen Kopplung bei. Dies verbessert die Leistungsübertragung innerhalb der Zelle und verringert systematische Widerstandsverluste.

(7) Bipolarplatte:

Die Bipolarplatten erfüllten zwei wesentliche Funktionen: Sie schlossen den Reaktionsraum gegenüber dem Stromabnehmer ab, um den direkten Kontakt mit den Elektrolytlösungen zu verhindern. Gleichzeitig ermöglichten sie aufgrund ihrer elektrischen Leitfähigkeit den Elektronenübertrag zwischen der Elektrode im Reaktionsraum und dem Stromabnehmer, der sich außerhalb des Reaktionsraums befand.

(8) Durchflussrahmen:

Der Durchflussrahmen stellte den Reaktionsraum für den Elektronentransfer in der jeweiligen Halbzelle bereit. Um Leckagen zu verhindern und das Eindringen der Dichtungen in die Kanäle für den Elektrolytein- und -ausfluss zu vermeiden, wurden die Kanäle mit Klebeband verschlossen.

(9) Elektrode:

Die Elektrode befand sich innerhalb des Durchflussrahmens und bot die Oberfläche, an der der Elektronenübertrag stattfand. Sie hatte einen maßgeblichen Einfluss auf die Kinetik der Redoxreaktion.

(11) Membran:

Die Membran wurde passgenau auf die Größe der Isolationsplatte und des Durchflussrahmens zugeschnitten. Ihre Hauptfunktion bestand darin, die beiden Halbzellen voneinander zu trennen, um einen direkten Kontakt der redoxaktiven Spezies in den Elektrolytlösungen zu verhindern. Gleichzeitig war die Membran für die entsprechenden Ionen permeabel, was einen Ladungsausgleich zwischen den Halbzellen ermöglichte.

i. Eingesetzte Materialien

Die bei allen FBn identischen Komponenten sind in **Tabelle 12** aufgeführt. Diese sind den jeweiligen Bereichen zugeordnet. Wenn vorhanden, sind ebenfalls Herstellerangaben aufgeführt.

Tabelle 12. Bereichsgegliederte Auflistung der für alle Durchflussbatterien identischen Komponenten.

Komponente		Bemerkungen
Energie		
Elektrolyttank	Gewindeflaschen (DURAN GL 45) Flaschen-Mehrfachverteilerdeckel (Schraubverschluss GL 45)	https://www.carlroth.com/de/de/flaschen-aus-glas/gewindeflasche-duran-gl-45-mit-hochtemperatur-verschluss/p/kcn6.1 https://www.carlroth.com/de/de/flaschen-mehrfachverteiler/zubehoer-fuer-hplc-flasche-mit-mehrfachverteiler/p/he24.1
Steuerung und Verbindungen		
PFA-Schläuche	Durchmesser 1/8" und 1/4" (Firma EM-Technik GmbH)	Produktbezeichnung: SL100S01PF10 2N100P0503PF SL100S05PF10 PL6737-FEM 1.09
Pumpe	Membran-Dosierpumpe (Firma KNF) Zweiphasen Stepper (Firma KNF) Labornetzgerät (Manson)	FE Z4 SSP-7080
Leistung (Zellstapel)		
Stromabnehmer	Kupferband (Firma Schlenk Metallfolien GmbH & Co. KG Cu-ETP R200)	https://kupfer.de/wp-content/uploads/2019/11/Cu-ETP.pdf
Isolationsplatte	Teflonisolationsplatte (selbstgefertigt im FRAUNHOFER ICT)	
Endplatte	Aluminiumplatte (selbstgefertigt im FRAUNHOFER ICT)	
Verbindungen	Krokodilklemmen, Messleitungen, Verbindungskupplungen (Firma Bürklin)	

Komponente		Bemerkungen
Membran/Separator	FAP-450 (Fumasep)	Zelle https://www.fumatech.com/Startseite/Membranen/Batterien/Produkte%2bfumasep/index.html
Filzelektrode	SIGRACELL GFA 6 EA (SGL Carbon)	https://www.sglcarbon.com/pdf/SGL-Datasheet-SIGRACELL-Battery-Felts-EN.pdf
Bipolarplatte	SIGRADUR G (Firma HTW Hochtemperatur-Werkstoffe GmbH)	
Dichtungen	Ice Cube Sealing 35 FC-PO 100 0,5 (Quintech)	https://www.quintech.de/produkte/komponenten/dichtungen/dichtungen-fuer-anwendungen-unter-120/35-fc-po-100-05/
Durchflussrahmen	Teflondurchflussrahmen (selbstgefertigt im FRAUNHOFER ICT)	
Schrauben	M4 x 20mm Sechskantschraube, Edelstahl A4, DIN 933 (RS PRO)	https://de.rs-online.com/web/p/sechskantschrauben/2632148/?cm_mmc=DE-PLA-DS3A-_-google-_-CSS_DE_DE_Befestigungsmaterial_Whoop-_- (DE:Whoop!)+Sechskantschrauben-_-2632148&matchtype=&aud-826607885227:pla-300691832569&qclid=CjwKCAjwlrqHBhByEiwAnLmYULv-FkOZm5vfHrCf7wlm1D52iS1l_hsCKE1GOsT9wyYDDku-0FWgbxoCOrMQAvD_BwE&gclidsrc=aw.ds
Gasdiffusionsschicht	GDS090S (QuinTech)	https://www.quintech.de/produkte/komponenten/gasdiffusionslagen/carbon-papier/gds090s/
Fittinge	PFA Fittinge 2N100MN0318PF 2N100P0503PF PFA-220-C (EM- Technik) Einschraubverschraubung mit Rohranschluss D1/8" NPT1/8" 2N100MN0318PF (EM- Technik)	https://em-technik.com/export/15345/pdfV

B. Bauanleitung der standardisierten Durchflussbatterie und des Teststands

Bei den getesteten Durchflussbatterien unterschieden sich teilweise die Elektrolyten, weshalb in dieser Bauanleitung diese Bestandteile nicht aufgeführt sind. Ansonsten beschreibt sie die standardisierten Durchflussbatterien, die auch im hierarchischen Komponentenmodell (vgl. **Abbildung 8**) abgebildet sind.

Im Labor wurde stets eine einzelne Zelle gebaut und betrieben, also kein Zellstapel.

Für den Aufbau der standardisierten Laborzelle wurden Materialien und Bauteile entweder kommerziell erworben oder in der FRAUNHOFER ICT-Werkstatt vor Ort angefertigt. Die dafür benötigten Teile sind in **Abbildung 87** dargestellt.

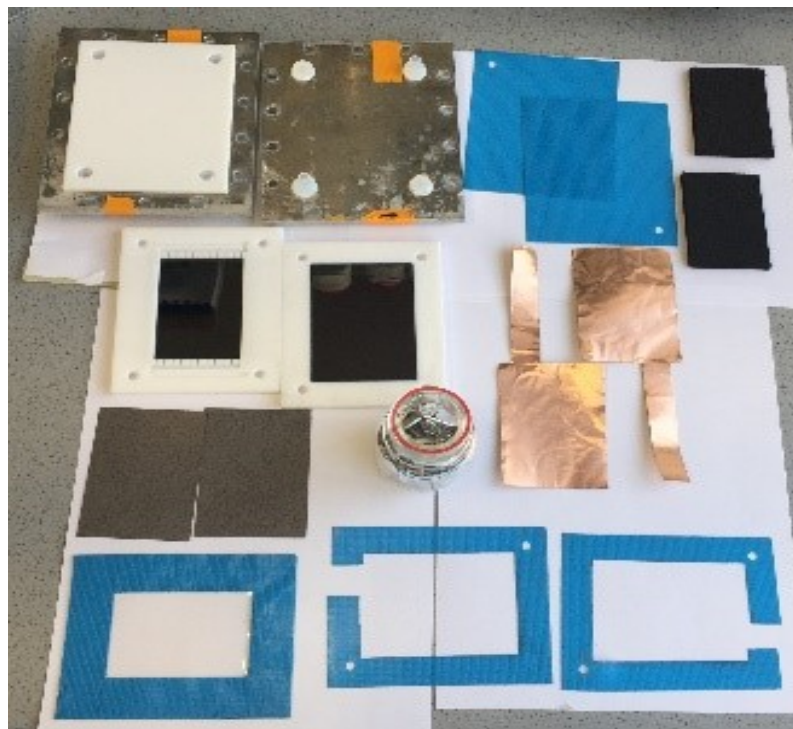


Abbildung 87. Übersicht der für den Zellaufbau benötigten Bauteile.

Die Endplatten (siehe **Abbildung 88**) aus Aluminium hatten die Abmaße 15,5 cm in der Höhe und 13,0 cm in der Breite. Jede Bauteilplatte wies 14 Löcher mit einem Durchmesser von 6,6 mm auf, um die Platten mittels Sechskantschrauben ($\varnothing = 6$ mm, Länge 4 cm) und Muttern zu verbinden. Zwei diagonal angeordnete Löcher mit einem Durchmesser von 1,6 cm dienten als Ein- und Ausgang für den Elektrolyten.

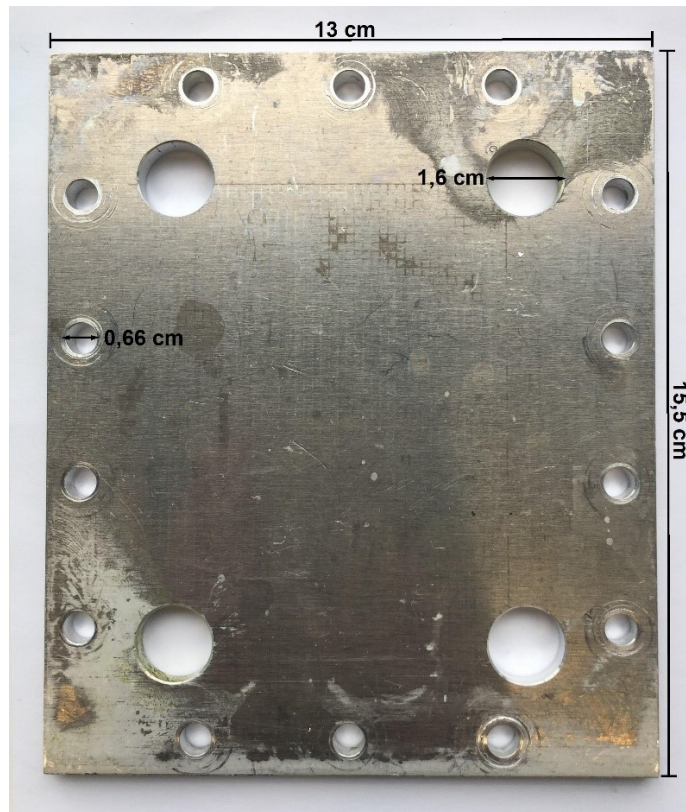


Abbildung 88. Vorderansicht der Endplatte aus Aluminium.

Teflonplatten mit den Maßen 12,5 cm x 10,0 cm wurden als Isolierung in den Zellen verwendet, hergestellt in der FRAUNHOFER ICT-Werkstatt. Diese Platten verfügen auf der Rückseite über vier NPT 1/8"-Gewinde zur Befestigung von Fittings.

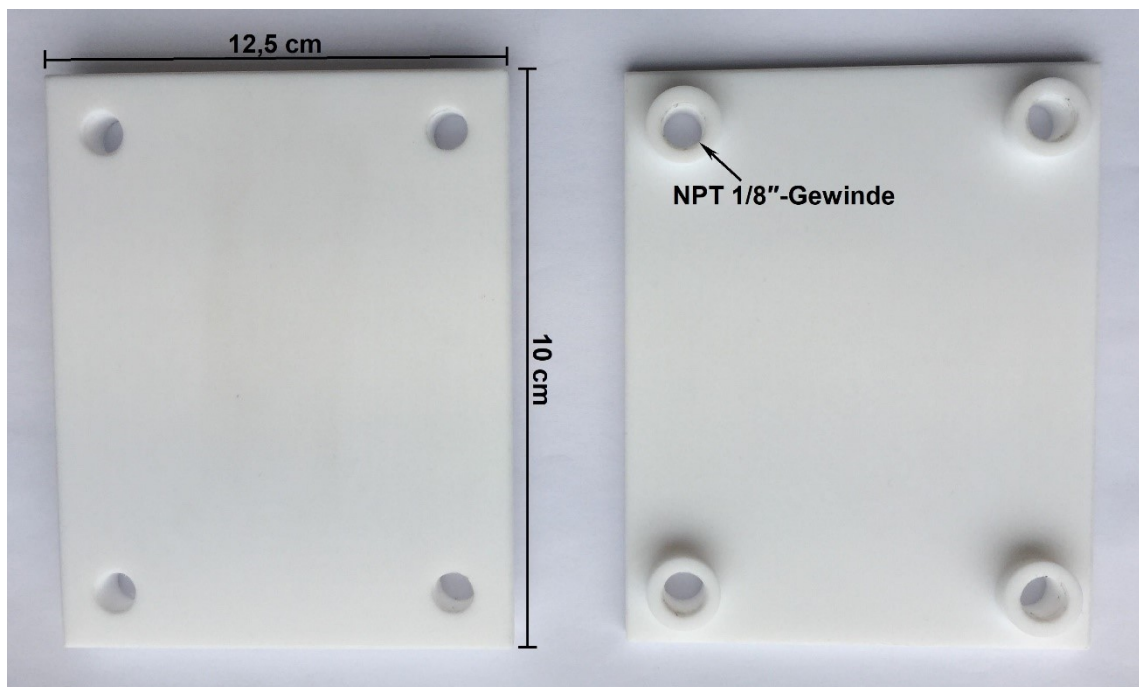


Abbildung 89. Vorder- und Rückansicht einer Isolationsplatte aus Teflon.

Pro Isolationsplatte wurden zwei gerade Einschraubvorrichtungen der Firma EM-Technik GmbH (Produktbezeichnung 2N100MN0318PF) mit einem NPT1/8"-Außengewinde auf der einen Seite und einem D1/8"-Anschluss auf der anderen Seite verwendet. Diese wurden als Ein- und Ausgang des Elektrolytkreislaufs in die Zelle geschraubt, wobei sie in diagonal zueinander liegende Gewinde der Teflonplatte geschraubt wurden. Die anderen beiden Öffnungen wurden mit Rohrverschlusskappen (Durchmesser 1/8") der Firma Swagelok (Produktbezeichnung PFA-220-C) verschlossen (siehe **Abbildung 90**).

Aufgrund der hohen Chemikalienbeständigkeit wurde für das Gehäusematerial beider Komponenten Perfluoralkoxy-Polymerverbindungen (PFA) gewählt. Die Gewinde beider Komponenten wurden mit Teflonband abgedichtet.

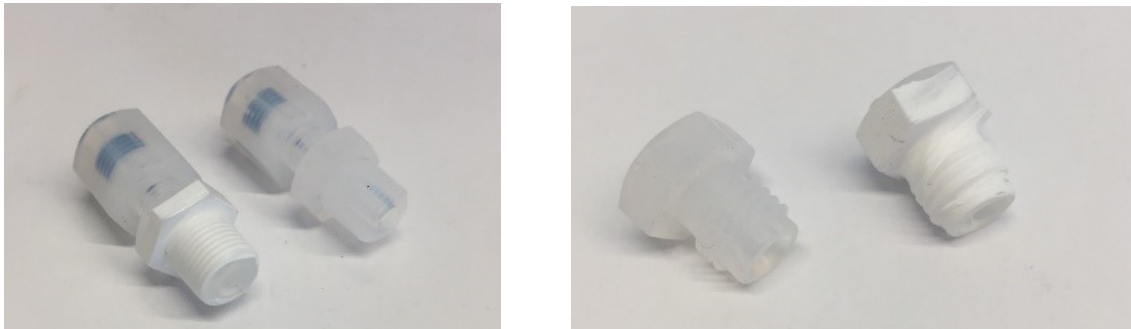


Abbildung 90. Gerade Einschraubverschraubung mit NPT1/8"-Außengewinde und D1/8"-Anschluss (links) und PFA-Rohrverschlusskappe mit 1/8"-Durchmesser (rechts).

Die Dichtungen der jeweiligen Komponenten verhindern den ungewollten Austritt des Elektrolyten aus der zusammengebauten Zelle. Als Dichtungsmaterial wurde eine Ice Cube Sealing 35 FC-PO 100 Dichtung der Firma QuinTech (Dicke 0,5 mm) eingesetzt. Insgesamt wurde das Material in drei verschiedene Formen zugeschnitten (siehe **Abbildung 91**). Die Abdichtung des Elektrolytein- und -austritts im Inneren der Zelle erfolgte mit einer Dichtung in der Größe der Teflonplatte, die entsprechend gelocht wurde. Zur Fixierung des Stromabnehmers wurde eine zweite gelochte Dichtung verwendet, die die Abmaße der Isolationsplatte hatte und Aussparungen für das Kupferband aufwies. Die Dichtungen zwischen den Reaktionsräumen und der Membran waren ebenfalls in der Größe der Teflonplatte und wurden nicht gelocht, sondern in der Mitte mit einer Aussparung in der Größe der Elektroden versehen.

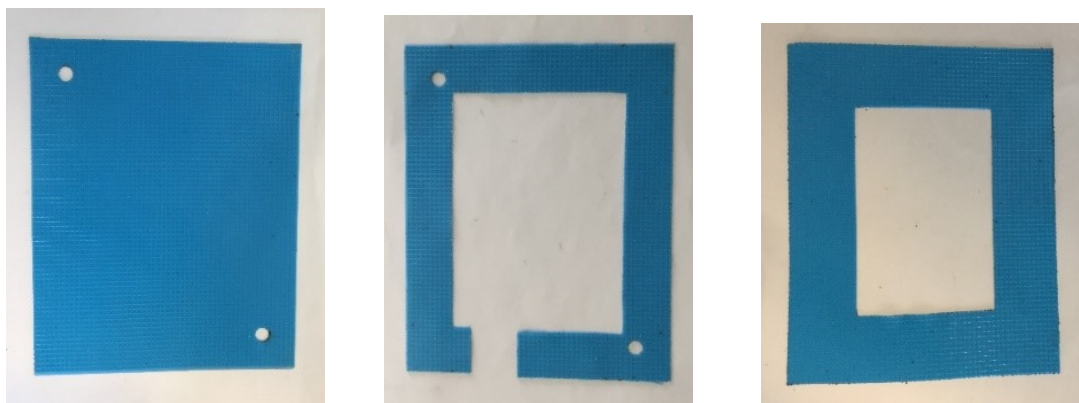


Abbildung 91. Verschiedene Ice Cube Dichtungen in der jeweiligen Form zum Abdichten des Elektrolyteintritts und -austritts (links), des Stromabnehmers (Mitte) und der Reaktionsräume (rechts).

Als Stromabnehmer in beiden Halbzellen wurde ein Stück Kupferband (siehe **Abbildung 92**) aus Cu-ETP R200 der Firma Schlenk Metallfolien GmbH & Co. KG verwendet. Es wurde in der Größe der Bipolarplatte mit einer überstehenden Lasche ausgeschnitten, um den Kontakt mit einer Krokodilklemme zu ermöglichen.



Abbildung 92. Kupferband für den elektrischen Kontakt zwischen Zelle und Messgerät.

Ein 0,09 mm dickes Kohlepapier (siehe **Abbildung 93**) der Firma QuinTech (Produktbezeichnung GDS090S) wurde als Gasdiffusionsschicht zwischen dem Kupferband und der Bipolarplatte eingesetzt. Es wurde auf die Größe der beiden genannten Komponenten zugeschnitten.



Abbildung 93. Gasdiffusionsschicht aus Kohlepapier GDS090S der Firma QuinTech.

Die Bipolarplatten wurden aus dem Glaskohlenstoffwerkstoff SIGRADUR G der Firma HTW Hochtemperatur-Werkstoffe GmbH gefertigt. Sie hatten die Maße 8,9 cm in der Höhe, 6,4 cm in der Breite und eine Dicke von 3 mm. Die Ränder der Platten wurden mit Schleifpapier abgerundet, sodass sie passgenau mit dem Silikonkleber E4 der Firma Wacker in die Rückseite des Durchflussrahmens geklebt werden konnten (siehe **Abbildung 94**). Glaskohlenstoff eignet sich aufgrund seiner hohen chemischen und thermischen Stabilität, hohen Härte sowie guten elektrischen Leitfähigkeit für die Verwendung als Bipolarplatte, d. h. als elektronenübertragende Komponente.



Abbildung 94. Bipolarplatte aus Glaskohlenstoffwerkstoff SIGRADUR G der Firma HTW Hochtemperatur-Werkstoffe GmbH.

Die von der FRAUNHOFER ICT-Werkstatt angefertigten Durchflussrahmen aus Teflon in der Größe der Teflonplatten wurden verwendet. Auf der Vorderseite bilden sie einen

Reaktionsraum mit einer Höhe von 7,7 cm, einer Breite von 5,2 cm und einer Tiefe von 3 mm. Die aktive Reaktionsfläche beträgt somit 40 cm^2 (siehe **Abbildung 95**). Auf der Rückseite des Rahmens befinden sich Aussparungen für die Bipolarplatten. Die Geometrie der Durchflussrahmen hat zum Ziel, Elektrolytleckagen zu verhindern und gleichzeitig ein homogenes elektrisches Feld im Inneren des Reaktionsraums zu erzeugen.

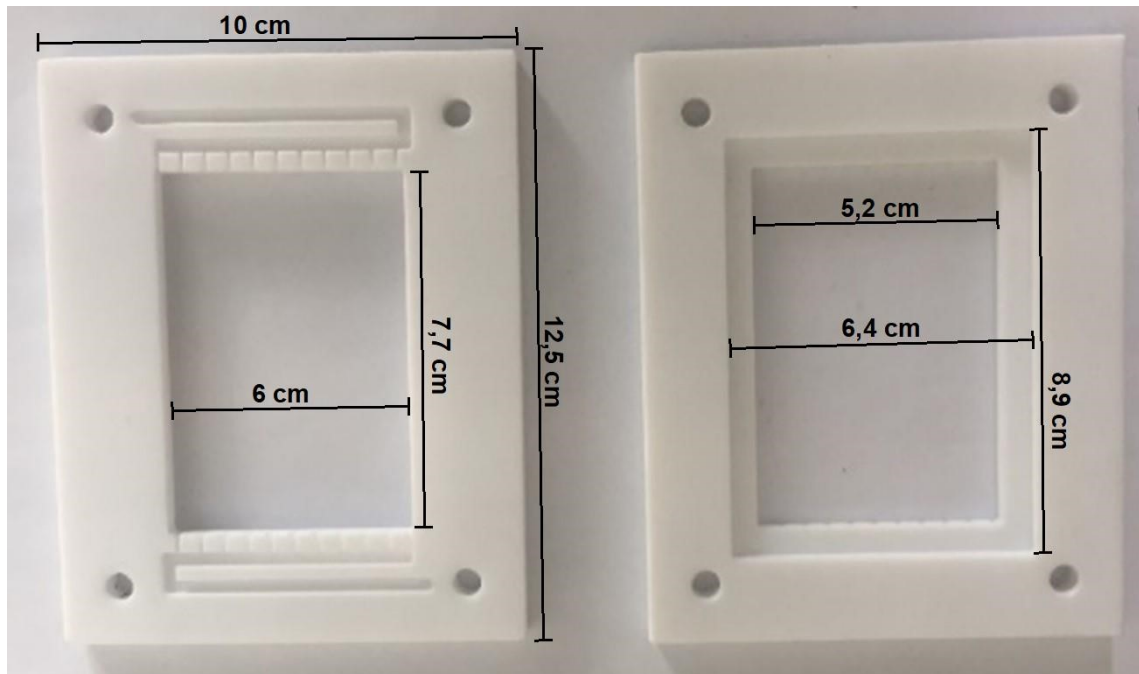


Abbildung 95. Vorderansicht des Teflonrahmens mit Reaktionsraum (links) und Rückansicht des Teflonrahmens mit Aussparungen für die Bipolarplatten (rechts).

Als Elektroden wurde ein 4,6 mm dicker GFD 4.6 EA-Kohlenstofffilz der Firma SGL Carbon verwendet, der bereits im Herstellungsprozess thermisch aktiviert wurde. Somit konnte dieser direkt ohne weitere Vorbehandlungen zugeschnitten und eingesetzt werden. Das Material ist chemisch inert, weist eine hohe Porosität und gute elektrische Leitfähigkeit auf.

Zur Unterteilung der Zelle in zwei Halbräume wurde eine fumasep FAP-450 Membran der Firma Fumatech GmbH mit einer Dicke von $50 \mu\text{m}$ eingesetzt. Es handelt sich um eine Anionenaustauschermembran ohne Gewebeerstärkung. Die Membran zeichnet sich durch einen niedrigen ohmschen Widerstand aus, was zu guten Performanceparametern für die gesamte Zelle führt.

Die aufgebaute Zelle ist **Abbildung 96** zu entnehmen.

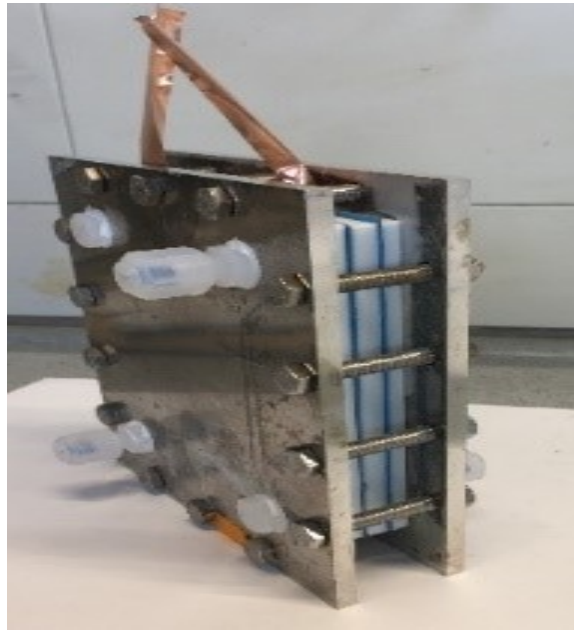
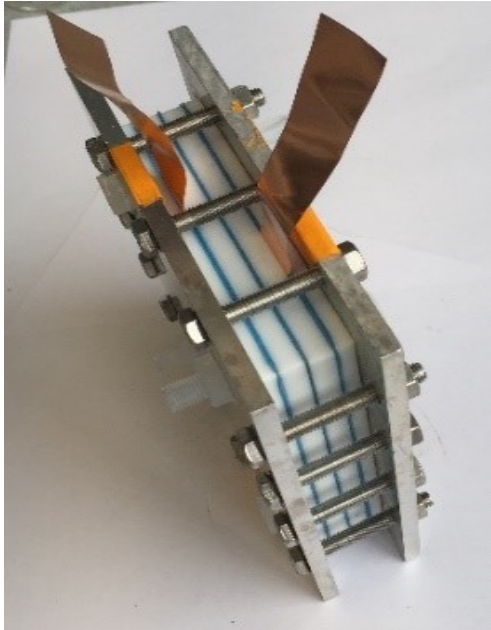


Abbildung 96. Aufgebaute Standardlaborzelle in Draufsicht (links) und Queransicht (rechts).

Nach dem Zusammenbau der Standardlaborzelle muss diese in den Teststand integriert werden. Die überstehenden Laschen des Kupferbandes wurden mit der entsprechenden Krokodilklemme verbunden, die der Polung der Halbzelle entspricht. Mit herkömmlichen Laborkabeln wurde die Zelle mit dem Messgerät verbunden. Alle diese Bauteile wurden von der Firma Bürklin geliefert.

Für die Elektrolyttanks wurden 100 mL Gewindeflaschen aus DURAN-Glas verwendet. Diese wurden mit einem Flaschen-Mehrfachverteilerdeckel der Firma Carl Roth verschlossen (siehe **Abbildung 97**). Zwei der vier Öffnungen des Verschlussdeckels wurden für den Elektrolytkreislauf genutzt. Eine dritte Öffnung diente dem kontinuierlichen Zufluss eines Inertgases (Stickstoff bzw. Argon), und die letzte Öffnung blieb bei beiden Halbzellenkreisläufen zur Verhinderung von Druckaufbau im System offen.

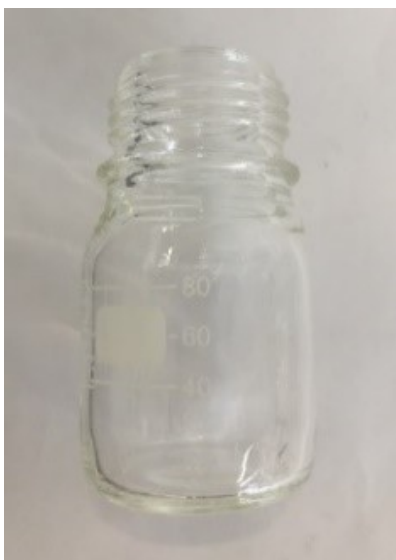


Abbildung 97. 100 mL Gewindeflasche (links) und Flaschen-Mehrfachverteiler mit vier Anschlüssen (rechts).

PFA-Schläuche mit einem Durchmesser von 1/8" (Firma EM-Technik GmbH, Produktbezeichnung: SL100S01PF10) wurden in eine Öffnung des Flaschen-Mehrfachverteilers gesteckt und über eine gerade Verschraubung (Produktbezeichnung: 2N100P0503PF) mit einem weiteren PFA-Schlauch (Durchmesser 1/4", ebenfalls von EM-Technik GmbH, Produktbezeichnung: SL100S05PF10) verbunden. Letzterer wurde an den Pumpenkanal angeschlossen.

An den Pumpenausgängen wurde ein symmetrischer Aufbau aus Schläuchen und Fittingen verwendet und der 1/8"-Schlauch mit Hilfe der Fittinge mit NPT-Außengewinde mit den unteren Eingängen der Zelle verknüpft. Durch Verbinden der oberen Ausgänge der Zelle über ein weiteres Stück des 1/8"-Schlauchs mit den Elektrolyttanks wurden die beiden Halbzellenkreisläufe geschlossen.

Die Zirkulation der Elektrolytlösungen innerhalb der Halbzellenkreisläufe wurde durch eine PL6737-FEM 1.09 Membran-Dosierpumpe der Firma KNF ermöglicht. Diese Pumpe verfügt über zwei Pumpenköpfe, die auf einem Schrittmotor montiert sind, was es ermöglichte, beide Elektrolytkreisläufe gleichzeitig mit einer einzigen Pumpe zu betreiben. Der Schrittmotor wurde durch einen FE Z4 Zweiphasen-Stepper, ebenfalls von KNF, gesteuert. Der Stepper war auf der einen Seite mit einem Stecker an den Motor angeschlossen und auf der anderen Seite mit einem SSP-7080 Labornetzgerät von Manson verbunden, das die Stromversorgung für die Pumpe sicherstellte. Die verwendeten Kabel wurden direkt im ICT selbst hergestellt. (siehe **Abbildung 98**).

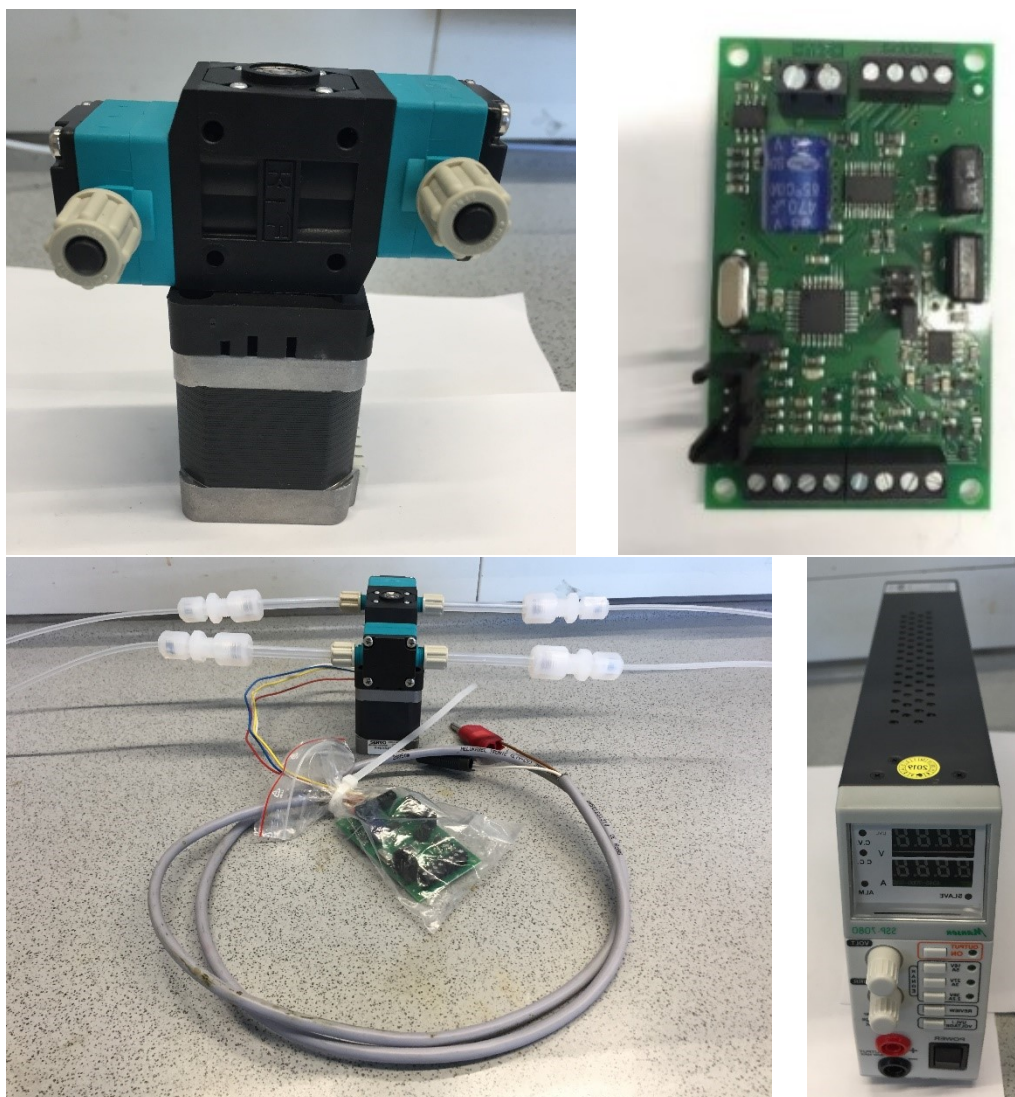


Abbildung 98. Membranpumpe mit zwei Pumpenköpfen (oben links), Schrittmotor-Steuerung (oben rechts), kompletter Aufbau des Pumpensystems mit Schläuchen und Kabeln (unten links) und Labornetzgerät (unten rechts).

Der fertige Aufbau, mit dem sowohl die 5x5-Zyklen-Tests als auch die Degradationstests durchgeführt wurden, ist in **Abbildung 99** dargestellt.

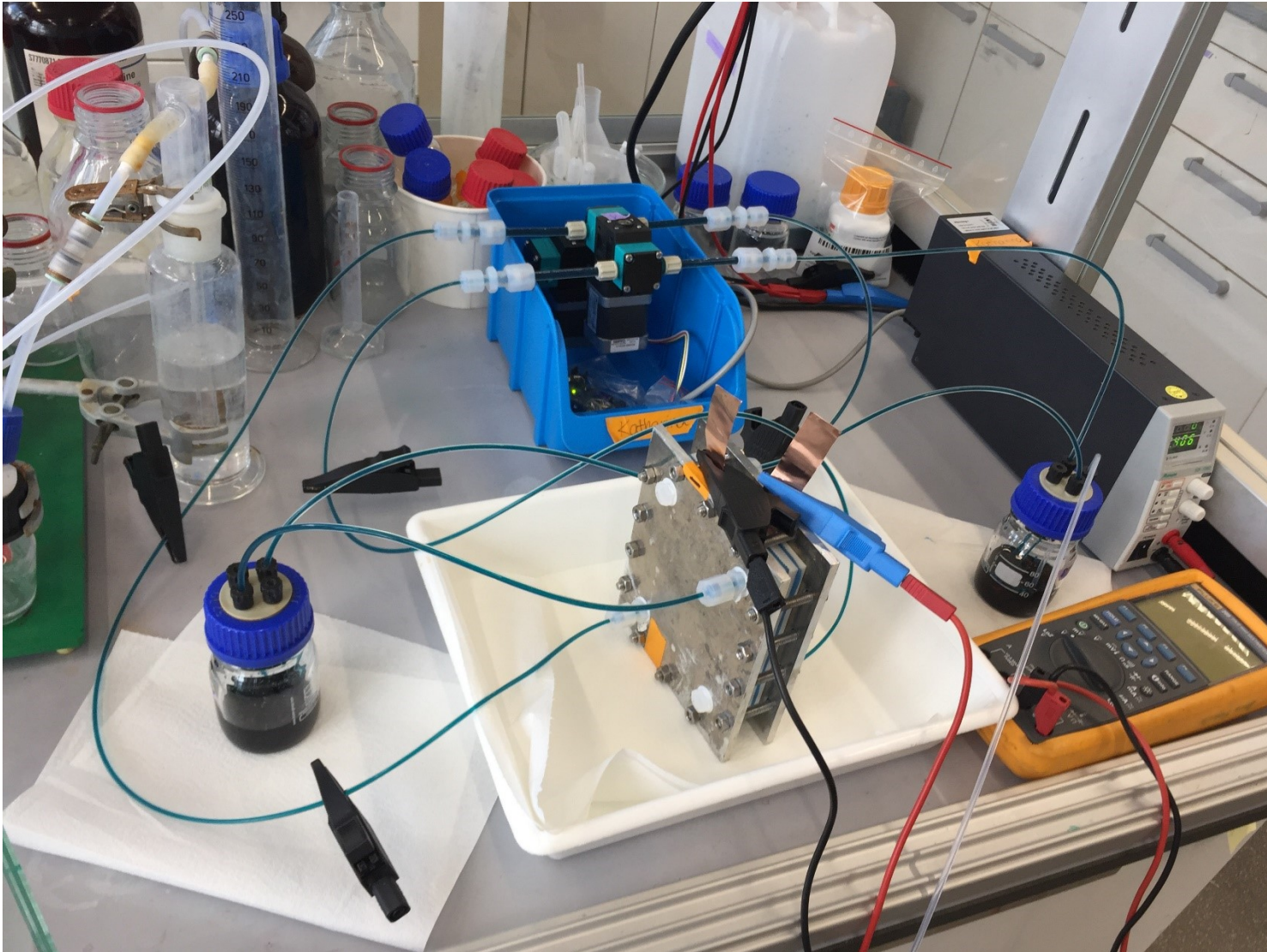


Abbildung 99. Kompletter Aufbau des standardisierten Teststands für die standardisierten Labor-Durchflussbatterien.

C. Messreihenübersicht zur Ermittlung der wesentlichen Eingangsparameter für die technoökonomische Modellierung

Die Laborarbeit, die dieser Dissertation zugrunde liegt, wurde im Rahmen des Projekts SONAR (Modelling for the **S**earch **f**or **N**ew **A**ctive materials for **R**edox flow batteries), finanziert durch die EU im Rahmen des Union's Horizon 2020 research and innovation programme unter dem Grant Agreement no. 875489 durchgeführt.¹²⁷ Eine Auswahl der in den durchgeführten Tests ermittelten Daten wurde in Exceltabellen aufbereitet, veröffentlicht und ist abrufbar (<https://doi.org/10.5281/ZENODO.10926884>).³⁰⁶ Zusätzlich wurde eine Anleitung zum Verständnis und zur Auswertung der dort dargestellten Labordaten beigelegt.

D. Übersicht der technoökonomischen Modellierungsdaten

Für die bei allen FBn identischen Komponenten sind in **Tabelle 13** die für die Modellierung wesentlichen Parameter aufgeführt.

Tabelle 13. Wesentliche Technoökonomische Modellierungsdaten der standardisierten Komponenten aus den Labormessungen aller Durchflussbatterien.

Komponente / Parameter	Wert	Einheit
Energiekosten	0,3	€ kWh ⁻¹
Spezifische Personalkosten	30	€ h ⁻¹
Stromdichte	12,5 / 25	mA cm ⁻²
Aktive Fläche (Fläche _{aktive})	40	cm ²
Anzahl _{Zellstapel}	1	
Energie		
SoC _{min}	0.05-0.16	
SoC _{max}	0.84-0.95	
Spezifische Kosten _{Elektrolyttank}	1036	€ L ⁻¹
Kosten _{Elektrolyttank} ^{**}	41	€
Leistung (Zellstapel)		
Spezifische Kosten _{Stromabnehmer}	700	€ m ⁻²
Zusatzfaktor _{Stromabnehmer}	1,5	
Herstellungszeit _{Stromabnehmer}	0,083	h Stück ⁻¹
Anzahl _{Stromabnehmer}	2	
Leitfähigkeit _{Stromabnehmer}	8,7 10 ⁶	S m ⁻¹
Spezifische Kosten _{Isolationsplatte}	300	€ m ⁻²
Zusatzfaktor _{Isolationsplatte}	2,3	
Anzahl _{Isolationsplatte}	1	
Herstellungskosten* _{Isolationsplatte}	20	€ Stück ⁻¹
Spezifische Kosten _{Endplatte}	200	€ m ⁻²
Zusatzfaktor _{Endplatte}	1,5	
Anzahl _{Endplatte}	2	
Herstellungskosten* _{Endplatte}	5	€ Stück ⁻¹
Kabel	5	€ Stück ⁻¹
Anzahl _{Kabel}	4	
Herstellungszeit _{Finale Zell- und Stapelmontage}	0,66	h Stück ⁻¹
Energiebedarf _{Finale Zell- und Stapelmontage}	1	kWh

Zelle			
Spezifische Kosten	Membran/Separator	2500	€ m ⁻²
Zusatzfaktor	Membran/Separator	1,5	
Herstellungszeit	Membran/Separator	0,083	h Stück ⁻¹
Anzahl	Membran/Separator	1	
Leitfähigkeit	Membran/Separator	0,694	S m ⁻¹
Spezifische Kosten	Elektrode	150	€ m ⁻²
Zusatzfaktor	Elektrode	1,5	
Herstellungskosten	Elektrode	5	€ Stück ⁻¹
Anzahl	Elektrode	2	
Leitfähigkeit	Elektrode	83,3	S m ⁻¹
Spezifische Kosten	Bipolarplatte	418	€ m ⁻²
Zusatzfaktor	Bipolarplatte	1,3	
Herstellungskosten	Bipolarplatte	5	€ Stück ⁻¹
Anzahl	Bipolarplatte	2	
Leitfähigkeit	Bipolarplatte	22 10 ³	S m ⁻¹
Spezifische Kosten	Dichtung	1250	€ m ⁻²
Zusatzfaktor	Dichtung	4	
Herstellungskosten	Dichtung	5	€ Stück ⁻¹
Anzahl	Dichtung	6	
Spezifische Kosten	Gasdiffusionsschicht	1500	€ m ⁻²
Zusatzfaktor	Gasdiffusionsschicht	5	
Herstellungskosten	Gasdiffusionsschicht	5	€ Stück ⁻¹
Anzahl	Gasdiffusionsschicht	2	
Leitfähigkeit	Gasdiffusionsschicht	167	S m ⁻¹
Spezifische Kosten	Durchflussrahmen	300	€ m ⁻²
Zusatzfaktor	Durchflussrahmen	1,5	
Herstellungszeit	Durchflussrahmen	10	h Stück ⁻¹
Anzahl	Durchflussrahmen	2	
Kosten	Schrauben	16,58	€
Kosten	Fittinge	146,66	€

Die unterschiedlichen Komponenten bei der Elektrolytkomposition sind in den folgenden Unterkapiteln je FB-Typ ebenfalls inklusive der wesentlichen Parameter aufgeführt.

i. Vanadium/Vanadium Durchflussbatterien

Die für die Modellierung wesentlichen Parameter, die ausschließlich für die V FBn verwendet wurden, sind in **Tabelle 14** aufgeführt.

Tabelle 14. Wesentliche technoökonomische Modellierungsdaten aus den Labormessungen der V Durchflussbatterien.

Komponente / Parameter	Wert	Einheit
durchschnittliche Leistung _{V FB 1,67 M; 25 mA cm⁻²}	0,82	W
Speicherzeit _{V FB 1,67 M; 25 mA cm⁻²}	1,76	h
U_{rev} _{V FB 1,67 M; 25 mA cm⁻²}	1,25	V
durchschnittliche Leistung _{V FB 1,67 M; 12,5 mA cm⁻²}	0,68	W
Speicherzeit _{V FB 1,67 M; 12,5 mA cm⁻²}	1,76	h
U_{rev} _{V FB 1,67 M; 12,5 mA cm⁻²}	1,36	V
Stromdichte	12,5; 25	mA cm ⁻²
Aktivierungsüberspannung _v	0,005	V
Konzentrationsüberspannung _v	0,02	V
Ohmsche Überspannung	0,055	V
Energie		
SoC _{min}	0,05-0,16	
SoC _{max}	0,84-0,95	
Elektrolyt V FB		
Posolyt V^{4+}/V^{5+}		
φ^0 _{Posolyt}	1	V
Ohmscher Widerstand _{Posolyt}	0,12	mΩ
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Posolyt}	4,25	€ L ⁻¹
Konzentration _{Aktive Spezies Posolyt}	0,3 / 1,67	mol L ⁻¹
Ladungszahl _{Aktive Spezies Posolyt (z)}	1	
Molekulargewicht _{Aktive Spezies Posolyt}	50,942	g mol ⁻¹
Spezifische Kosten _{Lösungsmittel Posolyt (H₂SO₄)}	0,26	€ L ⁻¹
Konzentration _{Lösungsmittel Posolyt}	3,8	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Lösungsmittel Posolyt}	98,079	g mol ⁻¹
Spezifische Kosten _{Additiv Posolyt (H₃PO₄)}	0,02	€ L ⁻¹
Konzentration _{Additiv Posolyt}	0,05	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Additiv Posolyt}	97,994	g mol ⁻¹
Negolyt V^{2+}/V^{3+}		
φ^0 _{Negolyt}	-0,25	V
Ohmscher Widerstand _{Negolyt}	0,12	mΩ
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Negolyt}	4,25	€ L ⁻¹
Konzentration _{Aktive Spezies Negolyt}	0,3 / 1,67	mol L ⁻¹
Ladungszahl _{Aktive Spezies Negolyt (z)}	1	
Molekulargewicht _{Aktive Spezies Negolyt}	50,942	g mol ⁻¹
Spezifische Kosten _{Lösungsmittel Negolyt (H₂SO₄)}	0,26	€ L ⁻¹
Konzentration _{Lösungsmittel Negolyt}	3,8	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Lösungsmittel Negolyt}	98,079	g mol ⁻¹
Spezifische Kosten _{Additiv Negolyt (H₃PO₄)}	0,02	€ L ⁻¹
Konzentration _{Additiv Negolyt}	0,05	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Additiv Negolyt}	97,994	g mol ⁻¹

ii. MV/TEMPOL Durchflussbatterien

Die für die Modellierung wesentlichen Parameter, die ausschließlich für die MV/TEMPOL FBn verwendet wurden, sind in **Tabelle 15** aufgeführt.

Tabelle 15. Wesentliche technoökonomische Modellierungsdaten aus den Labormessungen der MV/TEMPOL Durchflussbatterien.

Komponente / Parameter	Wert	Einheit
durchschnittliche Leistung _{MV/TEMPOL FB 0,5 M; 12,5 mA cm⁻²}	0,55	W
Speicherzeit _{MV/TEMPOL FB 0,5 M; 12,5 mA cm⁻²}	0,68	h
U_{rev} _{MV/TEMPOL FB 0,5 M; 12,5 mA cm⁻²}	1,27	V
durchschnittliche Leistung _{MV/TEMPOL FB 0,5 M; 25 mA cm⁻²}	0,97	W
Speicherzeit _{MV/TEMPOL FB 0,5 M; 25 mA cm⁻²}	0,27	h
U_{rev} _{MV/TEMPOL FB 0,5 M; 25 mA cm⁻²}	1,25	V
Stromdichte	12,5 / 25	mA cm ⁻²
Aktivierungsüberspannung _{MV/TEMPOL}	0,005	V
Konzentrationsüberspannung _{MV/TEMPOL}	0,02	V
Ohmsche Überspannung	0,044	V
Energie		
SoC _{min}	0,05-0,16	
SoC _{max}	0,84-0,95	
Elektrolyt MV/TEMPOL		
Posolyt		
4-OH-TEMPO		
φ^0 _{Posolyt}	0,8	V
Ohmscher Widerstand _{Posolyt}	0,0435	mΩ
Ladungszahl _{Aktive Spezies Posolyt (z)}	1	
Konzentration _{Aktive Spezies Posolyt}	0,1 / 0,3 / 0,5	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Aktive Spezies Posolyt}	172,24	g mol ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Posolyt (0,1 M)}	199,8	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Posolyt (0,3 M)}	599,4	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Posolyt (0,5 M)}	999	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Lösungsmittel Posolyt (NaCl)}	3,25	€ L ⁻¹
Konzentration _{Lösungsmittel Posolyt}	1,5	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Lösungsmittel Posolyt}	58,44	g mol ⁻¹
Herstellungszeit _{Posolyt}	20	min
Spezifische Kosten _{Posolyt (0,1 M)}	204,88	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Posolyt (0,3 M)}	608,14	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Posolyt (0,5 M)}	1011,39	€ L ⁻¹
Negolyt		
MV		
φ^0 _{Negolyt}	-0,45	V
Ohmscher Widerstand _{Negolyt}	0,0435	mΩ
Ladungszahl _{Aktive Spezies Negolyt (z)}	1	
Konzentration _{Aktive Spezies Negolyt}	0,1 / 0,3 / 0,5	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Aktive Spezies Negolyt}	257,16	g mol ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Negolyt (0,1 M)}	1339,80	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Negolyt (0,3 M)}	4019,41	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Negolyt (0,5 M)}	6699,02	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Lösungsmittel Negolyt (NaCl)}	3,25	€ L ⁻¹
Konzentration _{Lösungsmittel Negolyt}	1,5	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Lösungsmittel Negolyt}	58,44	g mol ⁻¹
Herstellungszeit _{Negolyt}	20	min
Spezifische Kosten _{Negolyt (0,1 M)}	1344,89	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Negolyt (0,3 M)}	4028,15	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Negolyt (0,5 M)}	6711,42	€ L ⁻¹

iii. AQDS/BQDS Durchflussbatterien

Die für die Modellierung wesentlichen Parameter, die ausschließlich für die AQDS/BQDS FBn verwendet wurden, sind in **Tabelle 16** aufgeführt.

Tabelle 16. Wesentliche technoökonomische Modellierungsdaten aus den Labormessungen der AQDS/BQDS Durchflussbatterien.

Komponente / Parameter	Wert	Einheit
durchschnittliche Leistung _{AQDS/BQDS FB 0,1 M}	0,18	W
Speicherzeit _{AQDS/BQDS FB 0,1 M}	0,19	h
durchschnittliche Leistung _{AQDS/BQDS FB 0,2 M}	0,07	W
Speicherzeit _{AQDS/BQDS FB 0,2 M}	0,84	h
durchschnittliche Leistung _{AQDS/BQDS FB 0,3 M}	0,11	W
Speicherzeit _{AQDS/BQDS FB 0,3 M}	0,16	h
U_{rev} _{AQDS/BQDS FB 0,1 M, 0,3 M, 0,5 M}	0,36	V
Stromdichte	12,5 / 25	mA cm ⁻²
Aktivierungsüberspannung _{AQDS/BQDS}	0,005	V
Konzentrationsüberspannung _{AQDS/BQDS}	0,02	V
Ohmsche Überspannung	0,035	V
Energie		
SoC _{min}	0,05-0,16	
SoC _{max}	0,84-0,95	
Elektrolyt AQDS/BQDS		
Posolyt		
BQDS		
φ^0 _{Posolyt}	0,91	V
Ohmscher Widerstand _{Posolyt}	0,035	mΩ
Ladungszahl _{Aktive Spezies Posolyt (z)}	2	
Konzentration _{Aktive Spezies Posolyt}	0,1 / 0,2 / 0,3	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Aktive Spezies Posolyt}	332,23	g mol ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Posolyt (0,1 M)}	23,99	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Posolyt (0,2 M)}	47,97	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Posolyt (0,3 M)}	71,96	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Lösungsmittel Posolyt (H₂SO₄)}	0,26	€ L ⁻¹
Konzentration _{Lösungsmittel Posolyt}	1	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Lösungsmittel Posolyt}	98,079	g mol ⁻¹
Herstellungszeit _{Posolyt}	20	min
Spezifische Kosten _{Posolyt (0,1 M)}	27,45	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Posolyt (0,2 M)}	54,64	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Posolyt (0,3 M)}	81,83	€ L ⁻¹
Negolyt		
AQDS		
φ^0 _{Negolyt}	0,21	V
Ohmscher Widerstand _{Negolyt}	0,035	mΩ
Ladungszahl _{Aktive Spezies Negolyt (z)}	2	
Konzentration _{Aktive Spezies Negolyt}	0,1 / 0,2 / 0,3	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Aktive Spezies Negolyt}	412,3	g mol ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Negolyt (0,1 M)}	228,83	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Negolyt (0,2 M)}	457,65	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Aktive Spezies Negolyt (0,3 M)}	686,48	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Lösungsmittel Negolyt (H₂SO₄)}	0,26	€ L ⁻¹
Konzentration _{Lösungsmittel Negolyt}	1	mol L ⁻¹
Molekulargewicht _{Lösungsmittel Negolyt}	98,079	g mol ⁻¹
Herstellungszeit _{Negolyt}	20	min
Spezifische Kosten _{Negolyt (0,1 M)}	232,29	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Negolyt (0,2 M)}	464,32	€ L ⁻¹
Spezifische Kosten _{Negolyt (0,3 M)}	696,35	€ L ⁻¹

E. Detaillierte Beschreibung der Programmteile von FLOTE

Im Folgenden werden die Programmteile der Stand-Alone-Software FLOW battery Technology Economics (FLOTE)⁶⁵ beschrieben.

i. Programmteil “MVF”

Zweck:

Die Funktion MVF ist darauf ausgelegt, die Sensitivität eines Kostenmodells im Zusammenhang mit der Batterieleistung zu analysieren und zu visualisieren.

Parameter:

- Var1: Die erste Variable (z. B. Concentration_pos).
- min1, max1, steps1: Parameter zur Generierung eines Wertearrays für Var1.
- scale1: Skalierungsoption für Var1 (entweder "Exponential" oder "Linear").
- Var2: Die zweite Variable (z. B. Current_Density).
- min2, max2, steps2: Parameter zur Generierung eines Wertearrays für Var2.
- scale2: Skalierungsoption für Var2 (entweder "Exponential" oder "Linear").

Funktionsweise:

1. Die Funktion generiert Arrays (array1 und array2) basierend auf den angegebenen Parametern.
2. Sie initialisiert eine Ausgabematrix (Output) mit Nullen.
3. Für jede Kombination von Werten aus array1 und array2 berechnet sie den Sensitivitätswert mithilfe der Funktion SVF.
4. Wenn bestimmte Bedingungen erfüllt sind (z. B. eG16 oder pH10 sind negativ), wird der Sensitivitätswert auf None gesetzt.
5. Das Sensitivitätsdiagramm wird mit sensitivity_plot.plot_sense generiert.
6. Die Ausgabematrix wird in ein Pandas DataFrame konvertiert und in einer Excel-Datei gespeichert.

Hinweise:

Die erforderlichen Bibliotheken (numpy, pandas und sensitivity_plot) müssen installiert sein.

ii. Programmteil “Arrays”

Zweck:

Das folgende Python-Programm generiert ein Array von Werten basierend auf den angegebenen Parametern. Funktion: arraygen(min, max, steps, scale).

Parameter:

- min: Der minimale Wert des Arrays.
- max: Der maximale Wert des Arrays.
- steps: Die Anzahl der Schritte zwischen min und max.
- scale: Die Skala, auf der das Array generiert werden soll (entweder 'Linear' oder 'Exponential').

Rückgabewert:

Die Funktion gibt ein Array (Pn_array) sowie die Anzahl der Schritte (steps) zurück.

Funktionsweise:

Generierung des Arrays:

1. Lineare Skala (scale == 'Linear'):

Das Array wird schrittweise von min bis max generiert. Jeder Schritt entspricht einem gleichmäßigen Intervall zwischen den Werten.

Die Formel lautet: $Pn_array[i] = min + i * (max - min) / steps$.

2. Exponentielle Skala (scale == 'Exponential'):

Das Array wird schrittweise von min bis max generiert. Die Werte werden exponentiell skaliert.

Die Formel lautet: $Pn_array[i] = \exp(\log(min) + i * (\log(max) - \log(min)) / steps)$.

Hinweise:

Es ist zu beachten, dass die Funktion arraygen die gewünschten Arrays gemäß den angegebenen Parametern generiert. Passen Sie die Werte von min, max, steps und scale an, um unterschiedliche Ergebnisse zu erzielen.

Die erforderlichen Bibliotheken (numpy, pandas und sensitivity_plot) müssen installiert sein

iii. Programmteil "datafile"

Zweck:

Die Funktion SVF berechnet die Kosten pro Energiekapazität einer Batterie basierend auf diversen Eingabeparametern wie Materialkosten, Fertigungskosten, physikalischen und chemischen Eigenschaften der Batteriekomponenten, sowie der erforderlichen Energie und Leistung.

Parameter:

- edt1, edt2: Strings, die die Art der Eingabedaten spezifizieren.
- Val1, Val2: Fließkommazahlen, die die Werte der entsprechenden Eingabedaten repräsentieren.

Rückgabewert:

Die Funktion gibt einen Fließkommawert zurück, der die Kosten pro Energiekapazität (€ Wh^{-1}) der Batterie darstellt.

Funktionsweise:

Die Funktion ist in mehrere Hauptabschnitte gegliedert:

1. Initialisierung der Eingabewerte:
Basierend auf den Eingabeparametern `edt1`, `edt2`, `Val1` und `Val2` werden vordefinierte Werte für verschiedene Batteriekomponenten und -eigenschaften festgelegt oder, falls spezifiziert, angepasste Werte verwendet
2. Berechnung der Energie- und Leistungskosten:
Energiebereich: Hier werden die spezifischen Material- und Fertigungskosten für Posolyte und Negolyte, sowie die Kosten für die Tanks und andere relevante Materialien berechnet.
Leistungsbereich: In diesem Abschnitt werden die Kosten für Komponenten wie Stromsammler, Isolierplatten, Endplatten, Verbindungen und die Montage der Zelle und des Stacks ermittelt.
3. Berechnung der Gesamtkosten und der Kosten pro Energiekapazität:
Die Gesamtkosten für die Energie- und Leistungskomponenten werden zusammengefasst, um die Gesamtkosten der Batterie zu erhalten.
Die Kosten pro Energiekapazität werden durch Division der Gesamtkosten durch die Energiekapazität der Batterie berechnet.

Globale Variablen:

Im Verlauf der Funktion werden mehrere globale Variablen wie `pG18`, `eG11`, `vB4`, `vF4`, `vJ4`, usw. verwendet, um zwischen den Berechnungsschritten Zwischenergebnisse zu speichern und weiterzuverarbeiten.

Zusammenfassung:

Die SVF-Funktion bietet einen umfassenden Ansatz zur Bewertung der Kosten pro Energiekapazität einer Durchflussbatterie, indem sie detaillierte materielle und produktionstechnische Aspekte berücksichtigt. Durch die Flexibilität in der Eingabe von Parametern erlaubt sie eine maßgeschneiderte Analyse für verschiedene Batteriezusammensetzungen und -konfigurationen.

iv. Programmteil "sensitivity_plot"

Zweck:

Die Funktion `plot_sense` erstellt ein Konturdiagramm (Heatmap) aus den übergebenen Daten `x`, `y` und `z`.

Parameter:

- `x`: Eine Liste oder ein Array von x-Werten.
- `y`: Eine Liste oder ein Array von y-Werten.
- `z`: Eine 2D-Matrix von z-Werten, die die Höhe der Konturlinien darstellen.
- `scale1` und `scale2`: Skalierungsoptionen für die y- und x-Achse (entweder "Exponential" oder "Linear").
- `scale`: Die Skala, auf der das Array generiert werden soll (entweder 'Linear' oder 'Exponential').
- `y_axis` und `x_axis`: Beschriftungen für die y- und x-Achse.
- `outputname`: Der Titel des Diagramms.

Funktionsweise:

1. Die Funktion erstellt ein 2D-Gitter aus x und y mit `np.meshgrid`.
2. Ein Konturdiagramm wird mit `ax.contourf` erstellt, wobei z als Höhenwerte verwendet wird.
3. Eine Farbskala wird mit `fig.colorbar(cp)` hinzugefügt.
4. Die Achsen werden entsprechend der Skalierungsoptionen und den Achsenbeschriftungen konfiguriert.
5. Das Diagramm wird mit `plt.show()` angezeigt.

Abkürzungsverzeichnis

4-HO-TEMPO

AQDS

BMS

bspw.

bzw.

BQDS

ca.

CAPEX

CE

CO₂

d. h.

EE

ESS

et al.

FB

FBn

FRAUNHOFER ICT

gem.

ggf.

HWDZ

IPCC

LCOS

LCA

LCC

M

MV

NPV

O FBn

OB

OCV

OP

PFA

SEI

TEMPO

TEMPOL

UNSW

V FBn

VE

vgl.

z. B.

4-Hydroxy-2,2,6,6-Tetramethylpiperidin-1-oxyl

Anthrachinon-2,7-disulfonsäure

Batteriemanagementsystem

beispielsweise

beziehungsweise

1,2-Dihydroxybenzochinon-3,5-disulfonsäure

circa

Capital Expenditures

Coulombeffizienz

Kohlendioxid

das heißt

Energieeffizienz

Energiespeichersysteme

et alii

Durchflussbatterie

Durchflussbatterien

Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie

gemäß

gegebenenfalls

Halbwertsdegradationszyklenzahl

Intergovernmental Panel on Climate Change

Levelized Cost of Storage

Life Cycle Assessment

Life Cycle Costs

molar; Synonym für mol pro Liter

Methylviologen

Net Present Value

organische Durchflussbatterien

Optimierungsbereich

Leerlaufspannung

Optimierungspotenzial

Polyfluoralkoxy-Polymere

Solid Electrolyte Interphase

2,2,6,6-Tetramethylpiperidin-1-oxyl

4-HO-TEMPO

University of New South Wales

Vanadium/Vanadium

Durchflussbatterien

Spannungseffizienz

vergleiche

zum Beispiel

Einheiten- und Symbolverzeichnis

$\emptyset$	Durchmesser
€	Euro
°C	Grad Celsius
ρ	Ladungsdichte
μm	Mikrometer
Ω	Ohm
%	Prozent
φ^0	Standardelektrodenpotenzial
\$	US-Dollar
>>	Mathematisches Zeichen für viel größer
"	Zoll
Ah	Ampèrestunde
A_{OP}	Fläche des Optimierungspotenzials
c_{ox}	molare Konzentration der oxidierenden Spezies
c_{red}	molare Konzentration der reduzierenden Spezies
cm	Zentimeter
E	volumetrische Energiedichte
$Fläche_{aktive}$	aktive Fläche
I	Stromstärke
j	Stromdichte
K	Kelvin
$Konzentration_{aktive\ Spezies}$	Konzentration der aktiven Spezies
L	Liter
m	Meter
mA	Milliampère
mol	Mol
η_C	Coulombeffizienz
η_E	Energieeffizienz
η_V	Spannungseffizienz
P	Leistung
$\bar{P}$	mittlere Leistungsdichte
PJ	Petajoule
R	universelle Gaskonstante
$R_{innerer}$	innerer Widerstand
$SFR_{Komponente}$	flächenspezifischer Widerstand einer Komponente
$SK_{Energieinhalt}$	spezifischen Energieinhaltskosten
$SK_{Kapazitätsdichte}$	spezifischen Kapazitätsdichtekosten
$SK_{Komponente}$	spezifischen Kosten einer Komponente
SoC_{Range}	prozentualen Ladungszustand
$\bar{U}$	mittlere Spannung
$U_{Zelle\ eff}$	effektive Zellspannung
V	Volt
$V_{Elektrolyt}$	Elektrolytvolumen
Wh	Wattstunde

$W_{\text{Elektrolyt}}$
 z

Leistung des Elektrolyten
Ladungszahl

Abbildungsverzeichnis

ABBILDUNG 1.	ANTEIL VON WIND- UND SOLARENERGIE AN DER GESAMTEN STROMERZEUGUNG IN AUSGEWÄHLTEN LÄNDERN (JANUAR BIS JUNI 2020). ⁴⁹	3
ABBILDUNG 2.	ENERGIEFLUSSBILD 2022 FÜR DIE BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND IN PETAJOULE (PJ). ⁵¹⁴	4
ABBILDUNG 3.	PRIMÄRENERGIEVERBRAUCH FÜR DIE BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND VON 1990 BIS 2022 IN PETAJOULE (PJ). ⁴⁷	5
ABBILDUNG 4.	STRUKTUR DER ARBEIT.	8
ABBILDUNG 5.	FUNKTIONSPRINZIP VON DURCHFLUSSBATTERIEN AM BEISPIEL EINER VANADIUM/VANADIUM DURCHFLUSSBATTERIE BEIM ENTLADEN.	14
ABBILDUNG 6.	FUNKTIONSPRINZIP VON DURCHFLUSSBATTERIEN AM BEISPIEL EINER VANADIUM/VANADIUM DURCHFLUSSBATTERIE BEIM LADEN.	15
ABBILDUNG 7.	SCHEMATISCHE DARSTELLUNG DES AUFBAUS DER STANDARDISIERTEN LABORZELLE MIT (1) ENDPLATTEN, (2) ISOLATIONSPLATTEN, (3A UND B) FITTINGE UND ROHRVERSCHLUSSKAPPEN, (4 UND 10) DICHTUNGEN, (5) STROMABNEHMER, (6) GASDIFFUSIONSSCHICHT, (7) BIPOLARPLATTE, (8) DURCHFLUSSRAHMEN, (9) ELEKTRODE UND (11) MEMBRAN.	27
ABBILDUNG 8.	HIERARCHISCHES KOMPONENTENMODELL FÜR DURCHFLUSSBATTERIEN IM LABORMAßSTAB MIT DEN BEREICHEN ENERGIE, LEISTUNG UND STEUERUNG UND VERBINDUNGEN.	30
ABBILDUNG 9.	HIERARCHISCHES KOMPONENTENMODELL FÜR DURCHFLUSSBATTERIEN IM INDUSTRIELLEN MAßSTAB MIT DEN BEREICHEN ENERGIE, LEISTUNG, STEUERUNG UND VERBINDUNGEN, INFRASTRUKTUR UND FINANZIERUNG.	31
ABBILDUNG 10.	DARSTELLUNG DES ZYKLUSABHÄNGIGEN VERHALTENS DER PROZENTUALEN DEGRADATION FÜR DEGRADATIONS-RATEN ZWISCHEN 0,5% UND 5% BEI EINER DEGRADATIONSFUNKTION DER FORM $f n = (1 - D)n$.	35
ABBILDUNG 11.	DARSTELLUNG DER BIS ZU EINER DEGRADATION VON 50% (HALBWERTDEGRADATION) ERREICHBAREN ZYKLEN IN ABHÄNGIGKEIT EINER RELATIVEN DEGRADATIONS-RATE ZWISCHEN 0,01% UND 10%.	36
ABBILDUNG 12.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG VON LEISTUNGS- UND ENERGIEDICHTEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN V FBN (1,67 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	47
ABBILDUNG 13.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER SPANNUNGSEFFIZIENZEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN V FBN (1,67 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	47
ABBILDUNG 14.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER COULOMBEFFIZIENZEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN V FBN (1,67 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	48
ABBILDUNG 15.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER ENERGIEEFFIZIENZ DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN V FBN (1,67 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	48
ABBILDUNG 16.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG VON LEISTUNGS- UND ENERGIEDICHTEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN MV/TEMPOL FBN (0,1 M UND 0,5 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	52
ABBILDUNG 17.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER SPANNUNGSEFFIZIENZEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN MV/TEMPOL FBN (0,1 M UND 0,5 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	52
ABBILDUNG 18.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER COULOMBEFFIZIENZEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN MV/TEMPOL FBN (0,1 M UND 0,5 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	53
ABBILDUNG 19.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER ENERGIEEFFIZIENZEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN MV/TEMPOL FBN (0,1 M UND 0,5 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	53
ABBILDUNG 20.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG VON LEISTUNGS- UND ENERGIEDICHTEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN AQDS/BQDS FBN (0,1 M, 0,2 M UND 0,3 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	57
ABBILDUNG 21.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER SPANNUNGSEFFIZIENZEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN AQDS/BQDS FBN (0,1 M, 0,2 M UND 0,3 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	57
ABBILDUNG 22.	MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER COULOMBEFFIZIENZEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN AQDS/BQDS FBN (0,1 M, 0,2 M UND 0,3 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	58

ABBILDUNG 23. MITTELWERT UND STANDARDABWEICHUNG DER ENERGIEEFFIZIENZEN DER GETESTETEN STANDARDISIERTEN AQDS/BQDS FBN (0,1 M, 0,2 M UND 0,3 M) BASIEREND AUF DEN ENTLADEZYKLEN.	58
ABBILDUNG 24. KOSTENVERTEILUNG DER LEISTUNGSBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN DURCHFLUSSBATTERIEN GEMÄß DEM STANDARDISIERTEN AUFBAU (VGL. ANHÄNGE A UND B).	63
ABBILDUNG 25. KOSTENVERTEILUNG DER ENERGIEBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN V DURCHFLUSSBATTERIEN MIT EINER KONZENTRATION VON 1,67 MOL L ⁻¹ GEM. DEN TECHNOÖKONOMISCHEN MODELLIERUNGSDATEN (VGL. ANHANG D.I).	64
ABBILDUNG 26. KOSTENVERTEILUNG DER ENERGIEBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN V DURCHFLUSSBATTERIEN MIT EINER KONZENTRATION VON 0,3 MOL L ⁻¹ GEM. DEN TECHNOÖKONOMISCHEN MODELLIERUNGSDATEN (VGL. ANHANG D.I).	65
ABBILDUNG 27. KOSTENVERTEILUNG DER ENERGIEBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN MV/TEMPOL DURCHFLUSSBATTERIEN MIT EINER KONZENTRATION VON 0,5 MOL L ⁻¹ GEM. DEN TECHNOÖKONOMISCHEN MODELLIERUNGSDATEN (VGL. ANHANG D.II).	66
ABBILDUNG 28. KOSTENVERTEILUNG DER ENERGIEBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN MV/TEMPOL DURCHFLUSSBATTERIEN MIT EINER KONZENTRATION VON 0,3 MOL L ⁻¹ GEM. DEN TECHNOÖKONOMISCHEN MODELLIERUNGSDATEN (VGL. ANHANG D.II).	67
ABBILDUNG 29. KOSTENVERTEILUNG DER ENERGIEBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN MV/TEMPOL DURCHFLUSSBATTERIEN MIT EINER KONZENTRATION VON 0,1 MOL L ⁻¹ GEM. DEN TECHNOÖKONOMISCHEN MODELLIERUNGSDATEN (VGL. ANHANG D.II).	68
ABBILDUNG 30. KOSTENVERTEILUNG DER ENERGIEBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN AQDS/BQDS DURCHFLUSSBATTERIEN MIT EINER KONZENTRATION VON 0,3 MOL L ⁻¹ GEM. DEN TECHNOÖKONOMISCHEN MODELLIERUNGSDATEN (VGL. ANHANG D.III).	69
ABBILDUNG 31. KOSTENVERTEILUNG DER ENERGIEBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN AQDS/BQDS DURCHFLUSSBATTERIEN MIT EINER KONZENTRATION VON 0,2 MOL L ⁻¹ GEM. DEN TECHNOÖKONOMISCHEN MODELLIERUNGSDATEN (VGL. ANHANG D.III).	70
ABBILDUNG 32. KOSTENVERTEILUNG DER ENERGIEBEZOGENEN HERSTELLUNGSKOSTEN DER UNTERSUCHTEN AQDS/BQDS DURCHFLUSSBATTERIEN MIT EINER KONZENTRATION VON 0,1 MOL L ⁻¹ GEM. DEN TECHNOÖKONOMISCHEN MODELLIERUNGSDATEN (VGL. ANHANG D.III).	71
ABBILDUNG 33. GEMESSENE DEGRADATION DER KAPAZITÄTSDICHTE EINER V FB MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES VON 1,67 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 50 MA CM ⁻² , EINSCHLIEßLICH DER EXPONENTIELLEN FITFUNKTION DER FORM $C^*(1-D)^x$	72
ABBILDUNG 34. GEMESSENE DEGRADATION DER KAPAZITÄTSDICHTE EINER V FB MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES VON 1,67 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 37,5 MA CM ⁻² , EINSCHLIEßLICH DER EXPONENTIELLEN FITFUNKTION DER FORM $C^*(1-D)^x$	74
ABBILDUNG 35. GEMESSENE DEGRADATION DER KAPAZITÄTSDICHTE EINER V FB MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 50 MA CM ⁻² , EINSCHLIEßLICH DER EXPONENTIELLEN FITFUNKTION DER FORM $C^*(1-D)^x$	75
ABBILDUNG 36. GEMESSENE DEGRADATION DER KAPAZITÄTSDICHTE EINER MV/TEMPOL FB MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES VON 0,5 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 25 MA CM ⁻² , EINSCHLIEßLICH DER EXPONENTIELLEN FITFUNKTION DER FORM $C^*(1-D)^x$	77
ABBILDUNG 37. GEMESSENE DEGRADATION DER KAPAZITÄTSDICHTE EINER MV/TEMPOL FB MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 12,5 MA CM ⁻² , EINSCHLIEßLICH DER EXPONENTIELLEN FITFUNKTION DER FORM $C^*(1-D)^x$	78
ABBILDUNG 38. GEMESSENE DEGRADATION DER KAPAZITÄTSDICHTE EINER MV/TEMPOL FB MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES VON 0,1 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 12,5 MA CM ⁻² , EINSCHLIEßLICH DER EXPONENTIELLEN FITFUNKTION DER FORM $C^*(1-D)^x$	80
ABBILDUNG 39. GEMESSENE DEGRADATION DER KAPAZITÄTSDICHTE EINER AQDS/BQDS FB MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 10 MA CM ⁻² , EINSCHLIEßLICH DER EXPONENTIELLEN FITFUNKTION DER FORM $C^*(1-D)^x$	81
ABBILDUNG 40. GEMESSENE DEGRADATION DER KAPAZITÄTSDICHTE EINER AQDS/BQDS FB MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 5 MA CM ⁻² , EINSCHLIEßLICH DER EXPONENTIELLEN FITFUNKTION DER FORM $C^*(1-D)^x$	83

ABBILDUNG 41.	DARSTELLUNG DER ZYKLENABHÄNGIGEN KOSTENFUNKTION AUFGRUND DER DEGRADATION DER ELEKTROLYTEN (<i>CAPEXElektrolyt</i>) FÜR V FBN MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 50 MA CM ⁻² , EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 1,67 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 37,5 MA CM ⁻² UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 1,67 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 50 MA CM ⁻² ...	86
ABBILDUNG 42.	DARSTELLUNG DER ZYKLENABHÄNGIGEN NUTZUNGSFUNKTION AUFGRUND DER DEGRADATION DER ELEKTROLYTEN UND DER AUSWIRKUNG AUF DIE SPEZIFISCHEN KOSTEN DER KAPAZITÄTSDICHTE (<i>SKKapazitätsdichte</i>) FÜR V FBN MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 50 MA CM ⁻² , EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 1,67 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 37,5 MA CM ⁻² UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 1,67 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 50 MA CM ⁻² .	87
ABBILDUNG 43.	DARSTELLUNG DER ZYKLENABHÄNGIGEN KOSTENFUNKTION AUFGRUND DER DEGRADATION DER ELEKTROLYTEN (<i>CAPEXElektrolyt</i>) FÜR MV/TEMPOL FBN MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) VON 0,1 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 12,5 MA CM ⁻² , EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 12,5 MA CM ⁻² UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,5 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 25 MA CM ⁻² .	89
ABBILDUNG 44.	DARSTELLUNG DER ZYKLENABHÄNGIGEN NUTZUNGSFUNKTION AUFGRUND DER DEGRADATION DER ELEKTROLYTEN UND DER AUSWIRKUNG AUF DIE SPEZIFISCHEN KOSTEN DER KAPAZITÄTSDICHTE (<i>SKKapazitätsdichte</i>) FÜR MV/TEMPOL FBN MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) VON 0,1 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 12,5 MA CM ⁻² , EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 12,5 MA CM ⁻² UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,5 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 25 MA CM ⁻² .	90
ABBILDUNG 45.	DARSTELLUNG DER ZYKLENABHÄNGIGEN KOSTENFUNKTION AUFGRUND DER DEGRADATION DER ELEKTROLYTEN (<i>CAPEXElektrolyt</i>) FÜR AQDS/BQDS FBN MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 5 MA CM ⁻² UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 10 MA CM ⁻² .	92
ABBILDUNG 46.	DARSTELLUNG DER ZYKLENABHÄNGIGEN NUTZUNGSFUNKTION AUFGRUND DER DEGRADATION DER ELEKTROLYTEN UND DER AUSWIRKUNG AUF DIE SPEZIFISCHEN KOSTEN DER KAPAZITÄTSDICHTE (<i>SKKapazitätsdichte</i>) FÜR AQDS/BQDS FBN MIT EINER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 5 MA CM ⁻² UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,3 MOL L ⁻¹ UND EINER STROMDICHTHE VON 10 MA CM ⁻² .	93
ABBILDUNG 47.	DARSTELLUNG DER ZYKLENABHÄNGIGEN NUTZUNGSFUNKTION AUFGRUND DER DEGRADATION DER ELEKTROLYTEN UND DER AUSWIRKUNG AUF DIE SPEZIFISCHEN KOSTEN DER KAPAZITÄTSDICHTE (<i>SKKapazitätsdichte</i>) FÜR ALLE UNTERSUCHTEN FBN DER UNTERSCHIEDLICHEN TYPEN V FBN, MV/TEMPOL FBN UND AQDS/BQDS FBN MIT UNTERSCHIEDLICHEN KONZENTRATIONEN DER AKTIVEN SPEZIES UND UNTERSCHIEDLICHEN GENUTZTEN STROMDICHTEN.	94
ABBILDUNG 48.	EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTHE AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² STROMDICHTHE UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 1,67 MOL L ⁻¹ BEI EINER LABOR V FB MIT 1,32 W LEISTUNG UND 13,2 WH ENERGIEINHALT.	102
ABBILDUNG 49.	EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTHE AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² STROMDICHTHE UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,5 MOL L ⁻¹ BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,98 W LEISTUNG UND 9,8 WH ENERGIEINHALT.	103
ABBILDUNG 50.	EINFLUSS DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>U_{Zelle eff}</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTHE AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² STROMDICHTHE	

UND EINER <i>UZelle eff</i> VON 1,32 V BEI EINER LABOR V FB MIT EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 1,67 MOL L ⁻¹ , 1,32 W LEISTUNG UND 13,2 WH ENERGIEINHALT.	104
ABBILDUNG 51. EINFLUSS DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>UZelle eff</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINER <i>UZelle eff</i> VON 0,98 V BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,5 MOL L ⁻¹ , 0,98 W LEISTUNG UND 9,8 WH ENERGIEINHALT.	105
ABBILDUNG 52. EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER AKTIVEN SPEZIES (<i>SKaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>UZelle eff</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² STROMDICHTEN, EINER <i>UZelle eff</i> VON 1,32 V UND <i>SKaktive Spezies</i> VON 50 € KG ⁻¹ BEI EINER LABOR V FB MIT EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 1,67 MOL L ⁻¹ , 1,32 W LEISTUNG UND 13,2 WH ENERGIEINHALT.	106
ABBILDUNG 53. EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER AKTIVEN SPEZIES (<i>SKaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>UZelle eff</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² STROMDICHTEN, EINER <i>UZelle eff</i> VON 0,98 V UND MITTLEREN <i>SKaktive Spezies</i> VON 35855 € KG ⁻¹ BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,5 MOL L ⁻¹ , 0,98 W LEISTUNG UND 9,8 WH ENERGIEINHALT.	107
ABBILDUNG 54. EINFLUSS DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>Rinnerer</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINEM <i>Rinnerer</i> VON 0,055 Ω BEI EINER LABOR V FB MIT 1,67 MOL L ⁻¹ , 1,32 W LEISTUNG UND 13,2 WH ENERGIEINHALT.	108
ABBILDUNG 55. EINFLUSS DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>Rinnerer</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINEM INNEREN WIDERSTAND VON 0,33 Ω BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,5 MOL L ⁻¹ , 0,98 W LEISTUNG UND 9,8 WH ENERGIEINHALT.	109
ABBILDUNG 56. EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER MEMBRAN (<i>SKMembran</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES FLÄCHENSPEZIFISCHEN WIDERSTANDS (<i>SFRMembran</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² , <i>SKMembran</i> VON 2500 € M ⁻² UND <i>SFR</i> VON 720 MΩ CM ² BEI EINER LABOR V FB MIT 1,67 MOL L ⁻¹ , 1,32 W LEISTUNG UND 13,2 WH ENERGIEINHALT UND EINER GENUTZTEN MEMBRAN FUMASEP FAP-450.	111
ABBILDUNG 57. EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER MEMBRAN (<i>SKMembran</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES FLÄCHENSPEZIFISCHEN WIDERSTANDS (<i>SFRMembran</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² , SPEZIFISCHEN KOSTEN DER MEMBRAN VON 2500 € M ⁻² UND <i>SFR</i> VON 720 MΩ CM ² BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,98 W LEISTUNG UND 9,8 WH ENERGIEINHALT UND EINER GENUTZTEN MEMBRAN FUMASEP FAP-450.	112
ABBILDUNG 58. EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER BIPOLARPLATTE (<i>SKBPP</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES FLÄCHENSPEZIFISCHEN WIDERSTANDS (<i>SFRBPP</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² , <i>SKBPP</i> VON 418 € M ⁻² UND <i>SFRBPP</i> VON 1,35 MΩ CM ² BEI EINER LABOR V FB MIT 1,67 M, 1,32 W LEISTUNG UND 13,2 WH ENERGIEINHALT UND EINER GENUTZTEN BIPOLARPLATTE SIGRADUR G.	113
ABBILDUNG 59. EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER BIPOLARPLATTE (<i>SKBPP</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES FLÄCHENSPEZIFISCHEN WIDERSTANDS (<i>SFRBPP</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SKEnergieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 MA CM ⁻² , <i>SKBPP</i> VON 418 € M ⁻² UND <i>SFRBPP</i> VON 1,35 MΩ CM ² BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,98 W LEISTUNG UND 9,8 WH ENERGIEINHALT UND EINER GENUTZTEN BIPOLARPLATTE SIGRADUR G.	114

- ABBILDUNG 60.** EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER ELEKTRODE (*SKElektrode*) IN ABHÄNGIGKEIT DES FLÄCHENSPEZIFISCHEN WIDERSTANDS (*SFRElektrode*) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 mA cm⁻², *SKElektrode* VON 150 € m⁻² UND *SFRElektrode* VON 720 mΩ cm² BEI EINER LABOR V FB MIT 1,67 M, 1,32 W LEISTUNG UND 13,2 WH ENERGIEINHALT UND EINER GENUTZTEN ELEKTRODE SGL CARBON: SIGRACELL GFA 6 EA. 115
- ABBILDUNG 61.** EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER ELEKTRODE (*SKElektrode*) IN ABHÄNGIGKEIT DES FLÄCHENSPEZIFISCHEN WIDERSTANDS (*SFRElektrode*) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 mA cm⁻², *SKElektrode* VON 150 € m⁻² UND *SFRElektrode* VON 720 mΩ cm² BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,98 W LEISTUNG UND 9,8 WH ENERGIEINHALT UND EINER GENUTZTEN ELEKTRODE SGL CARBON: SIGRACELL GFA 6 EA. ... 116
- ABBILDUNG 62.** EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DES GASDIFFUSIONSSCHICHT (*SKGasdiffusionsschicht*) IN ABHÄNGIGKEIT DES FLÄCHENSPEZIFISCHEN WIDERSTANDS (*SFRGasdiffusionsschicht*) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 mA cm⁻², *SKGasdiffusionsschicht* VON 1500 € m⁻² UND *SFRGasdiffusionsschicht* VON 5,4 mΩ cm² BEI EINER LABOR V FB MIT 1,67 M, 1,32 W LEISTUNG UND 13,2 WH ENERGIEINHALT UND DER GENUTZTEN GASDIFFUSIONSSCHICHT QUINTECH GDS090S. 117
- ABBILDUNG 63.** EINFLUSS DER SPEZIFISCHEN KOSTEN DER GASDIFFUSIONSSCHICHT (*SKGasdiffusionsschicht*) IN ABHÄNGIGKEIT DES FLÄCHENSPEZIFISCHEN WIDERSTANDS (*SFRGasdiffusionsschicht*) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 25 mA cm⁻², *SKGasdiffusionsschicht* VON 1500 € m⁻² UND *SFRGasdiffusionsschicht* VON 5,4 mΩ cm² BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,98 W LEISTUNG UND 9,8 WH ENERGIEINHALT UND DER GENUTZTEN GASDIFFUSIONSSCHICHT QUINTECH GDS090S. 118
- ABBILDUNG 64.** EINFLUSS DER AKTIVEN FLÄCHE (*Flächeaktive*) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm⁻² STROMDICHTEN UND 0,004 m² *Flächeaktive* BEI EINER LABOR V FB MIT 1,67 M, 0,68 W LEISTUNG UND 6,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH. 121
- ABBILDUNG 65.** EINFLUSS DER AKTIVEN FLÄCHE (*Flächeaktive*) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm⁻² STROMDICHTEN UND 0,004 m² *Flächeaktive* BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,5 M, 0,55 W LEISTUNG UND 5,53 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH. 122
- ABBILDUNG 66.** EINFLUSS DER AKTIVEN FLÄCHE (*Flächeaktive*) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm⁻² STROMDICHTEN UND 0,004 m² *Flächeaktive* BEI EINER LABOR AQDS/BQDS FB MIT 0,1 M, 0,18 W LEISTUNG UND 1,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH. 124
- ABBILDUNG 67.** EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (*Konzentrationaktive Spezies*) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm⁻² STROMDICHTEN UND EINER *Konzentrationaktive Spezies* VON 1,67 M BEI EINER LABOR V FB MIT 0,68 W LEISTUNG UND 6,8 WH ENERGIEINHALT. 126
- ABBILDUNG 68.** EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (*Konzentrationaktive Spezies*) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (*SKEnergieinhalt*) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm⁻² STROMDICHTEN UND EINER *Konzentrationaktive Spezies* VON 0,5 M BEI EINER LABOR

MV/TEMPOL FB MIT 0,5 M MIT 0,55 W LEISTUNG UND 5,53 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	127
ABBILDUNG 69. EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,1 M BEI EINER LABOR AQDS/BQDS FB MIT 0,1 M MIT 0,18 W LEISTUNG UND 1,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	129
ABBILDUNG 70. EINFLUSS DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>U_{Zelle eff}</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINER <i>U_{Zelle eff}</i> VON 1,36 V BEI EINER LABOR V FB MIT 1,67 M, 0,68 W LEISTUNG UND 6,8 WH ENERGIEINHALT.	130
ABBILDUNG 71. EINFLUSS DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>U_{Zelle eff}</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINER <i>U_{Zelle eff}</i> VON 1,27 V BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,5 M, 0,55 W LEISTUNG UND 5,53 WH ENERGIEINHALT.	131
ABBILDUNG 72. EINFLUSS DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>U_{Zelle eff}</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINER <i>U_{Zelle eff}</i> VON 0,49 V BEI EINER LABOR AQDS/BQDS FB MIT 0,1 M, 0,18 W LEISTUNG UND 1,8 WH ENERGIEINHALT.	132
ABBILDUNG 73. EINFLUSS DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>R_{innerer}</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINEM <i>R_{innerer}</i> VON 0,024 Ω BEI EINER LABOR V FB MIT 1,67 M, 0,68 W LEISTUNG UND 6,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	134
ABBILDUNG 74. EINFLUSS DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>R_{innerer}</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINEM <i>R_{innerer}</i> VON 0,087 Ω BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,5 M, 0,55 W LEISTUNG UND 5,53 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	135
ABBILDUNG 75. EINFLUSS DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>R_{innerer}</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER STROMDICHTEN AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN UND EINEM <i>R_{innerer}</i> VON 0,07 Ω BEI EINER LABOR AQDS/BQDS FB MIT 0,1 M, 0,18 W LEISTUNG UND 1,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	137
ABBILDUNG 76. EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>U_{Zelle eff}</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN, 1,36 V <i>U_{Zelle eff}</i> UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 1,67 M BEI EINER LABOR V FB MIT 0,68 W LEISTUNG UND 6,8 WH ENERGIEINHALT.	138
ABBILDUNG 77. EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>U_{Zelle eff}</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_Energieinhalt</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBSZUSTANDS VON 12,5 MA CM ⁻² STROMDICHTEN, 1,27 V <i>U_{Zelle eff}</i> UND EINER <i>Konzentrationsaktive Spezies</i> VON 0,5 M BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,55 W LEISTUNG UND 5,53 WH ENERGIEINHALT.	139
ABBILDUNG 78. EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationsaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DER EFFEKTIVEN ZELLSPANNUNG (<i>U_{Zelle eff}</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN	

ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_{Energieinhalt}</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm ⁻² STROMDICHT, 0,49 V <i>U_{Zelle eff}</i> UND EINER <i>Konzentrationaktive Spezies</i> VON 0,1 M BEI EINER LABOR AQDS/BQDS FB MIT 0,18 W LEISTUNG UND 1,8 WH ENERGIEINHALT.	140
ABBILDUNG 79. EINFLUSS DER AKTIVEN FLÄCHE (<i>Flächeaktive</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>Rinnerer</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_{Energieinhalt}</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm ⁻² STROMDICHT, 0,024 Ω <i>Rinnerer</i> UND EINER <i>Flächeaktive</i> VON 0,004 m ² BEI EINER LABOR V FB MIT 0,68 W LEISTUNG UND 6,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	142
ABBILDUNG 80. EINFLUSS DER AKTIVEN FLÄCHE (<i>Flächeaktive</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>Rinnerer</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_{Energieinhalt}</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm ⁻² STROMDICHT, 0,087 Ω <i>Rinnerer</i> UND EINER <i>Flächeaktive</i> VON 0,004 m ² BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,55 W LEISTUNG UND 5,53 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	144
ABBILDUNG 81. EINFLUSS DER AKTIVEN FLÄCHE (<i>Flächeaktive</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>Rinnerer</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_{Energieinhalt}</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm ⁻² STROMDICHT, 0,07 Ω <i>Rinnerer</i> UND EINER <i>Flächeaktive</i> VON 0,004 m ² BEI EINER LABOR AQDS/BQDS FB MIT 0,18 W LEISTUNG UND 1,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	146
ABBILDUNG 82. EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>Rinnerer</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_{Energieinhalt}</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm ⁻² STROMDICHT, 0,024 Ω <i>Rinnerer</i> UND EINER <i>Konzentrationaktive Spezies</i> VON 1,67 M BEI EINER LABOR V FB MIT 0,68 W LEISTUNG UND 6,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	148
ABBILDUNG 83. EINFLUSS DER KONZENTRATION DER AKTIVEN SPEZIES (<i>Konzentrationaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>Rinnerer</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_{Energieinhalt}</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm ⁻² STROMDICHT, 0,087 Ω <i>Rinnerer</i> UND EINER <i>Konzentrationaktive Spezies</i> VON 0,5 M BEI EINER LABOR MV/TEMPOL FB MIT 0,55 W LEISTUNG UND 5,53 WH ENERGIEINHALT.	149
ABBILDUNG 84. EINFLUSS DER KONZENTRATION (<i>Konzentrationaktive Spezies</i>) IN ABHÄNGIGKEIT DES INNEREN WIDERSTANDS (<i>Rinnerer</i>) AUF DIE SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN (<i>SK_{Energieinhalt}</i>) INKLUSIVE DES OPTIMIERUNGSPOTENZIALS AUF GRUNDLAGE EINES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm ⁻² STROMDICHT, 0,07 Ω <i>Rinnerer</i> UND EINER <i>Konzentrationaktive Spezies</i> VON 0,1 M BEI EINER LABOR AQDS/BQDS FB MIT 0,18 W LEISTUNG UND 1,8 WH ENERGIEINHALT INNERHALB DER A) UNTERSUCHTEN GRENZEN UND B) IN EINEM VERGRÖßERTEN BEREICH.	150
ABBILDUNG 85. OPTIMIERUNGSPOTENZIALE DER DURCHGEFÜHRTEN SENSITIVITÄTSANALYSEN BEZÜGLICH DER SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN VON FBN IM LABORMAßSTAB MIT ELEKTROLYTENPAAREN VON 1,67 M VANADIUM/VANADIUM UND SOLCHEN MIT 0,5 M MV/TEMPOL AUF GRUNDLAGE DES BETRIEBZUSTANDS VON 25 mA cm ⁻²	153
ABBILDUNG 86. OPTIMIERUNGSPOTENZIALE DER DURCHGEFÜHRTEN SENSITIVITÄTSANALYSEN BEZÜGLICH DER SPEZIFISCHEN ENERGIEINHALTSKOSTEN VON DURCHFLUSSBATTERIEN IM LABORMAßSTAB MIT ELEKTROLYTENPAAREN VON 1,67 M VANADIUM/VANADIUM, 0,5 M MV/TEMPOL UND SOLCHEN MIT 0,1 M AQDS/BQDS AUF GRUNDLAGE DES BETRIEBZUSTANDS VON 12,5 mA cm ⁻²	157
ABBILDUNG 87. ÜBERSICHT DER FÜR DEN ZELLAUFBAU BENÖTIGTEN BAUTEILE.	172
ABBILDUNG 88. VORDERANSICHT DER ENDPLATTE AUS ALUMINIUM.	173
ABBILDUNG 89. VORDER- UND RÜCKANSICHT EINER ISOLATIONSPLATTE AUS TEFLON.	173

ABBILDUNG 90.	GERADE EINSCHRAUBVERSCHRAUBUNG MIT NPT 1/8"-AUßENGEWINDE UND D1/8"-ANSCHLUSS (LINKS) UND PFA-ROHRVERSCHLUSSKAPPE MIT 1/8"-DURCHMESSER (RECHTS)...	174
ABBILDUNG 91.	VERSCHIEDENE ICE CUBE DICHUNGEN IN DER JEWELIGEN FORM ZUM ABDICHTEN DES ELEKTROLYTEINTRITTS UND -AUSTRITTS (LINKS), DES STROMABNEHMERS (MITTE) UND DER REAKTIONSRÄUME (RECHTS).....	175
ABBILDUNG 92.	KUPFERBAND FÜR DEN ELEKTRISCHEN KONTAKT ZWISCHEN ZELLE UND MESSGERÄT.....	175
ABBILDUNG 93.	GASDIFFUSIONSSCHICHT AUS KOHLEPAPIER GDS090S DER FIRMA QUINTECH.....	176
ABBILDUNG 94.	BIPOLARPLATTE AUS GLASKOHLNSTOFFWERKSTOFF SIGRADUR G DER FIRMA HTW HOCHTEMPERATUR-WERKSTOFFE GMBH.	176
ABBILDUNG 95.	VORDERANSICHT DES TEFLONRAHMENS MIT REAKTIONSRaum (LINKS) UND RÜCKANSICHT DES TEFLONRAHMENS MIT AUSSPARUNGEN FÜR DIE BIPOLARPLATTES (RECHTS).	177
ABBILDUNG 96.	AUFGEBAUTE STANDARDLABORZELLE IN DRAUFSICHT (LINKS) UND QUERANSICHT (RECHTS).	178
ABBILDUNG 97.	100 mL GEWINDEFASCHHE (LINKS) UND FLASCHEN-MEHRFACHVERTEILER MIT VIER ANSCHLÜSSEN (RECHTS).....	178
ABBILDUNG 98.	MEMBRANPUMPE MIT ZWEI PUMPENKÖPFEN (OBEN LINKS), SCHRITTMOTOR-STEUERUNG (OBEN RECHTS), KOMPLETTER AUFBAU DES PUMPENSYSTEMS MIT SCHLÄUCHEN UND KABELN (UNTEN LINKS) UND LABORNETZGERÄT (UNTEN RECHTS).....	180
ABBILDUNG 99.	KOMPLETTER AUFBAU DES STANDARDISIERTEN TESTSTANDS FÜR DIE STANDARDISIERTEN LABOR-DURCHFLUSSBATTERIEN.	181

Liste der Publikationen

Artikel

- 1 **Techno-Economic Optimization of Flow Batteries Using the Optimization Potential to Prioritize Different Optimization Possibilities**
D. Gerlach, J. Noack, K. Bischof, C. Le Boulch and S. Trupp
Journal of The Electrochemical Society
DOI 10.1149/1945-7111/acdda0

Konferenzbeiträge

- 1 **Techno-economical Modeling and Simulations for Redox Flow Batteries**
J. Noack, L. Wietschel, D. Gerlach, N. Roznyatovskaya, C. Menictas, M. Skyllas-Kazacos and K. Pinkwart
Konferenzbeitrag, The Electrochemical Society, 241st Meeting, Vancouver, Canada, 2022
Bibcode: 2021ECSMA2021..158N
- 2 **Techno-Economic Comparison of Different Organic Flow Batteries Based on Experimental Data Versus a Vanadium Flow**
D. Gerlach, S. Trupp, J. Noack, C. Le Boulch, K. Pinkwart, K. Bischof, N. Roznyatovskaya and M. Skyllas-Kazacos
Konferenzbeitrag, The Electrochemical Society, 241st Meeting, Vancouver, Canada, 2022
DOI 10.1149/MA2022-013470mtgabs
- 3 **(Invited) Modelling and Simulation for the Search for New Active Materials for Redox Flow Batteries - Results of the International Project Sonar**
J. Noack, E. Baudrin, R. Fornari, A. A. Franco, D. Gerlach, X. Guan, J. Hamaekers, A. Maaß, C. Menictas, G. Mourouga, H. Nirschl, N. Roznyatovskaya, R. Schaerer, J. Schumacher, P. de Silva, M. Skyllas-Kazacos, J. Wlodarczyk, A. Wolf and J. Yu
Konferenzbeitrag, The Electrochemical Society, 241st Meeting, Vancouver, Canada, 2022
DOI 10.1149/MA2022-01461954mtgabs

- 4 **Techno-economic Comparison of different Organic Flow Batteries based on experimental Data versus a Vanadium Flow Battery**
D. Gerlach, K. Bischof, C. Le Boulch, J. Noack, N. Roznyatovskaya, M. Skyllas-Kazacos and K. Pinkwart
Konferenzbeitrag, International Flow Battery Forum 2023, Prague, Czech Republic, 2023
<https://flowbatteryforum.com/wp-content/uploads/2023/07/Wednesday-11.15-2338-Daniel-Gerlach-Slides-FINAL.pdf>
- 5 **Techno-Economic Optimization of Flow Batteries Using the Optimization Potential to Prioritize Different Optimization Possibilities for the Development of Industrial Scale Applications**
D. Gerlach, J. Noack, R. Siva Dev, G. Davaasuren, N. Roznyatovskaya, S. Trupp, and K. Pinkwart
Konferenzbeitrag, The Electrochemical Society, 244th Meeting, Gothenburg, Sweden, 2023
DOI 10.1149/MA2023-021136mtgabs

Laboreergebnisse

- 1 **Cycle data of different laboratory flow batteries based on AQDS/BQDS, MV/TEMPOL and vanadium flow battery**
D. Gerlach, R. Siva Dev, G. Davaasuren, K. Bischof, C. Le Boulch, and J. Noack
Labordatensatz, European Union Horizon 2020, 2024
DOI 10.5281/ZENODO.10926883

Software

- 1 **Technoökonomisches Modell als Stand-Alone-Software FLOW battery Techno-Economics (FLOTE) auf Pythonbasis**
D. Gerlach, R. Siva Dev, 2024
<https://github.com/FHG-ICT-RFB/FLOTE>

Literaturverzeichnis

- (1) Ipcc. Global Warming of 1.5°C: IPCC Special Report on Impacts of Global Warming of 1.5°C above Pre-Industrial Levels in Context of Strengthening Response to Climate Change, Sustainable Development, and Efforts to Eradicate Poverty, 1st ed.; Cambridge University Press, 2022. <https://doi.org/10.1017/9781009157940>.
- (2) Calvin, K.; Dasgupta, D.; Krinner, G.; Mukherji, A.; Thorne, P. W.; Trisos, C.; Romero, J.; Aldunce, P.; Barrett, K.; Blanco, G.; Cheung, W. W. L.; Connors, S.; Denton, F.; Diongue-Niang, A.; Dodman, D.; Garschagen, M.; Geden, O.; Hayward, B.; Jones, C.; Jotzo, F.; Krug, T.; Lasco, R.; Lee, Y.-Y.; Masson-Delmotte, V.; Meinshausen, M.; Mintenbeck, K.; Mokssit, A.; Otto, F. E. L.; Pathak, M.; Pirani, A.; Poloczanska, E.; Pörtner, H.-O.; Revi, A.; Roberts, D. C.; Roy, J.; Ruane, A. C.; Skea, J.; Shukla, P. R.; Slade, R.; Slangen, A.; Sokona, Y.; Sörensson, A. A.; Tignor, M.; Van Vuuren, D.; Wei, Y.-M.; Winkler, H.; Zhai, P.; Zommers, Z.; Hourcade, J.-C.; Johnson, F. X.; Pachauri, S.; Simpson, N. P.; Singh, C.; Thomas, A.; Totin, E.; Arias, P.; Bustamante, M.; Elgizouli, I.; Flato, G.; Howden, M.; Méndez-Vallejo, C.; Pereira, J. J.; Pichs-Madruga, R.; Rose, S. K.; Saheb, Y.; Sánchez Rodríguez, R.; Ürge-Vorsatz, D.; Xiao, C.; Yassaa, N.; Alegría, A.; Armour, K.; Bednar-Friedl, B.; Blok, K.; Cissé, G.; Dentener, F.; Eriksen, S.; Fischer, E.; Garner, G.; Guivarch, C.; Haasnoot, M.; Hansen, G.; Hauser, M.; Hawkins, E.; Hermans, T.; Kopp, R.; Leprince-Ringuet, N.; Lewis, J.; Ley, D.; Ludden, C.; Niamir, L.; Nicholls, Z.; Some, S.; Szopa, S.; Trewin, B.; Van Der Wijst, K.-I.; Winter, G.; Witting, M.; Birt, A.; Ha, M.; Romero, J.; Kim, J.; Haites, E. F.; Jung, Y.; Stavins, R.; Birt, A.; Ha, M.; Orendain, D. J. A.; Ignon, L.; Park, S.; Park, Y.; Reisinger, A.; Cammaramo, D.; Fischlin, A.; Fuglestvedt, J. S.; Hansen, G.; Ludden, C.; Masson-Delmotte, V.; Matthews, J. B. R.; Mintenbeck, K.; Pirani, A.; Poloczanska, E.; Leprince-Ringuet, N.; Péan, C. IPCC, 2023: Climate Change 2023: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Core Writing Team, H. Lee and J. Romero (Eds.)]. IPCC, Geneva, Switzerland., First.; Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), 2023. <https://doi.org/10.59327/IPCC/AR6-9789291691647>.
- (3) Intergovernmental Panel On Climate Change (Ipcc). Climate Change 2022 – Impacts, Adaptation and Vulnerability: Working Group II Contribution to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, 1st ed.; Cambridge University Press, 2023. <https://doi.org/10.1017/9781009325844>.
- (4) Intergovernmental Panel On Climate Change (Ipcc). Climate Change 2021 – The Physical Science Basis: Working Group I Contribution to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, 1st ed.; Cambridge University Press, 2023. <https://doi.org/10.1017/9781009157896>.
- (5) Global Renewables Outlook: Energy Transformation 2050; Internationale Agentur für Erneuerbare Energien, Ed.; International Renewable Energy Agency: Abu Dhabi, 2020.
- (6) Schmalensee, R. The Future of Solar Energy: A Personal Assessment. *Energy Economics* **2015**, *52*, S142–S148. <https://doi.org/10.1016/j.eneco.2015.08.012>.
- (7) Sánchez-Díez, E.; Ventosa, E.; Guarnieri, M.; Trovò, A.; Flox, C.; Marcilla, R.; Soavi, F.; Mazur, P.; Aranzabe, E.; Ferret, R. Redox Flow Batteries: Status and Perspective towards Sustainable Stationary Energy Storage. *Journal of Power Sources* **2021**, *481*, 228804. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2020.228804>.
- (8) Gyuk, I.; Johnson, M.; Vetrano, J.; Lynn, K.; Parks, W.; Handa, R. Grid Energy Storage; U.S. Department of Energy, 2013; p 67. <https://www.energy.gov/sites/prod/files/2014/09/f18/Grid%20Energy%20Storage%20December%202013.pdf> (accessed 2022-12-22).
- (9) Kumar, K.; Jaipal, B. The Role of Energy Storage with Renewable Electricity Generation. In *Electric Grid Modernization*; Ghofrani, M., Ed.; IntechOpen, 2022. <https://doi.org/10.5772/intechopen.96114>.
- (10) Eckroad, S. Vanadium Redox Flow Batteries: An in-Depth Analysis; Electrical Power Research Institute: Palo Alto, CA, USA, 2007.

- (11) Turkdogan, S. Design and Optimization of a Solely Renewable Based Hybrid Energy System for Residential Electrical Load and Fuel Cell Electric Vehicle. *Engineering Science and Technology, an International Journal* **2021**, 24 (2), 397–404. <https://doi.org/10.1016/j.jestch.2020.08.017>.
- (12) Gür, T. M. Review of Electrical Energy Storage Technologies, Materials and Systems: Challenges and Prospects for Large-Scale Grid Storage. *Energy Environ. Sci.* **2018**, 11 (10), 2696–2767. <https://doi.org/10.1039/C8EE01419A>.
- (13) Tübke, J.; Noack, J.; Wietschel, L. Stand und Perspektiven von Redox-Flow-Batterien als stationäre Speicherlösungen. *TATuP* **2015**, 24 (3), 29–40. <https://doi.org/10.14512/tatup.24.3.29>.
- (14) Kear, G.; Shah, A. A.; Walsh, F. C. Development of the All-Vanadium Redox Flow Battery for Energy Storage: A Review of Technological, Financial and Policy Aspects: All-Vanadium Redox Flow Battery for Energy Storage. *Int. J. Energy Res.* **2012**, 36 (11), 1105–1120. <https://doi.org/10.1002/er.1863>.
- (15) Bauer, S.; Namyslo, J. C.; Kaufmann, D. E.; Turek, T. Evaluation of Options and Limits of Aqueous All-Quinone-Based Organic Redox Flow Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2020**, 167 (11), 110522. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/aba338>.
- (16) Milshtein, J. D.; Darling, R. M.; Drake, J.; Perry, M. L.; Brushett, F. R. The Critical Role of Supporting Electrolyte Selection on Flow Battery Cost. *J. Electrochem. Soc.* **2017**, 164 (14), A3883–A3895. <https://doi.org/10.1149/2.1031714jes>.
- (17) Ha, S.; Gallagher, K. G. Estimating the System Price of Redox Flow Batteries for Grid Storage. *Journal of Power Sources* **2015**, 296, 122–132. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.07.004>.
- (18) Joerissen, L.; Garche, J.; Fabjan, Ch.; Tomazic, G. Possible Use of Vanadium Redox-Flow Batteries for Energy Storage in Small Grids and Stand-Alone Photovoltaic Systems. *Journal of Power Sources* **2004**, 127 (1–2), 98–104. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2003.09.066>.
- (19) Akhil, A.; Huff, G.; Currier, A.; Kaun, B.; Rastler, D.; Chen, S.; Cotter, A.; Bradshaw, D.; Gauntlett, W. DOE/EPRI Electricity Storage Handbook in Collaboration with NRECA.; SAND2015-1002, 1170618, 566970; 2015; pp SAND2015-1002, 1170618, 566970. <https://doi.org/10.2172/1170618>.
- (20) Viswanathan, V.; Crawford, A.; Stephenson, D.; Kim, S.; Wang, W.; Li, B.; Coffey, G.; Thomsen, E.; Graff, G.; Balducci, P.; Kintner-Meyer, M.; Sprenkle, V. Cost and Performance Model for Redox Flow Batteries. *Journal of Power Sources* **2014**, 247, 1040–1051. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2012.12.023>.
- (21) Darling, R. M.; Gallagher, K. G.; Kowalski, J. A.; Ha, S.; Brushett, F. R. Pathways to Low-Cost Electrochemical Energy Storage: A Comparison of Aqueous and Nonaqueous Flow Batteries. *Energy Environ. Sci.* **2014**, 7 (11), 3459–3477. <https://doi.org/10.1039/C4EE02158D>.
- (22) Hugo, Y. A.; Kout, W.; Dalessi, G.; Forner-Cuenca, A.; Borneman, Z.; Nijmeijer, K. Techno-Economic Analysis of a Kilo-Watt Scale Hydrogen-Bromine Flow Battery System for Sustainable Energy Storage. *Processes* **2020**, 8 (11), 1492. <https://doi.org/10.3390/pr8111492>.
- (23) Fetting, C. THE EUROPEAN GREEN DEAL. **2020**, 22.
- (24) Anuta, H.; Ralon, P.; Taylor, M. Renewable Power Generation Costs in 2018. International Renewable Energy Agency **2019**.
- (25) Dmello, R.; Milshtein, J. D.; Brushett, F. R.; Smith, K. C. Cost-Driven Materials Selection Criteria for Redox Flow Battery Electrolytes. *Journal of Power Sources* **2016**, 330, 261–272. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.08.129>.
- (26) Noack, J.; Baudrin, E.; Fornari, R.; Franco, A. A.; Gerlach, D.; Guan, X.; Hamaekers, J.; Maaß, A.; Menictas, C.; Mourouga, G.; Nirschl, H.; Roznyatovskaya, N.; Schaerer, R.; Schumacher, J.; De Silva, P.; Skyllas-Kazacos, M.; Wlodarczyk, J.; Wolf, A.; Yu, J. (Invited) Modelling and Simulation for the Search for New Active Materials for Redox Flow Batteries - Results of the International Project Sonar. Meet. Abstr. **2022**, MA2022-01 (46), 1954–1954. <https://doi.org/10.1149/MA2022-01461954mtgabs>.

- (27) Liu, T.; Wei, X.; Nie, Z.; Sprenkle, V.; Wang, W. A Total Organic Aqueous Redox Flow Battery Employing a Low Cost and Sustainable Methyl Viologen Anolyte and 4-HO-TEMPO Catholyte. *Adv. Energy Mater.* **2016**, 6 (3), 1501449. <https://doi.org/10.1002/aenm.201501449>.
- (28) Weng, G.-M.; Li, Z.; Cong, G.; Zhou, Y.; Lu, Y.-C. Unlocking the Capacity of Iodide for High-Energy-Density Zinc/Polyiodide and Lithium/Polyiodide Redox Flow Batteries. *Energy Environ. Sci.* **2017**, 10 (3), 735–741. <https://doi.org/10.1039/C6EE03554J>.
- (29) Li, Z.; Weng, G.; Zou, Q.; Cong, G.; Lu, Y.-C. A High-Energy and Low-Cost Polysulfide/Iodide Redox Flow Battery. *Nano Energy* **2016**, 30, 283–292. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.09.043>.
- (30) Lodders, K. Solar System Abundances of the Elements. **2010**. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1010.2746>.
- (31) Spite, M. Galaxy Evolution Proceedings of a Colloquium Held at the Observatoire de Paris-Meudon from 21–25 September 1998; Springer Netherlands: Dordrecht, 2000.
- (32) Morgan, J. W.; Anders, E. Chemical Composition of Earth, Venus, and Mercury. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **1980**, 77 (12), 6973–6977. <https://doi.org/10.1073/pnas.77.12.6973>.
- (33) Binder, H. H. Lexikon Der Chemischen Elemente: Das Periodensystem in Fakten, Zahlen Und Daten; S. Hirzel: Stuttgart, 1999.
- (34) Beh, E. S.; De Porcellinis, D.; Gracia, R. L.; Xia, K. T.; Gordon, R. G.; Aziz, M. J. A Neutral pH Aqueous Organic–Organometallic Redox Flow Battery with Extremely High Capacity Retention. *ACS Energy Lett.* **2017**, 2 (3), 639–644. <https://doi.org/10.1021/acsenergylett.7b00019>.
- (35) Noack, J.; Wernado, M.; Roznyatovskaya, N.; Ortner, J.; Pinkwart, K. Studies on Fe/Fe Redox Flow Batteries with Recombination Cell. *J. Electrochem. Soc.* **2020**, 167 (16), 160527. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/abcf50>.
- (36) Arroyo-Currás, N.; Hall, J. W.; Dick, J. E.; Jones, R. A.; Bard, A. J. An Alkaline Flow Battery Based on the Coordination Chemistry of Iron and Cobalt. *J. Electrochem. Soc.* **2015**, 162 (3), A378–A383. <https://doi.org/10.1149/2.0461503jes>.
- (37) Gong, K.; Xu, F.; Grunewald, J. B.; Ma, X.; Zhao, Y.; Gu, S.; Yan, Y. All-Soluble All-Iron Aqueous Redox-Flow Battery. *ACS Energy Lett.* **2016**, 1 (1), 89–93. <https://doi.org/10.1021/acsenergylett.6b00049>.
- (38) Bae*, C.; Roberts, E. P. L.; Chakrabarti, M. H.; Saleem, M. All-Chromium Redox Flow Battery for Renewable Energy Storage. *International Journal of Green Energy* **2011**, 8 (2), 248–264. <https://doi.org/10.1080/15435075.2010.549598>.
- (39) Skyllas-Kazacos, M.; Cao, L.; Kazacos, M.; Kausar, N.; Mousa, A. Vanadium Electrolyte Studies for the Vanadium Redox Battery-A Review. *ChemSusChem* **2016**, 9 (13), 1521–1543. <https://doi.org/10.1002/cssc.201600102>.
- (40) Hu, B.; DeBruler, C.; Rhodes, Z.; Liu, T. L. Long-Cycling Aqueous Organic Redox Flow Battery (AORFB) toward Sustainable and Safe Energy Storage. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139 (3), 1207–1214. <https://doi.org/10.1021/jacs.6b10984>.
- (41) Yang, B.; Hooper-Burkhardt, L.; Wang, F.; Surya Prakash, G. K.; Narayanan, S. R. An Inexpensive Aqueous Flow Battery for Large-Scale Electrical Energy Storage Based on Water-Soluble Organic Redox Couples. *J. Electrochem. Soc.* **2014**, 161 (9), A1371–A1380. <https://doi.org/10.1149/2.1001409jes>.
- (42) Huskinson, B.; Marshak, M. P.; Suh, C.; Er, S.; Gerhardt, M. R.; Galvin, C. J.; Chen, X.; Aspuru-Guzik, A.; Gordon, R. G.; Aziz, M. J. A Metal-Free Organic–Inorganic Aqueous Flow Battery. *Nature* **2014**, 505 (7482), 195–198. <https://doi.org/10.1038/nature12909>.
- (43) Noack, J.; Wietschel, L.; Roznyatovskaya, N.; Pinkwart, K.; Tübke, J. Techno-Economic Modeling and Analysis of Redox Flow Battery Systems. *Energies* **2016**, 9 (8), 627. <https://doi.org/10.3390/en9080627>.
- (44) Spellman, K.; Stiles, K.; Little, I. Economic Report on Vanadium Redox Flow Battery with Optimization of Flow Rate. **2013**.
- (45) Liu, Q. H.; Grim, G. M.; Papandrew, A. B.; Turhan, A.; Zawodzinski, T. A.; Mench, M. M. High Performance Vanadium Redox Flow Batteries with Optimized Electrode Configuration and

- Membrane Selection. *J. Electrochem. Soc.* **2012**, 159 (8), A1246–A1252.
<https://doi.org/10.1149/2.051208jes>.
- (46) Minke, C.; Turek, T. Materials, System Designs and Modelling Approaches in Techno-Economic Assessment of All-Vanadium Redox Flow Batteries – A Review. *Journal of Power Sources* **2018**, 376, 66–81. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.11.058>.
- (47) Arbeitsgruppe Erneuerbare Energien-Statistik; Umweltbundesamt. Zeitreihen Zur Entwicklung Der Erneuerbaren Energien in Deutschland; 2023.
https://www.bmwk.de/Redaktion/DE/Downloads/Energie/zeitreihen-zur-entwicklung-der-erneuerbaren-energien-in-deutschland-1990-2022.pdf?__blob=publicationFile&v=2 (accessed 2024-02-18).
- (48) Erneuerbare-Energien-Gesetz Vom 21. Juli 2014 (BGBl. I S. 1066), Das Zuletzt Durch Artikel 1 Des Gesetzes Vom 5. Februar 2024 (BGBl. 2024 I Nr. 33) Geändert Worden Ist; p 128.
https://www.gesetze-im-internet.de/eeg_2014/ (accessed 2024-02-18).
- (49) Infografik: Deutschland führend bei Wind und Solar. Statista Daily Data.
<https://de.statista.com/infografik/22576/anteil-von-wind--und-solarenergie-an-der-stromerzeugung> (accessed 2024-02-21).
- (50) So läuft der Ausbau der Erneuerbaren Energien in Deutschland | Bundesregierung. Die Bundesregierung informiert | Startseite. <https://www.bundesregierung.de/breg-de/aktuelles/ausbau-erneuerbare-energien-2225808> (accessed 2024-02-21).
- (51) Energieflussbilder » AG Energiebilanzen e. V. AG Energiebilanzen e. V. <https://ag-energiebilanzen.de/daten-und-fakten/energieflussbilder/> (accessed 2024-02-21).
- (52) Braun, O. AG Energiebilanzen legt Bericht für 2022 vor » AG Energiebilanzen e. V. AG Energiebilanzen e. V. <https://ag-energiebilanzen.de/ag-energiebilanzen-legt-bericht-fuer-2022-vor/> (accessed 2024-02-21).
- (53) Wilke, S. Primärenergieverbrauch. Umweltbundesamt.
<https://www.umweltbundesamt.de/bild/primaerenergieverbrauch> (accessed 2024-02-21).
- (54) Europäischer Green Deal: Ziele, Daten und Fakten 2023 - Statistisches Bundesamt.
https://www.destatis.de/Europa/DE/Thema/GreenDeal/_inhalt.html#798692 (accessed 2024-02-21).
- (55) CSR - EU Green Deal. www.bmas.de. <https://www.csr-in-deutschland.de/DE/CSR-Allgemein/CSR-Politik/CSR-in-der-EU/EU-Green-Deal/eu-green-deal.html> (accessed 2024-02-21).
- (56) Kerry, J. The Long-Term Strategy of the United States, Pathways to Net-Zero Greenhouse Gas Emissions by 2050.
- (57) Andrleit, H.; Meßner, J.; Pein, M.; Rebscher, D.; Schauer, M.; Schmidt, S.; Von Goerne, G. Status, Daten und Entwicklungen der globalen Energieversorgung. *Z Energiewirtsch* **2018**, 42 (3), 179–191. <https://doi.org/10.1007/s12398-018-0231-5>.
- (58) Statistik des weltweiten Energieverbrauchs | Enerdata.
<https://energiestatistik.enerdata.net/gesamtenergie/welt-verbrauch-statistik.html> (accessed 2024-02-21).
- (59) Alšauskas, O. World Energy Outlook 2024.
- (60) Schill, W.-P. Electricity Storage and the Renewable Energy Transition. *Joule* **2020**, 4 (10), 2059–2064. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2020.07.022>.
- (61) Dunn, B.; Kamath, H.; Tarascon, J.-M. Electrical Energy Storage for the Grid: A Battery of Choices. *Science*. *Science (New York, N.Y.)* **2011**, 334, 928–935. <https://doi.org/10.1126/science.1212741>.
- (62) Koltsaklis, N. E.; Panapakidis, I. P.; Christoforidis, G. C.; Parisses, C. E. The Role of Electricity Storage in the Energy Transition. In 2020 17th International Conference on the European Energy Market (EEM); IEEE: Stockholm, Sweden, 2020; pp 1–6.
<https://doi.org/10.1109/EEM49802.2020.9221879>.
- (63) Ausfelder, F.; Beilmann, C.; Bertau, M.; Bräuninger, S.; Heinzl, A.; Hoer, R.; Koch, W.; Mahlendorf, F.; Metzelthin, A.; Peuckert, M.; Plass, L.; Räuchle, K.; Reuter, M.; Schaub, G.; Schiebahn, S.; Schwab, E.; Schüth, F.; Stolten, D.; Teßmer, G.; Wagemann, K.; Ziegahn, K.

- Energiespeicherung Als Element Einer Sicheren Energieversorgung. *Chemie Ingenieur Technik* **2015**, 87 (1–2), 17–89. <https://doi.org/10.1002/cite.201400183>.
- (64) Rozon, F.; McGregor, C.; Owen, M. Long-Term Forecasting Framework for Renewable Energy Technologies' Installed Capacity and Costs for 2050. *Energies* **2023**, 16 (19), 6874. <https://doi.org/10.3390/en16196874>.
- (65) FHG-ICT-RFB. FHG-ICT-RFB/FLOTE, 2024. <https://github.com/FHG-ICT-RFB/FLOTE> (accessed 2024-07-29).
- (66) Kurzweil, P. Doppelschichtkondensatoren. In *Elektrochemische Speicher*; Springer Fachmedien Wiesbaden: Wiesbaden, 2018; pp 23–164. https://doi.org/10.1007/978-3-658-21829-4_2.
- (67) Presser, V. Doppelschichtkondensatoren mit höherem Energieinhalt. *ATZ Elektron* **2013**, 8 (3), 170–175. <https://doi.org/10.1365/s35658-013-0290-7>.
- (68) Goodenough, J. B.; Abruna, H. D.; Buchanan, M. V. Basic Research Needs for Electrical Energy Storage. Report of the Basic Energy Sciences Workshop on Electrical Energy Storage, April 2–4, 2007; 935429; 2007; p 935429. <https://doi.org/10.2172/935429>.
- (69) Terörde, M. Einsatz eines supraleitenden magnetischen Energiespeichers zur Primärregelung bei DESY. **2012**. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.15600.71682>.
- (70) Verga, R. L. Superconducting Magnetic Energy Storage and Other Large-Scale SDI Cryogenic Applications Programs. **1990**, 35A, 555–564.
- (71) Rummich, E. Supraleitende Energiespeicher. In *Nichtkonventionelle Energienutzung*; Springer Vienna: Vienna, 1978; pp 230–237. https://doi.org/10.1007/978-3-7091-8519-3_30.
- (72) Goeke, J. Thermische Energiespeicher in der Gebäudetechnik: Sensible Speicher, Latente Speicher, Systemintegration; Springer Fachmedien Wiesbaden: Wiesbaden, 2021. <https://doi.org/10.1007/978-3-658-34510-5>.
- (73) Cole, W. J.; Powell, K. M.; Edgar, T. F. Optimization and Advanced Control of Thermal Energy Storage Systems. *Reviews in Chemical Engineering* **2012**, 28 (2–3). <https://doi.org/10.1515/revce-2011-0018>.
- (74) Schmidt, T.; Mangold, D.; Müller-Steinhagen, H. Central Solar Heating Plants with Seasonal Storage in Germany. *Solar Energy* **2004**, 76 (1–3), 165–174. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2003.07.025>.
- (75) Goeke, J. Gebäude als thermischer Energiespeicher. In *Thermische Energiespeicher in der Gebäudetechnik*; Springer Fachmedien Wiesbaden: Wiesbaden, 2021; pp 493–550. https://doi.org/10.1007/978-3-658-34510-5_16.
- (76) Sterner, M.; Stadler, I. Thermische Energiespeicher. In *Energiespeicher - Bedarf, Technologien, Integration*; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2014; pp 535–574. https://doi.org/10.1007/978-3-642-37380-0_10.
- (77) Laughlin, R. B. Pumped Thermal Grid Storage with Heat Exchange. *Journal of Renewable and Sustainable Energy* **2017**, 9 (4), 044103. <https://doi.org/10.1063/1.4994054>.
- (78) Alva, G.; Liu, L.; Huang, X.; Fang, G. Thermal Energy Storage Materials and Systems for Solar Energy Applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **2017**, 68, 693–706. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.10.021>.
- (79) Giesecke, J.; Heimerl, S. Pumpspeicherkraftwerke. In *Wasserkraftanlagen*; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2014; pp 709–743. https://doi.org/10.1007/978-3-642-53871-1_17.
- (80) Hunt, J. D.; Zakeri, B.; Falchetta, G.; Nascimento, A.; Wada, Y.; Riahi, K. Mountain Gravity Energy Storage: A New Solution for Closing the Gap between Existing Short- and Long-Term Storage Technologies. *Energy* **2020**, 190, 116419. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.116419>.
- (81) Richter, W.; Vereide, K.; Pikl, F. G.; Pummer, E.; Zenz, G.; Lia, L. Ökonomische und nachhaltige Energiewende durch den Ausbau von Pumpspeicherkraftwerken.
- (82) *Energiespeicher - Bedarf, Technologien, Integration*; Sterner, M., Stadler, I., Eds.; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2017. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-48893-5>.

- (83) Ibrahim, H.; Ilinca, A.; Perron, J. Energy Storage Systems—Characteristics and Comparisons. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **2008**, 12 (5), 1221–1250. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2007.01.023>.
- (84) Bockelmann, M.; Becker, M.; Stypka, S.; Bauer, S.; Minke, C.; Turek, T. Erzeugung von Wasserstoff durch Elektrolyse: Grüner Wasserstoff. *Chemie in unserer Zeit* **2024**, 58 (1), 29–45. <https://doi.org/10.1002/ciuz.202300024>.
- (85) Wasserstoff und Brennstoffzelle: Technologien und Marktperspektiven; Töpler, J., Lehmann, J., Eds.; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2017. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-53360-4>.
- (86) Staiß, F.; Adolf, J.; Ausfelder, F.; Erdmann, C.; Hebling, C.; Jordan, T.; Klepper, G.; Müller, T.; Palkovits, R.; Poganietz, W.-R.; Schill, W.-P.; Schmidt, M.; Stephanos, C.; Stöcker, P.; Wagner, U.; Westphal, K.; Wurbs, S.; Fishedick, M. Optionen für den Import grünen Wasserstoffs nach Deutschland bis zum Jahr 2030: Transportwege – Länderbewertungen – Realisierungserfordernisse; acatech - Deutsche Akademie der Technikwissenschaften, 2022; p 128. https://doi.org/10.48669/ESYS_2022-6.
- (87) Bieker, P.; Winter, M. Was braucht man für eine Super-Batterie?: Hochenergieakkumulatoren. Teil 1 von 2. *Chemie in unserer Zeit* **2016**, 50 (1), 26–33. <https://doi.org/10.1002/ciuz.201500713>.
- (88) Watt-Smith, M. J.; Wills, R. G. A.; Walsh, F. C. SECONDARY BATTERIES – FLOW SYSTEMS | Overview. In *Encyclopedia of Electrochemical Power Sources*; Elsevier, 2009; pp 438–443. <https://doi.org/10.1016/B978-044452745-5.00176-3>.
- (89) Kato, Y.; Hori, S.; Saito, T.; Suzuki, K.; Hirayama, M.; Mitsui, A.; Yonemura, M.; Iba, H.; Kanno, R. High-Power All-Solid-State Batteries Using Sulfide Superionic Conductors. *Nat Energy* **2016**, 1 (4), 16030. <https://doi.org/10.1038/nenergy.2016.30>.
- (90) Nikiforidis, G.; Van De Sanden, M. C. M.; Tsampas, M. N. High and Intermediate Temperature Sodium–Sulfur Batteries for Energy Storage: Development, Challenges and Perspectives. *RSC Adv.* **2019**, 9 (10), 5649–5673. <https://doi.org/10.1039/C8RA08658C>.
- (91) Handbuch Lithium-Ionen-Batterien; Korthauer, R., Ed.; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2013. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-30653-2>.
- (92) Hoyer, C. Strategische Planung des Recyclings von Lithium-Ionen-Batterien aus Elektrofahrzeugen in Deutschland; Springer Fachmedien Wiesbaden: Wiesbaden, 2015. <https://doi.org/10.1007/978-3-658-10274-6>.
- (93) Kanega, R.; Ishida, E.; Sakai, T.; Onishi, N.; Yamamoto, A.; Yasumura, H.; Yoshida, H.; Kawanami, H.; Himeda, Y.; Sato, Y.; Ohira, A. An Aqueous Redox Flow Battery Using CO₂ as an Active Material with a Homogeneous Ir Catalyst**. *Angewandte Chemie* **2023**, 135 (47), e202310976. <https://doi.org/10.1002/ange.202310976>.
- (94) Gong, K.; Fang, Q.; Gu, S.; Li, S. F. Y.; Yan, Y. Nonaqueous Redox-Flow Batteries: Organic Solvents, Supporting Electrolytes, and Redox Pairs. *Energy Environ. Sci.* **2015**, 8 (12), 3515–3530. <https://doi.org/10.1039/C5EE02341F>.
- (95) Weber, A. Z.; Mench, M. M.; Meyers, J. P.; Ross, P. N.; Gostick, J. T.; Liu, Q. Redox Flow Batteries: A Review. *J Appl Electrochem* **2011**, 41 (10), 1137–1164. <https://doi.org/10.1007/s10800-011-0348-2>.
- (96) Janoschka, T.; Martin, N.; Hager, M. D.; Schubert, U. S. An Aqueous Redox-Flow Battery with High Capacity and Power: The TEMPTMA/MV System. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, 55 (46), 14427–14430. <https://doi.org/10.1002/anie.201606472>.
- (97) Mitali, J.; Dhinakaran, S.; Mohamad, A. A. Energy Storage Systems: A Review. *Energy Storage and Saving* **2022**, 1 (3), 166–216. <https://doi.org/10.1016/j.enss.2022.07.002>.
- (98) Kurzweil, P. Gaston Planté and His Invention of the Lead–Acid Battery—The Genesis of the First Practical Rechargeable Battery. *Journal of Power Sources* **2010**, 195 (14), 4424–4434. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.12.126>.
- (99) Hossain, E.; Faruque, H.; Sunny, Md.; Mohammad, N.; Nawar, N. A Comprehensive Review on Energy Storage Systems: Types, Comparison, Current Scenario, Applications, Barriers, and

- Potential Solutions, Policies, and Future Prospects. *Energies* **2020**, *13* (14), 3651. <https://doi.org/10.3390/en13143651>.
- (100) Sparacino, A. R.; Reed, G. F.; Kerestes, R. J.; Grainger, B. M.; Smith, Z. T. Survey of Battery Energy Storage Systems and Modeling Techniques. In 2012 IEEE Power and Energy Society General Meeting; IEEE: San Diego, CA, 2012; pp 1–8. <https://doi.org/10.1109/PESGM.2012.6345071>.
 - (101) Abdin, Z.; Khalilpour, K. R. Single and Polystorage Technologies for Renewable-Based Hybrid Energy Systems. In *Polygeneration with Polystorage for Chemical and Energy Hubs*; Elsevier, 2019; pp 77–131. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813306-4.00004-5>.
 - (102) Zalba, B.; Marín, J. M.; Cabeza, L. F.; Mehling, H. Review on Thermal Energy Storage with Phase Change: Materials, Heat Transfer Analysis and Applications. *Applied Thermal Engineering* **2003**, *23* (3), 251–283. [https://doi.org/10.1016/S1359-4311\(02\)00192-8](https://doi.org/10.1016/S1359-4311(02)00192-8).
 - (103) Chen, H.; Cong, T. N.; Yang, W.; Tan, C.; Li, Y.; Ding, Y. Progress in Electrical Energy Storage System: A Critical Review. *Progress in Natural Science* **2009**, *19* (3), 291–312. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2008.07.014>.
 - (104) Skyllas-Kazacos, M.; Rychcik, M.; Robins, R. G.; Fane, A. G.; Green, M. A. New All-Vanadium Redox Flow Cell. *J. Electrochem. Soc.* **1986**, *133* (5), 1057–1058. <https://doi.org/10.1149/1.2108706>.
 - (105) Zhang, S.; Guo, W.; Yang, F.; Zheng, P.; Qiao, R.; Li, Z. Recent Progress in Polysulfide Redox-Flow Batteries. *Batteries & Supercaps* **2019**, *2* (7), 627–637. <https://doi.org/10.1002/batt.201900056>.
 - (106) Reddy, M. V.; Mauger, A.; Julien, C. M.; Paoletta, A.; Zaghib, K. Brief History of Early Lithium-Battery Development. *Materials* **2020**, *13* (8), 1884. <https://doi.org/10.3390/ma13081884>.
 - (107) Razaq, A.; Nyholm, L.; Sjödin, M.; Strømme, M.; Mihranyan, A. Energy Storage: Paper-Based Energy-Storage Devices Comprising Carbon Fiber-Reinforced Polypyrrole-Cladophora Nanocellulose Composite Electrodes (*Adv. Energy Mater.* 4/2012). *Advanced Energy Materials* **2012**, *2* (4), 494–494. <https://doi.org/10.1002/aenm.201290021>.
 - (108) Aramendia, I.; Fernandez-Gamiz, U.; Martinez-San-Vicente, A.; Zulueta, E.; Lopez-Guede, J. M. Vanadium Redox Flow Batteries: A Review Oriented to Fluid-Dynamic Optimization. *Energies* **2020**, *14* (1), 176. <https://doi.org/10.3390/en14010176>.
 - (109) Mongird, K.; Viswanathan, V.; Balducci, P.; Alam, J.; Fotedar, V.; Koritarov, V.; Hadjerioua, B. Energy Storage Technology and Cost Characterization Report. **2019**.
 - (110) Hameer, S.; van Niekerk, J. L. A Review of Large-Scale Electrical Energy Storage: This Paper Gives a Broad Overview of the Plethora of Energy Storage. *Int. J. Energy Res.* **2015**, *39* (9), 1179–1195. <https://doi.org/10.1002/er.3294>.
 - (111) Perry, M. L.; Weber, A. Z. Advanced Redox-Flow Batteries: A Perspective. *J. Electrochem. Soc.* **2016**, *163* (1), A5064–A5067. <https://doi.org/10.1149/2.0101601jes>.
 - (112) Milshtein, J. D.; Barton, J. L.; Carney, T. J.; Kowalski, J. A.; Darling, R. M.; Brushett, F. R. Towards Low Resistance Nonaqueous Redox Flow Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2017**, *164* (12), A2487–A2499. <https://doi.org/10.1149/2.0741712jes>.
 - (113) Gandomi, Y. A.; Aaron, D. S.; Houser, J. R.; Daugherty, M. C.; Clement, J. T.; Pezeshki, A. M.; Ertugrul, T. Y.; Moseley, D. P.; Mench, M. M. Critical Review—Experimental Diagnostics and Material Characterization Techniques Used on Redox Flow Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2018**, *165* (5), A970–A1010. <https://doi.org/10.1149/2.0601805jes>.
 - (114) Yuan, X.; Song, C.; Platt, A.; Zhao, N.; Wang, H.; Li, H.; Fatih, K.; Jang, D. A Review of All-vanadium Redox Flow Battery Durability: Degradation Mechanisms and Mitigation Strategies. *Int J Energy Res* **2019**, er.4607. <https://doi.org/10.1002/er.4607>.
 - (115) Kwabi, D. G.; Ji, Y.; Aziz, M. J. Electrolyte Lifetime in Aqueous Organic Redox Flow Batteries: A Critical Review. *Chem. Rev.* **2020**, *120* (14), 6467–6489. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00599>.

- (116) Ponce de León, C.; Frías-Ferrer, A.; González-García, J.; Szánto, D. A.; Walsh, F. C. Redox Flow Cells for Energy Conversion. *Journal of Power Sources* **2006**, 160 (1), 716–732. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.02.095>.
- (117) Leung, P.; Li, X.; Ponce de León, C.; Berlouis, L.; Low, C. T. J.; Walsh, F. C. Progress in Redox Flow Batteries, Remaining Challenges and Their Applications in Energy Storage. *RSC Adv.* **2012**, 2 (27), 10125. <https://doi.org/10.1039/c2ra21342g>.
- (118) Skyllas-Kazacos, M.; Chakrabarti, M. H.; Hajimolana, S. A.; Mjalli, F. S.; Saleem, M. Progress in Flow Battery Research and Development. *J. Electrochem. Soc.* **2011**, 158 (8), R55. <https://doi.org/10.1149/1.3599565>.
- (119) Wang, W.; Luo, Q.; Li, B.; Wei, X.; Li, L.; Yang, Z. Recent Progress in Redox Flow Battery Research and Development. *Adv. Funct. Mater.* **2013**, 23 (8), 970–986. <https://doi.org/10.1002/adfm.201200694>.
- (120) Noack, J.; Roznyatovskaya, N.; Herr, T.; Fischer, P. The Chemistry of Redox-Flow Batteries. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54 (34), 9776–9809. <https://doi.org/10.1002/anie.201410823>.
- (121) Winsberg, J.; Hagemann, T.; Janoschka, T.; Hager, M. D.; Schubert, U. S. Redox-Flow-Batterien: Von Metallbasierten Zu Organischen Aktivmaterialien. *Angew. Chem.* **2017**, 129 (3), 702–729. <https://doi.org/10.1002/ange.201604925>.
- (122) Medina, P.; Bizuayehu, A. W.; Catalao, J. P. S.; Rodrigues, E. M. G.; Contreras, J. Electrical Energy Storage Systems: Technologies' State-of-the-Art, Techno-Economic Benefits and Applications Analysis. In 2014 47th Hawaii International Conference on System Sciences; IEEE: Waikoloa, HI, 2014; pp 2295–2304. <https://doi.org/10.1109/HICSS.2014.290>.
- (123) Riaz, A.; Sarker, M. R.; Saad, M. H. M.; Mohamed, R. Review on Comparison of Different Energy Storage Technologies Used in Micro-Energy Harvesting, WSNs, Low-Cost Microelectronic Devices: Challenges and Recommendations. *Sensors* **2021**, 21 (15), 5041. <https://doi.org/10.3390/s21155041>.
- (124) Shibata, A.; Sato, K. Development of Vanadium Redox Flow Battery for Electricity Storage. *Power Engineering Journal* **1999**, 13 (3), 130–135. <https://doi.org/10.1049/pe:19990305>.
- (125) Alotto, P.; Guarnieri, M.; Moro, F. Redox Flow Batteries for the Storage of Renewable Energy: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **2014**, 29, 325–335. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.08.001>.
- (126) Skyllas-Kazacos, M.; Kazacos, G.; Poon, G.; Verseema, H. Recent Advances with UNSW Vanadium-Based Redox Flow Batteries. *Int. J. Energy Res.* **2010**, 34 (2), 182–189. <https://doi.org/10.1002/er.1658>.
- (127) H2020-Project SONAR. Modelling for the search for new active materials for redox flow batteries. <https://www.fraunhofer.de/en/H2020-project-SONAR.html> (accessed 2024-07-31).
- (128) Noack, J.; Roznyatovskaya, N.; Herr, T.; Fischer, P. Die Chemie der Redox-Flow-Batterien. *Angewandte Chemie* **2015**, 127 (34), 9912–9947. <https://doi.org/10.1002/ange.201410823>.
- (129) Handbook of Batteries, 3rd ed.; Linden, D., Reddy, T. B., Eds.; McGraw-Hill handbooks; McGraw-Hill: New York, 2002.
- (130) Li, B.; Liu, J. Progress and Directions in Low-Cost Redox-Flow Batteries for Large-Scale Energy Storage. *National Science Review* **2017**, 4 (1), 91–105. <https://doi.org/10.1093/nsr/nww098>.
- (131) Aluko, A.; Knight, A. A Review on Vanadium Redox Flow Battery Storage Systems for Large-Scale Power Systems Application. *IEEE Access* **2023**, 11, 13773–13793. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2023.3243800>.
- (132) Ulaganathan, M.; Aravindan, V.; Yan, Q.; Madhavi, S.; Skyllas-Kazacos, M.; Lim, T. M. Recent Advancements in All-Vanadium Redox Flow Batteries. *Advanced Materials Interfaces* **2016**, 3 (1), 1500309. <https://doi.org/10.1002/admi.201500309>.
- (133) Bard, A. J.; Faulkner, L. R. *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*, 2nd ed.; Wiley: New York, 2001.

- (134) Minke, C.; Dorantes Ledesma, M. A. Impact of Cell Design and Maintenance Strategy on Life Cycle Costs of Vanadium Redox Flow Batteries. *Journal of Energy Storage* **2019**, 21, 571–580. <https://doi.org/10.1016/j.est.2018.12.019>.
- (135) Rychcik, M.; Skyllas-Kazacos, M. Characteristics of a New All-Vanadium Redox Flow Battery. *Journal of Power Sources* **1988**, 22 (1), 59–67. [https://doi.org/10.1016/0378-7753\(88\)80005-3](https://doi.org/10.1016/0378-7753(88)80005-3).
- (136) Hawthorne, K. L.; Petek, T. J.; Miller, M. A.; Wainright, J. S.; Savinell, R. F. An Investigation into Factors Affecting the Iron Plating Reaction for an All-Iron Flow Battery. *J. Electrochem. Soc.* **2015**, 162 (1), A108–A113. <https://doi.org/10.1149/2.0591501jes>.
- (137) Lai, Q.; Zhang, H.; Li, X.; Zhang, L.; Cheng, Y. A Novel Single Flow Zinc–Bromine Battery with Improved Energy Density. *Journal of Power Sources* **2013**, 235, 1–4. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.01.193>.
- (138) Yang, J. H.; Yang, H. S.; Ra, H. W.; Shim, J.; Jeon, J.-D. Effect of a Surface Active Agent on Performance of Zinc/Bromine Redox Flow Batteries: Improvement in Current Efficiency and System Stability. *Journal of Power Sources* **2015**, 275, 294–297. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.10.208>.
- (139) Duduta, M.; Ho, B.; Wood, V. C.; Limthongkul, P.; Brunini, V. E.; Carter, W. C.; Chiang, Y.-M. Semi-Solid Lithium Rechargeable Flow Battery. *Adv. Energy Mater.* **2011**, 1 (4), 511–516. <https://doi.org/10.1002/aenm.201100152>.
- (140) Lin, G.; Chong, P. Y.; Yarlagadda, V.; Nguyen, T. V.; Wycisk, R. J.; Pintauro, P. N.; Bates, M.; Mukerjee, S.; Tucker, M. C.; Weber, A. Z. Advanced Hydrogen-Bromine Flow Batteries with Improved Efficiency, Durability and Cost. *J. Electrochem. Soc.* **2016**, 163 (1), A5049–A5056. <https://doi.org/10.1149/2.0071601jes>.
- (141) Wen, Y. H.; Zhang, H. M.; Qian, P.; Zhou, H. T.; Zhao, P.; Yi, B. L.; Yang, Y. S. Studies on Iron (Fe[Sup 3+]/Fe[Sup 2+])-Complex/Bromine (Br[Sub 2]/Br[Sup -]) Redox Flow Cell in Sodium Acetate Solution. *J. Electrochem. Soc.* **2006**, 153 (5), A929. <https://doi.org/10.1149/1.2186040>.
- (142) Sum, E.; Skyllas-Kazacos, M. A Study of the V(II)/V(III) Redox Couple for Redox Flow Cell Applications. *Journal of Power Sources* **1985**, 15 (2–3), 179–190. [https://doi.org/10.1016/0378-7753\(85\)80071-9](https://doi.org/10.1016/0378-7753(85)80071-9).
- (143) Skyllas-Kazacos, M. Review—Highlights of UNSW All-Vanadium Redox Battery Development: 1983 to Present. *J. Electrochem. Soc.* **2022**, 169 (7), 070513. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac7bab>.
- (144) Khataee, A.; Pan, D.; Olsson, J. S.; Jannasch, P.; Lindström, R. W. Asymmetric Cycling of Vanadium Redox Flow Batteries with a Poly(Arylene Piperidinium)-Based Anion Exchange Membrane. *Journal of Power Sources* **2021**, 483, 229202. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2020.229202>.
- (145) Xu, Y.; Wen, Y.; Cheng, J.; Yanga, Y.; Xie, Z.; Cao, G. Novel Organic Redox Flow Batteries Using Soluble Quinonoid Compounds as Positive Materials. In 2009 World Non-Grid-Connected Wind Power and Energy Conference; IEEE: Nanjing, China, 2009; pp 1–4. <https://doi.org/10.1109/WNVEC.2009.5335870>.
- (146) Nelson, R. R.; Winter, S. G. An Evolutionary Theory of Economic Change, digitally reprinted.; The Belknap Press of Harvard Univ. Press: Cambridge, Mass., 2004.
- (147) Freeman, C.; Soete, L. The Economics of Industrial Innovation, 3. ed., reprinted.; MIT Press: Cambridge, Mass., 2000.
- (148) Perez, C. Technological Revolutions and Financial Capital: The Dynamics of Bubbles and Golden Ages, Repr.; Elgar: Cheltenham, 2003.
- (149) Azizi, A. H. The Nature of Technology: What It Is and How It Evolves, by W. Brian Arthur. A Review.
- (150) Umweltpolitik. In Politik und Wirtschaft; Springer Fachmedien Wiesbaden: Wiesbaden, 2018; pp 401–430. https://doi.org/10.1007/978-3-658-06227-9_16.
- (151) Schienstock, G.; Hämmäläinen, T. Transformation of the Finnish Innovation System.

- (152) Malerba, F.; Orsenigo, L. Schumpeterian Patterns of Innovation Are Technology-Specific. *Research Policy* **1996**, 25 (3), 451–478. [https://doi.org/10.1016/0048-7333\(95\)00840-3](https://doi.org/10.1016/0048-7333(95)00840-3).
- (153) Freeman, C.; Louçã, F. *As Time Goes by: From the Industrial Revolutions to the Information Revolution*; Oxford Univ. Press: Oxford, 2002. <https://doi.org/10.1093/0199251053.001.0001>.
- (154) Dosi, G. Technological Paradigms and Technological Trajectories. *Research Policy* **1982**, 11 (3), 147–162. [https://doi.org/10.1016/0048-7333\(82\)90016-6](https://doi.org/10.1016/0048-7333(82)90016-6).
- (155) Gottinger, H. W. Innovation, Dynamics of Competition and Market Dynamics`. *ABR* **2016**, 4 (1). <https://doi.org/10.14738/abr.41.1737>.
- (156) Caiani, A. Innovation Dynamics and Industry Structure Under Different Technological Spaces. *Ital Econ J* **2017**, 3 (3), 307–341. <https://doi.org/10.1007/s40797-017-0049-z>.
- (157) Kobos, P.; Drennen, T.; Outkin, A.; Webb, E.; Paap, S.; Wiryadinata, S. *Techno-Economic Analysis: Best Practices and Assessment Tools*; Sandia National Laboratories (SNL): Albuquerque, NM, and Livermore, CA (United States), 2020. <https://doi.org/10.2172/1738878>.
- (158) Barecka, M. H.; Ager, J. W.; Lapkin, A. A. Techno-Economic Assessment of Emerging CO₂ Electrolysis Technologies. *STAR Protocols* **2021**, 2 (4), 100889. <https://doi.org/10.1016/j.xpro.2021.100889>.
- (159) Matthess, M.; Kunkel, S. Structural Change and Digitalization in Developing Countries: Conceptually Linking the Two Transformations. *Technology in Society* **2020**, 63, 101428. <https://doi.org/10.1016/j.techsoc.2020.101428>.
- (160) Ciampi, F.; Faraoni, M.; Ballerini, J.; Meli, F. The Co-Evolutionary Relationship between Digitalization and Organizational Agility: Ongoing Debates, Theoretical Developments and Future Research Perspectives. *Technological Forecasting and Social Change* **2022**, 176, 121383. <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2021.121383>.
- (161) Bressanin, J. M.; Klein, B. C.; Chagas, M. F.; Watanabe, M. D. B.; Sampaio, I. L. D. M.; Bonomi, A.; Morais, E. R. D.; Cavalett, O. Techno-Economic and Environmental Assessment of Biomass Gasification and Fischer–Tropsch Synthesis Integrated to Sugarcane Biorefineries. *Energies* **2020**, 13 (17), 4576. <https://doi.org/10.3390/en13174576>.
- (162) Tang, J.; Tang, Y.; Liu, H.; Chen, X.; Zhang, X.; Chen, Y.; Liang, S.; Huang, J.; Teng, W.; Sun, Z.; Ma, X. Recent Advances in Ex Ante Techno-Environmental-Economic Assessment of Thermochemical Waste or Biomass to Energy Technologies Based on Process Simulation. *Green Chem.* **2025**, 27 (11), 2846–2899. <https://doi.org/10.1039/d4gc06016d>.
- (163) He, W.; King, M.; Luo, X.; Dooner, M.; Li, D.; Wang, J. Technologies and Economics of Electric Energy Storages in Power Systems: Review and Perspective. *Advances in Applied Energy* **2021**, 4, 100060. <https://doi.org/10.1016/j.adapen.2021.100060>.
- (164) Huang, Q.; Zeng, L.; Lashari, N. U. R.; Huang, Z.; Xie, X. A Comprehensive Review on the Techno-Economic Analysis of Electrochemical Energy Storage Systems: Technologies, Applications, Benefits and Trends. *Future Batteries* **2025**, 5, 100031. <https://doi.org/10.1016/j.fub.2025.100031>.
- (165) Li, L.; Wang, B.; Jiao, K.; Ni, M.; Du, Q.; Liu, Y.; Li, B.; Ling, G.; Wang, C. Comparative Techno-Economic Analysis of Large-Scale Renewable Energy Storage Technologies. *Energy and AI* **2023**, 14, 100282. <https://doi.org/10.1016/j.egyai.2023.100282>.
- (166) Hunter, C. A.; Penev, M. M.; Reznicek, E. P.; Eichman, J.; Rustagi, N.; Baldwin, S. F. Techno-Economic Analysis of Long-Duration Energy Storage and Flexible Power Generation Technologies to Support High-Variable Renewable Energy Grids. *Joule* **2021**, 5 (8), 2077–2101. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2021.06.018>.
- (167) Yang, T.; Liu, W.; Kramer, G. J.; Sun, Q. Seasonal Thermal Energy Storage: A Techno-Economic Literature Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **2021**, 139, 110732. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.110732>.
- (168) Zhang, B.; Yang, J.; Tian, S.; Huang, Q.; Wang, W.; Sun, Q.; Ren, X. Techno-Economic Evaluation of a Compressed CO₂ Energy Storage System for Load Shifting Based on Dynamic Modelling. *Energies* **2023**, 16 (23), 7894. <https://doi.org/10.3390/en16237894>.

- (169) Wernet, G.; Bauer, C.; Steubing, B.; Reinhard, J.; Moreno-Ruiz, E.; Weidema, B. The Ecoinvent Database Version 3 (Part I): Overview and Methodology. *Int J Life Cycle Assess* **2016**, 21 (9), 1218–1230. <https://doi.org/10.1007/s11367-016-1087-8>.
- (170) Swarr, T. E.; Hunkeler, D.; Klöpffer, W.; Pesonen, H.-L.; Ciroth, A.; Brent, A. C.; Pagan, R. Environmental Life-Cycle Costing: A Code of Practice. *Int J Life Cycle Assess* **2011**, 16 (5), 389–391. <https://doi.org/10.1007/s11367-011-0287-5>.
- (171) DIN EN 60300-1:2015-01, Zuverlässigkeitsmanagement_ - Teil_1: Leitfaden Für Management Und Anwendung (IEC_60300-1:2014); Deutsche Fassung EN_60300-1:2014. <https://doi.org/10.31030/2269102>.
- (172) DIN EN ISO 15663:2021-10, Erdöl-, Petrochemische Und Erdgasindustrie_ - Lebenszykluskostenrechnung (ISO_15663:2021); Englische Fassung EN_ISO_15663:2021. <https://doi.org/10.31030/3258421>.
- (173) Faertes, D. Reliability of Supply Chains and Business Continuity Management. *Procedia Computer Science* **2015**, 55, 1400–1409. <https://doi.org/10.1016/j.procs.2015.07.130>.
- (174) Woodward, D. G. Life Cycle Costing—Theory, Information Acquisition and Application. *International Journal of Project Management* **1997**, 15 (6), 335–344. [https://doi.org/10.1016/S0263-7863\(96\)00089-0](https://doi.org/10.1016/S0263-7863(96)00089-0).
- (175) DIN EN ISO 14040:2009-11, Umweltmanagement_ - Ökobilanz_ - Grundsätze Und Rahmenbedingungen (ISO_14040:2006); Deutsche Und Englische Fassung EN_ISO_14040:2006. <https://doi.org/10.31030/1555059>.
- (176) DIN EN ISO 14044:2018-05, Umweltmanagement_ - Ökobilanz_ - Anforderungen Und Anleitungen (ISO_14044:2006_ + Amd_1:2017); Deutsche Fassung EN_ISO_14044:2006_ + A1:2018. <https://doi.org/10.31030/2761237>.
- (177) DIN EN ISO 14045:2012-10, Umweltmanagement_ - Ökoeffizienzbewertung von Produktsystemen_ - Prinzipien, Anforderungen Und Leitlinien (ISO_14045:2012); Deutsche Und Englische Fassung EN_ISO_14045:2012. <https://doi.org/10.31030/1875112>.
- (178) Vor- und Nachteile verschiedener Energiespeichersysteme; Ausarbeitung WD 8-3000-032/14; Deutscher Bundestag - Wissenschaftlicher Dienst: Berlin, 2014; p 24. <https://www.bundestag.de/resource/blob/412904/ca2dd030254284687a1763059f1f4c0c/wd-8-032-14-pdf-data.pdf> (accessed 2024-09-21).
- (179) Ud-Din Khan, S.; Wazeer, I.; Almutairi, Z.; Alanazi, M. Techno-Economic Analysis of Solar Photovoltaic Powered Electrical Energy Storage (EES) System. *Alexandria Engineering Journal* **2022**, 61 (9), 6739–6753. <https://doi.org/10.1016/j.aej.2021.12.025>.
- (180) Poli, N.; Bonaldo, C.; Moretto, M.; Guarnieri, M. Techno-Economic Assessment of Future Vanadium Flow Batteries Based on Real Device/Market Parameters. *Applied Energy* **2024**, 362, 122954. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2024.122954>.
- (181) Resch, M.; Bühler, J.; Schachler, B.; Kunert, R.; Meier, A.; Sumper, A. Technical and Economic Comparison of Grid Supportive Vanadium Redox Flow Batteries for Primary Control Reserve and Community Electricity Storage in Germany. *Int J Energy Res* **2019**, 43 (1), 337–357. <https://doi.org/10.1002/er.4269>.
- (182) Gerlach, D.; Noack, J.; Bischof, K.; Le Boulch, C.; Trupp, S. Techno-Economic Optimization of Flow Batteries Using the Optimization Potential to Prioritize Different Optimization Possibilities. *J. Electrochem. Soc.* **2023**, 170 (6), 060540. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/acdda0>.
- (183) Tang, L.; Leung, P.; Mohamed, M. R.; Xu, Q.; Dai, S.; Zhu, X.; Flox, C.; Shah, A. A.; Liao, Q. Capital Cost Evaluation of Conventional and Emerging Redox Flow Batteries for Grid Storage Applications. *Electrochimica Acta* **2023**, 437, 141460. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2022.141460>.
- (184) Muna, Y. B.; Kuo, C.-C. Feasibility and Techno-Economic Analysis of Electric Vehicle Charging of PV/Wind/Diesel/Battery Hybrid Energy System with Different Battery Technology. *Energies* **2022**, 15 (12), 4364. <https://doi.org/10.3390/en15124364>.

- (185) Perry, M. L.; Darling, R. M.; Zaffou, R. High Power Density Redox Flow Battery Cells. *ECS Trans.* **2013**, 53 (7), 7–16. <https://doi.org/10.1149/05307.0007ecst>.
- (186) Aaron, D. S.; Liu, Q.; Tang, Z.; Grim, G. M.; Papandrew, A. B.; Turhan, A.; Zawodzinski, T. A.; Mench, M. M. Dramatic Performance Gains in Vanadium Redox Flow Batteries through Modified Cell Architecture. *Journal of Power Sources* **2012**, 206, 450–453. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.12.026>.
- (187) Noack, J.; Tübke, J. A Comparison of Materials and Treatment of Materials for Vanadium Redox Flow Battery. *ECS Trans.* **2010**, 25 (35), 235–245. <https://doi.org/10.1149/1.3414022>.
- (188) Bird, C. L.; Kuhn, A. T. Electrochemistry of the Viologens. *Chem. Soc. Rev.* **1981**, 10 (1), 49. <https://doi.org/10.1039/cs9811000049>.
- (189) Hooper-Burkhardt, L.; Krishnamoorthy, S.; Yang, B.; Murali, A.; Nirmalchandar, A.; Prakash, G. K. S.; Narayanan, S. R. A New Michael-Reaction-Resistant Benzoquinone for Aqueous Organic Redox Flow Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2017**, 164 (4), A600–A607. <https://doi.org/10.1149/2.0351704jes>.
- (190) Minke, C.; Kunz, U.; Turek, T. Techno-Economic Assessment of Novel Vanadium Redox Flow Batteries with Large-Area Cells. *Journal of Power Sources* **2017**, 361, 105–114. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.06.066>.
- (191) Darling, R. M.; Weber, A. Z.; Tucker, M. C.; Perry, M. L. The Influence of Electric Field on Crossover in Redox-Flow Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2016**, 163 (1), A5014–A5022. <https://doi.org/10.1149/2.0031601jes>.
- (192) Hao, L.; Wang, Y.; He, Y. Modeling of Ion Crossover in an All-Vanadium Redox Flow Battery with the Interfacial Effect at Membrane/Electrode Interfaces. *J. Electrochem. Soc.* **2019**, 166 (8), A1310–A1322. <https://doi.org/10.1149/2.1061906jes>.
- (193) Xu, B.; Lee, J.; Kwon, D.; Kong, L.; Pecht, M. Mitigation Strategies for Li-Ion Battery Thermal Runaway: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **2021**, 150, 111437. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111437>.
- (194) Battery System Modeling; Elsevier, 2021. <https://doi.org/10.1016/C2020-0-03232-9>.
- (195) Derr, I. Electrochemical Degradation and Chemical Aging of Carbon Felt Electrodes in All-Vanadium Redox Flow Batteries. *Freie Universität Berlin* 2017, p IX, 57, 20 Seiten. <https://doi.org/10.17169/REFUBIUM-17532>.
- (196) Birkel, C. R.; Roberts, M. R.; McTurk, E.; Bruce, P. G.; Howey, D. A. Degradation Diagnostics for Lithium Ion Cells. *Journal of Power Sources* **2017**, 341, 373–386. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.12.011>.
- (197) Zhang, C.; Zhang, L.; Ding, Y.; Peng, S.; Guo, X.; Zhao, Y.; He, G.; Yu, G. Progress and Prospects of Next-Generation Redox Flow Batteries. *Energy Storage Materials* **2018**, 15, 324–350. <https://doi.org/10.1016/j.ensm.2018.06.008>.
- (198) Zhang, N.; Li, R.; Jiang, Y. Cost-Benefits Analysis of Battery Storage System for Industry Consumers Based on Different Operation Modes. In 2018 IEEE 2nd International Electrical and Energy Conference (CIEEC); IEEE: Beijing, China, 2018; pp 527–531. <https://doi.org/10.1109/CIEEC.2018.8745915>.
- (199) Hittinger, E.; Ciez, R. E. Modeling Costs and Benefits of Energy Storage Systems. *Annu. Rev. Environ. Resour.* **2020**, 45 (1), 445–469. <https://doi.org/10.1146/annurev-environ-012320-082101>.
- (200) Zou, W.-J.; Jung, H.-Y.; Jung, S. Modeling and Performance Optimization of Vanadium Redox Flow Batteries. *Journal of Energy Storage* **2025**, 121, 116601. <https://doi.org/10.1016/j.est.2025.116601>.
- (201) Chen, R.; Kim, S.; Chang, Z. Redox Flow Batteries: Fundamentals and Applications. In *Redox - Principles and Advanced Applications*; Khalid, M. A. A., Ed.; InTech, 2017. <https://doi.org/10.5772/intechopen.68752>.
- (202) Beavers, O. Mitigating Spreadsheet Model Risk with Python Open Source Infrastructure. **2018**. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1801.09771>.

- (203) Wilson, G.; Aruliah, D. A.; Brown, C. T.; Chue Hong, N. P.; Davis, M.; Guy, R. T.; Haddock, S. H. D.; Huff, K. D.; Mitchell, I. M.; Plumbley, M. D.; Waugh, B.; White, E. P.; Wilson, P. Best Practices for Scientific Computing. *PLoS Biol* **2014**, 12 (1), e1001745.
<https://doi.org/10.1371/journal.pbio.1001745>.
- (204) Litt, S. Mitigating Spreadsheet Risk in Complex Multi-Dimensional Models in Excel. **2018**.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.1802.01640>.
- (205) Wu, M.; Perov, Y.; Wood, F.; Yang, H. Spreadsheet Probabilistic Programming. *arXiv* 2016.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.1606.04216>.
- (206) Bartholomew, P. Excel as a Turing-Complete Functional Programming Environment. *arXiv* August 31, 2023. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2309.00115>.
- (207) Baio, G.; Heath, A. When Simple Becomes Complicated: Why Excel Should Lose Its Place at the Top Table. *Global & Regional Health Technology Assessment* **2017**, 4 (1), grhta.5000247.
<https://doi.org/10.5301/grhta.5000247>.
- (208) Perkel, J. M. Programming: Pick up Python. *Nature* **2015**, 518 (7537), 125–126.
<https://doi.org/10.1038/518125a>.
- (209) Millman, K. J.; Aivazis, M. Python for Scientists and Engineers. *Comput. Sci. Eng.* **2011**, 13 (2), 9–12. <https://doi.org/10.1109/mcse.2011.36>.
- (210) Lutz, M. *Learning Python*, Fifth edition.; O'Reilly: Beijing, 2013.
- (211) Oliphant, T. E. Python for Scientific Computing. *Comput. Sci. Eng.* **2007**, 9 (3), 10–20.
<https://doi.org/10.1109/mcse.2007.58>.
- (212) Perez, F.; Granger, B. E. IPython: A System for Interactive Scientific Computing. *Comput. Sci. Eng.* **2007**, 9 (3), 21–29. <https://doi.org/10.1109/mcse.2007.53>.
- (213) Petersohn, D.; Macke, S.; Xin, D.; Ma, W.; Lee, D.; Mo, X.; Gonzalez, J. E.; Hellerstein, J. M.; Joseph, A. D.; Parameswaran, A. Towards Scalable Dataframe Systems. *arXiv* 2020.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2001.00888>.
- (214) Harris, C. R.; Millman, K. J.; Van Der Walt, S. J.; Gommers, R.; Virtanen, P.; Cournapeau, D.; Wieser, E.; Taylor, J.; Berg, S.; Smith, N. J.; Kern, R.; Picus, M.; Hoyer, S.; Van Kerkwijk, M. H.; Brett, M.; Haldane, A.; Del Río, J. F.; Wiebe, M.; Peterson, P.; Gérard-Marchant, P.; Sheppard, K.; Reddy, T.; Weckesser, W.; Abbasi, H.; Gohlke, C.; Oliphant, T. E. Array Programming with NumPy. *Nature* **2020**, 585 (7825), 357–362. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>.
- (215) Virtanen, P.; Gommers, R.; Oliphant, T. E.; Haberland, M.; Reddy, T.; Cournapeau, D.; Burovski, E.; Peterson, P.; Weckesser, W.; Bright, J.; Van Der Walt, S. J.; Brett, M.; Wilson, J.; Millman, K. J.; Mayorov, N.; Nelson, A. R. J.; Jones, E.; Kern, R.; Larson, E.; Carey, C. J.; Polat, İ.; Feng, Y.; Moore, E. W.; VanderPlas, J.; Laxalde, D.; Perktold, J.; Cimrman, R.; Henriksen, I.; Quintero, E. A.; Harris, C. R.; Archibald, A. M.; Ribeiro, A. H.; Pedregosa, F.; Van Mulbregt, P.; SciPy 1.0 Contributors; Vijaykumar, A.; Bardelli, A. P.; Rothberg, A.; Hilboll, A.; Kloeckner, A.; Scopatz, A.; Lee, A.; Rokem, A.; Woods, C. N.; Fulton, C.; Masson, C.; Häggström, C.; Fitzgerald, C.; Nicholson, D. A.; Hagen, D. R.; Pasechnik, D. V.; Olivetti, E.; Martin, E.; Wieser, E.; Silva, F.; Lenders, F.; Wilhelm, F.; Young, G.; Price, G. A.; Ingold, G.-L.; Allen, G. E.; Lee, G. R.; Audren, H.; Probst, I.; Dietrich, J. P.; Silterra, J.; Webber, J. T.; Slavič, J.; Nothman, J.; Buchner, J.; Kulick, J.; Schönberger, J. L.; De Miranda Cardoso, J. V.; Reimer, J.; Harrington, J.; Rodríguez, J. L. C.; Nunez-Iglesias, J.; Kuczynski, J.; Tritz, K.; Thoma, M.; Newville, M.; Kümmerer, M.; Bolingbroke, M.; Tartre, M.; Pak, M.; Smith, N. J.; Nowaczyk, N.; Shebanov, N.; Pavlyk, O.; Brodtkorb, P. A.; Lee, P.; McGibbon, R. T.; Feldbauer, R.; Lewis, S.; Tygier, S.; Sievert, S.; Vigna, S.; Peterson, S.; More, S.; Pudlik, T.; Oshima, T.; Pingel, T. J.; Robitaille, T. P.; Spura, T.; Jones, T. R.; Cera, T.; Leslie, T.; Zito, T.; Krauss, T.; Upadhyay, U.; Halchenko, Y. O.; Vázquez-Baeza, Y. *SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. Nat Methods* **2020**, 17 (3), 261–272.
<https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>.
- (216) McKinney, W. Data Structures for Statistical Computing in Python. In *Proceedings of the Python in Science Conference; SciPy: Austin, Texas, 2010*; pp 56–61.
<https://doi.org/10.25080/majora-92bf1922-00a>.

- (217) Global Sensitivity Analysis: The Primer; Saltelli, A., Ed.; John Wiley: Chichester, England Hoboken, NJ, 2008. <https://doi.org/10.1002/9780470725184>.
- (218) Saini, M.; Kumar, R. Exploring Data Visualization and Analysis with Matplotlib. *IJPR* **2019**, 2189–2194. <https://doi.org/10.61841/v23i4/400326>.
- (219) Waskom, M. Seaborn: Statistical Data Visualization. *JOSS* **2021**, 6 (60), 3021. <https://doi.org/10.21105/joss.03021>.
- (220) Nassereldine, A.; Chen, P.; Xiong, J. Excel Spreadsheet Analyzer. arXiv November 1, 2022. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.06333>.
- (221) Lund, B.; Agbaji, D.; Bissadu, K. D.; Chen, H. Python for Information Professionals: How to Design Applications to Capitalize on the Data Explosion; Rowman & Littlefield: Lanham Boulder New York London, 2024.
- (222) Peng, R. D. Reproducible Research in Computational Science. *Science* **2011**, 334 (6060), 1226–1227. <https://doi.org/10.1126/science.1213847>.
- (223) Wang, S.; Liu, D.; Wang, N.; Yuan, Y. Design and Implementation of an Online Python Teaching Case Library for the Training of Application-Oriented Talents. *Int. J. Emerg. Technol. Learn.* **2020**, 15 (21), 217. <https://doi.org/10.3991/ijet.v15i21.18191>.
- (224) Kirsan, A. S.; Takano, K.; Zebada Mansurina, S. T. EksPy: A New Python Framework for Developing Graphical User Interface Based PyQt5. *IJECE* **2024**, 14 (1), 520. <https://doi.org/10.11591/ijece.v14i1.pp520-531>.
- (225) Bayly, D.; Kruse, B.; Reidy, C. Streamlit App for Cluster Publication Impact Exploration. In Practice and Experience in Advanced Research Computing 2024: Human Powered Computing; ACM: Providence RI USA, 2024; pp 1–4. <https://doi.org/10.1145/3626203.3670633>.
- (226) Kumar, U. V.; K. Koteswararao; Lahari, J. K.; Teja, G. T.; Kalyani, K. V.; K. Ganesh. STREAMLIT - POWERED DATA SCIENCE VISUALIZING CRYPTOCURRENCY MARKETS. *JNAO* **2025**, 16 (01), 169–174. <https://doi.org/10.36893/jnao.2025.v16.i01.022>.
- (227) Nápoles-Duarte, J. M.; Biswas, A.; Parker, M. I.; Palomares-Baez, J. P.; Chávez-Rojó, M. A.; Rodríguez-Valdez, L. M. Stmol: A Component for Building Interactive Molecular Visualizations within Streamlit Web-Applications. *Front. Mol. Biosci.* **2022**, 9. <https://doi.org/10.3389/fmolb.2022.990846>.
- (228) Lombardo, R. Python and Plotly Dash, A Quick and Convenient Way to Develop Web Apps for Teaching Physical Chemistry Models. *J. Chem. Educ.* **2024**, 101 (11), 4661–4670. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.3c01167>.
- (229) Hamann, C. H.; Vielstich, W. *Elektrochemie*, 4., vollst. überarb. und aktualisierte Aufl.; Wiley-VCH: Weinheim, 2005.
- (230) Ohm, G. S. *Die galvanische Kette*; T. D. Riemann: Berlin, 1827.
- (231) Adenusi, H.; Chass, G. A.; Passerini, S.; Tian, K. V.; Chen, G. Lithium Batteries and the Solid Electrolyte Interphase (SEI)—Progress and Outlook. *Advanced Energy Materials* **2023**, 13 (10), 2203307. <https://doi.org/10.1002/aenm.202203307>.
- (232) Knehr, K. W.; Kumbur, E. C. Open Circuit Voltage of Vanadium Redox Flow Batteries: Discrepancy between Models and Experiments. *Electrochemistry Communications* **2011**, 13 (4), 342–345. <https://doi.org/10.1016/j.elecom.2011.01.020>.
- (233) Darling, R.; Gallagher, K.; Xie, W.; Su, L.; Brushett, F. Transport Property Requirements for Flow Battery Separators. *J. Electrochem. Soc.* **2016**, 163 (1), A5029–A5040. <https://doi.org/10.1149/2.0051601jes>.
- (234) Tarumi, M.; Matsuzaki, Y.; Suzuki, K. Theoretical Study on the Redox Reaction Mechanism of Quinone Compounds in Industrial Processes. *Chemical Engineering Science* **2019**, 199, 381–387. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.01.006>.
- (235) Bhattarai, A.; Ghimire, P. C.; Whitehead, A.; Schweiss, R.; Scherer, G. G.; Wai, N.; Hng, H. H. Novel Approaches for Solving the Capacity Fade Problem during Operation of a Vanadium Redox Flow Battery. *Batteries* **2018**, 4 (4), 48. <https://doi.org/10.3390/batteries4040048>.

- (236) Kim, D. K.; Yoon, S. J.; Kim, S. Transport Phenomena Associated with Capacity Loss of All-Vanadium Redox Flow Battery. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **2020**, *148*, 119040. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.119040>.
- (237) Poli, N.; Trovò, A.; Guarnieri, M. Rebalancing/Regeneration of Vanadium Flow Batteries. In *Flow Batteries*; Roth, C., Noack, J., Skyllas-Kazacos, M., Eds.; Wiley, 2023; pp 641–657. <https://doi.org/10.1002/9783527832767.ch28>.
- (238) Modak, S. V.; Shen, W.; Singh, S.; Herrera, D.; Oudeif, F.; Goldsmith, B. R.; Huan, X.; Kwabi, D. G. Understanding Capacity Fade in Organic Redox-Flow Batteries by Combining Spectroscopy with Statistical Inference Techniques. *Nat Commun* **2023**, *14* (1), 3602. <https://doi.org/10.1038/s41467-023-39257-z>.
- (239) Zou, W.-J.; Kim, Y.-B.; Jung, S. Capacity Fade Prediction for Vanadium Redox Flow Batteries during Long-Term Operations. *Applied Energy* **2024**, *356*, 122329. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2023.122329>.
- (240) Won, S.; Oh, K.; Ju, H. Numerical Analysis of Vanadium Crossover Effects in All-Vanadium Redox Flow Batteries. *Electrochimica Acta* **2015**, *177*, 310–320. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2015.01.166>.
- (241) Thiam, B. G.; Vaudreuil, S. Review—Recent Membranes for Vanadium Redox Flow Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2021**, *168* (7), 070553. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac163c>.
- (242) Yang, Y.; Wang, Q.; Xiong, S.; Song, Z. Research Progress on Optimized Membranes for Vanadium Redox Flow Batteries. *Inorg. Chem. Front.* **2024**, *11* (14), 4049–4079. <https://doi.org/10.1039/D4QI00520A>.
- (243) Remmler, N.; Bron, M. Recent Progress in Our Understanding of the Degradation of Carbon-Based Electrodes in Vanadium Redox Flow Batteries – Current Status and Next Steps. *ChemElectroChem* **2024**, *11* (15), e202400127. <https://doi.org/10.1002/celc.202400127>.
- (244) Nourani, M.; Dennison, C. R.; Jin, X.; Liu, F.; Agar, E. Elucidating Effects of Faradaic Imbalance on Vanadium Redox Flow Battery Performance: Experimental Characterization. *J. Electrochem. Soc.* **2019**, *166* (15), A3844–A3851. <https://doi.org/10.1149/2.0851915jes>.
- (245) Eifert, L.; Jusys, Z.; Behm, R. J.; Zeis, R. Side Reactions and Stability of Pre-Treated Carbon Felt Electrodes for Vanadium Redox Flow Batteries: A DEMS Study. *Carbon* **2020**, *158*, 580–587. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.11.029>.
- (246) Pichugov, R.; Loktionov, P.; Verakso, D.; Pustovalova, A.; Chikin, D.; Antipov, A. Sensitivity of Capacity Fade in Vanadium Redox Flow Battery to Electrolyte Impurity Content. *ChemPlusChem* **2024**, *89* (12), e202400372. <https://doi.org/10.1002/cplu.202400372>.
- (247) Petrov, M. M.; Modestov, A. D.; Konev, D. V.; Antipov, A. E.; Loktionov, P. A.; Pichugov, R. D.; Kartashova, N. V.; Glazkov, A. T.; Abunaeva, L. Z.; Andreev, V. N.; Vorotyntsev, M. A. Redox Flow Batteries: Role in Modern Electric Power Industry and Comparative Characteristics of the Main Types. *Russ. Chem. Rev.* **2021**, *90* (6), 677–702. <https://doi.org/10.1070/RCR4987>.
- (248) Alem, A.; Poormehrabi, P.; Lins, J.; Pachernegg-Mair, L.; Bandl, C.; Ruiz, V.; Ventosa, E.; Spirk, S.; Gutmann, T. Monitoring Chemical Processes in Redox Flow Batteries Employing in Situ and in Operando Analyses. *Energy Environ. Sci.* **2025**, *18* (15), 7373–7401. <https://doi.org/10.1039/D5EE01311A>.
- (249) Ren, Y.; Zheng, Q.; He, C.; Nie, J.; Du, B. Design of TEMPO-Based Polymer Cathode Materials for pH-Neutral Aqueous Organic Redox Flow Batteries. *Materials* **2025**, *18* (15), 3624. <https://doi.org/10.3390/ma18153624>.
- (250) Cannon, C. G.; Klusener, P. A. A.; Brandon, N. P.; Kucernak, A. R. J. Aqueous Redox Flow Batteries: Small Organic Molecules for the Positive Electrolyte Species. *ChemSusChem* **2023**, *16* (18), e202300303. <https://doi.org/10.1002/cssc.202300303>.
- (251) Rodby, K.; Perry, M.; Brushett, F. Assessing Capacity Loss Remediation Methods for Asymmetric Redox Flow Battery Chemistries Using Levelized Cost of Storage. November 20, 2020. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv.13260233.v1>.

- (252) Jafari, M.; Sakti, A.; Botterud, A. Optimization of Electrolyte Rebalancing in Vanadium Redox Flow Batteries. *arXiv* 2021. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2107.03339>.
- (253) Ahn, S.; Yun, A.; Ko, D.; Singh, V.; Joo, J. M.; Byon, H. R. Organic Redox Flow Batteries in Non-Aqueous Electrolyte Solutions. *Chem. Soc. Rev.* **2025**, 54 (2), 742–789. <https://doi.org/10.1039/D4CS00585F>.
- (254) Hasan, F.; Mahanta, V.; Abdelazeez, A. A. A. Quinones for Aqueous Organic Redox Flow Battery: A Prospective on Redox Potential, Solubility, and Stability. *Adv Materials Inter* **2023**, 10 (24), 2300268. <https://doi.org/10.1002/admi.202300268>.
- (255) Murali, A.; Nirmalchandar, A.; Krishnamoorthy, S.; Hooper-Burkhardt, L.; Yang, B.; Soloveichik, G.; Prakash, G. K. S.; Narayanan, S. R. Understanding and Mitigating Capacity Fade in Aqueous Organic Redox Flow Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2018**, 165 (7), A1193–A1203. <https://doi.org/10.1149/2.0161807jes>.
- (256) Leung, P.; Shah, A. A.; Sanz, L.; Flox, C.; Morante, J. R.; Xu, Q.; Mohamed, M. R.; Ponce De León, C.; Walsh, F. C. Recent Developments in Organic Redox Flow Batteries: A Critical Review. *Journal of Power Sources* **2017**, 360, 243–283. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.05.057>.
- (257) Tempelman, C. H. L.; Jacobs, J. F.; Balzer, R. M.; Degirmenci, V. Membranes for All Vanadium Redox Flow Batteries. *Journal of Energy Storage* **2020**, 32, 101754. <https://doi.org/10.1016/j.est.2020.101754>.
- (258) Tsehay, M. T.; Tufa, R. A.; Berhane, R.; Dehbol, F.; Gebru, K. A.; Velizarov, S. Modified Membranes for Redox Flow Batteries—A Review. *Membranes* **2023**, 13 (9), 777. <https://doi.org/10.3390/membranes13090777>.
- (259) Janoschka, T.; Martin, N.; Martin, U.; Friebe, C.; Morgenstern, S.; Hiller, H.; Hager, M. D.; Schubert, U. S. An Aqueous, Polymer-Based Redox-Flow Battery Using Non-Corrosive, Safe, and Low-Cost Materials. *Nature* **2015**, 527 (7576), 78–81. <https://doi.org/10.1038/nature15746>.
- (260) Kwabi, D. G.; Lin, K.; Ji, Y.; Kerr, E. F.; Goulet, M.-A.; De Porcellinis, D.; Tabor, D. P.; Pollack, D. A.; Aspuru-Guzik, A.; Gordon, R. G.; Aziz, M. J. Alkaline Quinone Flow Battery with Long Lifetime at pH 12. *Joule* **2018**, 2 (9), 1894–1906. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2018.07.005>.
- (261) Goulet, M.-A.; Aziz, M. J. Flow Battery Molecular Reactant Stability Determined by Symmetric Cell Cycling Methods. *J. Electrochem. Soc.* **2018**, 165 (7), A1466–A1477. <https://doi.org/10.1149/2.0891807jes>.
- (262) Wang, X.; Gautam, R. K.; Jiang, J. “Jimmy.” Strategies for Improving Solubility of Redox-Active Organic Species in Aqueous Redox Flow Batteries: A Review. *Batteries & Supercaps* **2022**, 5 (11), e202200298. <https://doi.org/10.1002/batt.202200298>.
- (263) Lin, K.; Gómez-Bombarelli, R.; Beh, E. S.; Tong, L.; Chen, Q.; Valle, A.; Aspuru-Guzik, A.; Aziz, M. J.; Gordon, R. G. A Redox-Flow Battery with an Alloxazine-Based Organic Electrolyte. *Nat Energy* **2016**, 1 (9), 16102. <https://doi.org/10.1038/nenergy.2016.102>.
- (264) Fornari, R. P.; Mesta, M.; Hjelm, J.; Vegge, T.; De Silva, P. Molecular Engineering Strategies for Symmetric Aqueous Organic Redox Flow Batteries. *ACS Materials Lett.* **2020**, 2 (3), 239–246. <https://doi.org/10.1021/acsmaterialslett.0c00028>.
- (265) Ding, Y.; Zhang, C.; Zhang, L.; Zhou, Y.; Yu, G. Molecular Engineering of Organic Electroactive Materials for Redox Flow Batteries. *Chem. Soc. Rev.* **2018**, 47 (1), 69–103. <https://doi.org/10.1039/C7CS00569E>.
- (266) Iwakiri, I.; Antunes, T.; Almeida, H.; Sousa, J. P.; Figueira, R. B.; Mendes, A. Redox Flow Batteries: Materials, Design and Prospects. *Energies* **2021**, 14 (18), 5643. <https://doi.org/10.3390/en14185643>.
- (267) Derr, I.; Bruns, M.; Langner, J.; Fetyan, A.; Melke, J.; Roth, C. Degradation of All-Vanadium Redox Flow Batteries (VRFB) Investigated by Electrochemical Impedance and X-Ray Photoelectron Spectroscopy: Part 2 Electrochemical Degradation. *Journal of Power Sources* **2016**, 325, 351–359. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.06.040>.

- (268) Jiang, H. R.; Sun, J.; Wei, L.; Wu, M. C.; Shyy, W.; Zhao, T. S. A High Power Density and Long Cycle Life Vanadium Redox Flow Battery. *Energy Storage Materials* **2020**, *24*, 529–540. <https://doi.org/10.1016/j.ensm.2019.07.005>.
- (269) Li, Z.; Xi, J.; Liu, L.; Wu, Z.; Li, D. Method of Reflow and Online Electrolysis in the Vanadium Redox Battery: Benefits and Limitations. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2020**, *8* (27), 10275–10283. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.0c03297>.
- (270) Schafner, K.; Becker, M.; Turek, T. Capacity Balancing for Vanadium Redox Flow Batteries through Continuous and Dynamic Electrolyte Overflow. *J Appl Electrochem* **2021**, *51* (8), 1217–1228. <https://doi.org/10.1007/s10800-021-01572-y>.
- (271) Poli, N.; Schäffer, M.; Trovò, A.; Noack, J.; Guarnieri, M.; Fischer, P. Novel Electrolyte Rebalancing Method for Vanadium Redox Flow Batteries. *Chemical Engineering Journal* **2021**, *405*, 126583. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.126583>.
- (272) DeBruler, C.; Hu, B.; Moss, J.; Luo, J.; Liu, T. L. A Sulfonate-Functionalized Viologen Enabling Neutral Cation Exchange, Aqueous Organic Redox Flow Batteries toward Renewable Energy Storage. *ACS Energy Lett.* **2018**, *3* (3), 663–668. <https://doi.org/10.1021/acsenenergylett.7b01302>.
- (273) Wei, X.; Pan, W.; Duan, W.; Hollas, A.; Yang, Z.; Li, B.; Nie, Z.; Liu, J.; Reed, D.; Wang, W.; Sprenkle, V. Materials and Systems for Organic Redox Flow Batteries: Status and Challenges. *ACS Energy Lett.* **2017**, *2* (9), 2187–2204. <https://doi.org/10.1021/acsenenergylett.7b00650>.
- (274) Raihan, M. A.; Dyker, C. A. Status and Prospects for Symmetric Organic Redox Flow Batteries. *Journal of Energy Chemistry* **2025**, *100*, 125–143. <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2024.08.016>.
- (275) Dieckhoff, C.; Fichtner, W.; Grunwald, A.; Meyer, S.; Nast, M.; Nierling, L.; Renn, O.; Voß, A.; Wietschel, M. *Energieszenarien: Konstruktion, Bewertung und Wirkung - “Anbieter” und “Nachfrager” im Dialog*; KIT Scientific Publishing, 2011. <https://doi.org/10.5445/KSP/1000021684>.
- (276) Möst, D.; Keles, D. A Survey of Stochastic Modelling Approaches for Liberalised Electricity Markets. *European Journal of Operational Research* **2010**, *207* (2), 543–556. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2009.11.007>.
- (277) Boskamp, A. M. *Der Einfluss schwer quantifizierbarer Entscheidungsfaktoren auf die Investitionstätigkeit im Umweltbereich*, Vienna University of Economics and Business, 2014. <https://doi.org/10.57938/40E56294-FC59-4968-9867-1EDEC770C411>.
- (278) Arenas, L. F.; Ponce de León, C.; Walsh, F. C. Critical Review—The Versatile Plane Parallel Electrode Geometry: An Illustrated Review. *J. Electrochem. Soc.* **2020**, *167* (2), 023504. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ab64ba>.
- (279) Petranikova, M.; Tkaczyk, A. H.; Bartl, A.; Amato, A.; Lapkovskis, V.; Tunsu, C. Vanadium Sustainability in the Context of Innovative Recycling and Sourcing Development. *Waste Management* **2020**, *113*, 521–544. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2020.04.007>.
- (280) Historical Statistics for Mineral and Material Commodities in the United States | U.S. Geological Survey. <https://www.usgs.gov/centers/national-minerals-information-center/historical-statistics-mineral-and-material-commodities> (accessed 2022-08-16).
- (281) Gubler, L. Membranes and Separators for Redox Flow Batteries. *Current Opinion in Electrochemistry* **2019**, *18*, 31–36. <https://doi.org/10.1016/j.coelec.2019.08.007>.
- (282) Yuan, Z.; Duan, Y.; Zhang, H.; Li, X.; Zhang, H.; Vankelecom, I. Advanced Porous Membranes with Ultra-High Selectivity and Stability for Vanadium Flow Batteries. *Energy Environ. Sci.* **2016**, *9* (2), 441–447. <https://doi.org/10.1039/C5EE02896E>.
- (283) Düerkop, D.; Widdecke, H.; Schilde, C.; Kunz, U.; Schmiemann, A. Polymer Membranes for All-Vanadium Redox Flow Batteries: A Review. *Membranes* **2021**, *11* (3), 214. <https://doi.org/10.3390/membranes11030214>.
- (284) Düerkop, D.; Widdecke, H.; Kunz, U.; Schilde, C.; Schmiemann, A. Low-Cost Membranen für die Vanadium-Redox-Flow-Batterie. *Chemie Ingenieur Technik* **2021**, *93* (9), 1445–1450. <https://doi.org/10.1002/cite.202100033>.

- (285) Polini, M.; Guinea, F.; Lewenstein, M.; Manoharan, H. C.; Pellegrini, V. Artificial Graphene as a Tunable Dirac Material. *Nature Nanotech* **2013**, 8 (9), 625–633. <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.161>.
- (286) Minke, C.; Kunz, U.; Turek, T. Carbon Felt and Carbon Fiber - A Techno-Economic Assessment of Felt Electrodes for Redox Flow Battery Applications. *Journal of Power Sources* **2017**, 342, 116–124. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.12.039>.
- (287) Zagórski, K.; Wachowski, S.; Szymczewska, D.; Mielewczyk-Gryń, A.; Jasiński, P.; Gazda, M. Performance of a Single Layer Fuel Cell Based on a Mixed Proton-Electron Conducting Composite. *Journal of Power Sources* **2017**, 353, 230–236. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.04.007>.
- (288) Sun, C.-N.; Delnick, F. M.; Baggetto, L.; Veith, G. M.; Zawodzinski, T. A. Hydrogen Evolution at the Negative Electrode of the All-Vanadium Redox Flow Batteries. *Journal of Power Sources* **2014**, 248, 560–564. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.09.125>.
- (289) Kim, S. J.; Yun, D. W.; Jung, H. G.; Kim, K. Y. Determination of Hydrogen Diffusion Parameters of Ferritic Steel from Electrochemical Permeation Measurement under Tensile Loads. *J. Electrochem. Soc.* **2014**, 161 (12), E173–E181. <https://doi.org/10.1149/2.1021412jes>.
- (290) Liu, Y.; Hong, D.; Wu, J.; Shen, Z.; Gao, R.; Liu, J.; Liu, Z.; Zhang, X.; Han, X.; Ran, J. A Highly Soluble Two-Electron Storage Viologen Negolyte for Neutral Aqueous Organic Redox Flow Batteries. *ACS Omega* **2025**, acsomega.4c11656. <https://doi.org/10.1021/acsomega.4c11656>.
- (291) Zhao, Z.; Zhang, C.; Li, X. Opportunities and Challenges of Organic Flow Battery for Electrochemical Energy Storage Technology. *Journal of Energy Chemistry* **2022**, 67, 621–639. <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2021.10.037>.
- (292) Sankaralingam, R. K.; Seshadri, S.; Sunarso, J.; Bhatt, A. I.; Kapoor, A. Overview of the Factors Affecting the Performance of Vanadium Redox Flow Batteries. *Journal of Energy Storage* **2021**, 41, 102857. <https://doi.org/10.1016/j.est.2021.102857>.
- (293) Talebian, R.; Pourian, A.; Zakerabbasi, P.; Maghsoudy, S.; Habibzadeh, S. Insights into Energy Efficiency for Vanadium Redox Flow Battery (VRFB) Using the Artificial Intelligence Technique. *Applied Energy* **2025**, 399, 126485. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2025.126485>.
- (294) Soloveichik, G. L. Flow Batteries: Current Status and Trends. *Chem. Rev.* **2015**, 115 (20), 11533–11558. <https://doi.org/10.1021/cr500720t>.
- (295) Chen, H.; Cong, G.; Lu, Y.-C. Recent Progress in Organic Redox Flow Batteries: Active Materials, Electrolytes and Membranes. *Journal of Energy Chemistry* **2018**, 27 (5), 1304–1325. <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2018.02.009>.
- (296) Davies, P. M. *Economies of scale: for clarinet in A, violin, cello and piano; Chester music*: London, 2003.
- (297) Crawford, A.; Viswanathan, V.; Stephenson, D.; Wang, W.; Thomsen, E.; Reed, D.; Li, B.; Balducci, P.; Kintner-Meyer, M.; Sprenkle, V. Comparative Analysis for Various Redox Flow Batteries Chemistries Using a Cost Performance Model. *Journal of Power Sources* **2015**, 293, 388–399. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.05.066>.
- (298) Gerlach, D.; Dev, R. S.; Trupp, S.; Noack, J. Techno-Economic Comparison of Standardized Inorganic and Organic Flow Batteries Based on the Electrolytes Vanadium, Mv/Tempol and Aqds/Bqds. 2024. <https://doi.org/10.2139/ssrn.4941038>.
- (299) Karmodak, N.; Andreussi, O. Catalytic Activity and Stability of Two-Dimensional Materials for the Hydrogen Evolution Reaction. *ACS Energy Lett.* **2020**, 5 (3), 885–891. <https://doi.org/10.1021/acsenerylett.9b02689>.
- (300) Del Barrio, M.; Fourmond, V. Redox (In)Activations of Metalloenzymes: A Protein Film Voltammetry Approach. *ChemElectroChem* **2019**, 6 (19), 4949–4962. <https://doi.org/10.1002/celc.201901028>.
- (301) Lin, K.; Chen, Q.; Gerhardt, M. R.; Tong, L.; Kim, S. B.; Eisenach, L.; Valle, A. W.; Hardee, D.; Gordon, R. G.; Aziz, M. J.; Marshak, M. P. Alkaline Quinone Flow Battery. *Science* **2015**, 349 (6255), 1529–1532. <https://doi.org/10.1126/science.aab3033>.

- (302) Tang, G.; Liu, Y.; Li, Y.; Peng, K.; Zuo, P.; Yang, Z.; Xu, T. Designing Robust Two-Electron Storage Extended Bipyridinium Anolytes for pH-Neutral Aqueous Organic Redox Flow Batteries. *JACS Au* **2022**, 2 (5), 1214–1222. <https://doi.org/10.1021/jacsau.2c00184>.
- (303) Wang, X.; Chai, J.; Devi, N.; Lashgari, A.; Chaturvedi, A.; Jiang, J. “Jimmy.” Two-Electron-Active Tetracyanoethylene for Nonaqueous Redox Flow Batteries. *J. Mater. Chem. A* **2021**, 9 (24), 13867–13873. <https://doi.org/10.1039/D1TA01365C>.
- (304) Sinclair, N. S.; Savinell, R. F.; Wainright, J. S. A Perspective on the Design and Scale up of a Novel Redox Flow Battery. *MRS Energy & Sustainability* **2022**, 9 (2), 387–391. <https://doi.org/10.1557/s43581-022-00046-8>.
- (305) Li, T.; Xing, F.; Liu, T.; Sun, J.; Shi, D.; Zhang, H.; Li, X. Cost, Performance Prediction and Optimization of a Vanadium Flow Battery by Machine-Learning. *Energy Environ. Sci.* **2020**, 13 (11), 4353–4361. <https://doi.org/10.1039/D0EE02543G>.
- (306) Gerlach, D.; Dev, R. S.; Davaasuren, G.; Bischof, K.; Le Boulch, C.; Noack, J. Cycle Data of Different Laboratory Flow Batteries Based on AQDS BQDS, MV TEMPOL and Vanadium Flow Battery, 2024. <https://doi.org/10.5281/ZENODO.10926884>.