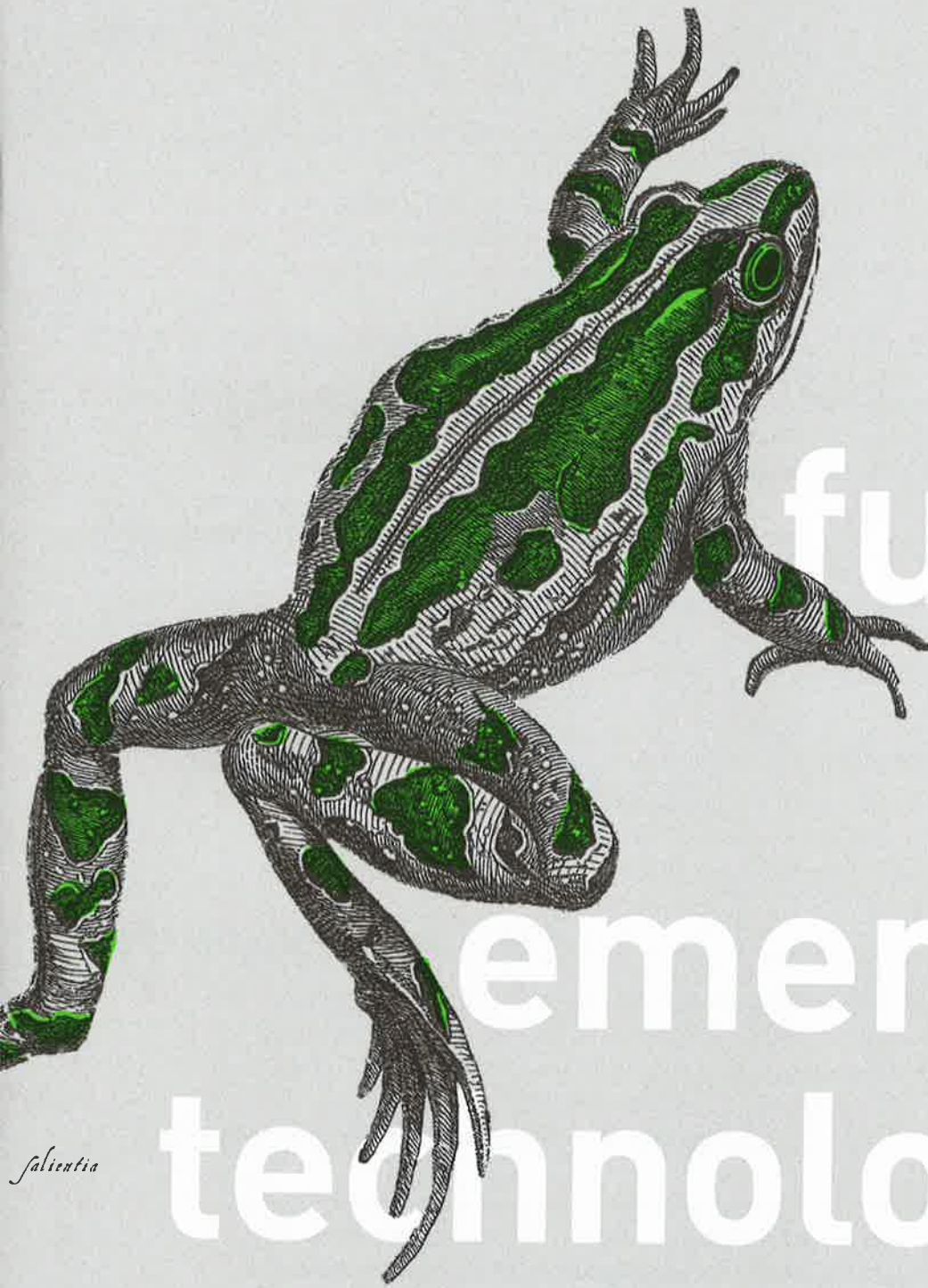


SCIENCE
BRUNCH

www.klimafonds.gv.at



fet²
future
and
emerging
technologies

05/2014

salientia

VORWORT

Seite 03

Neuartige Anodenmaterialien für Lithium-Ionen-Zellen

Seite 05

Das Projekt behandelt die Entwicklung von neuartigen Anodenmaterialien für Lithium-Ionen-Zellen, die ein großes Lithium-Speichervermögen bei gleichzeitig hoher Zyklenbelastbarkeit bieten. Hochporöse, nanostrukturierte Siliziumpartikel bzw. Li-Si-Legierungen mit hohem Lithiumanteil bieten hier die Basis.

Materialforschung für thermochemische Energiespeicher

Seite 11

Im Rahmen des Projekts werden Materialpaarungen für die thermochemische Energiespeicherung gefunden und getestet. Ein breit angelegtes Spektrum chemischer Analysemethoden stellt die genaue Charakterisierung der Stoffe sicher. Ziel des Projekts ist ein Katalog mit möglichen Speicherpaarungen.

Wasserstoffproduktion mittels künstlicher Photosynthese

Seite 17

Ziel des Projekts ist die photochemische Produktion von Wasserstoff aus Wasser. Mehrkernige Komplexe bieten dabei einen guten Zugang zu künstlicher Photosynthese. Chromophore und Katalysatoren mit hoher TON („Turn over number“) und TOF („Turn over frequency“) werden hergestellt.

Improved copper oxide heterojunction solar cells

Seite 25

The project aim is to develop an efficient solar cell by making use of low-cost materials and environmental friendly processes. Cu_2O has a significant photovoltaic potential and can be easily developed. Photonic nanostructures are used to catch the light within the absorber layer.

Erhöhung der Lichtausbeute von organischen LED's

Seite 31

Das Projekt beschäftigt sich mit der Erforschung von plasmonischen Strukturen und deren positive Auswirkungen auf Weißlicht emittierende organische Licht-emittierenden Dioden. Ergebnis ist die Realisierung einer OLED mit Erhöhung der Lichtausbeute von mehr als 30%.

3D-Solar: Effektiver Lichteinfang in Dünnschicht-Solarzellen

Seite 37

Im Mittelpunkt des Projekts steht die Entwicklung eines neuen Konzeptes für eine 3-dimensionale Solarzellenarchitektur. Dafür werden periodische Mikrostrukturen zum optimalen Lichteinfang mit lumineszierenden Farbstoffen und dünnen zweilagigen organischen Solarzellen kombiniert.

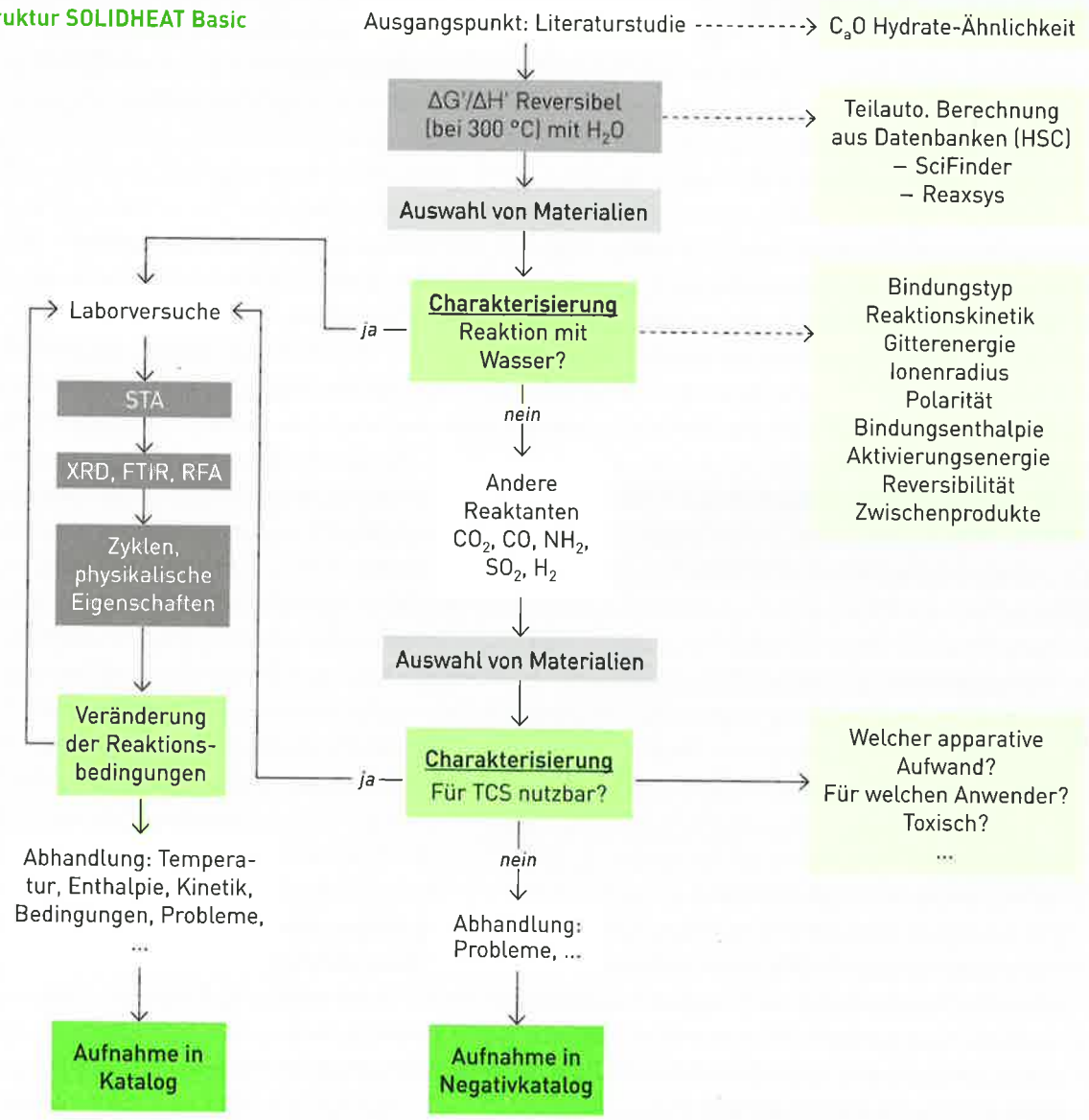
Alle geförderten Projekte im Überblick

Seite 42



Projektleitung: PETER WEINBERGER
TU Wien – Institut für angewandte Synthesechemie

Projektstruktur SOLIDHEAT Basic



Materialforschung für thermochemische Energiespeicher

SOLIDHEAT Basic

Einleitung

Die thermochemische Energiespeicherung stellt seit 20 Jahren den Anspruch einer der zukünftigen Energiespeicher zu sein, aufgrund von hoher Energiespeicherpotentialen und keinen Verlusten während der Speicherzeit.

Hierfür sind entsprechende Materialpaarungen zu identifizieren. Dies bedeutet, dass die Reaktionstemperatur innerhalb des Temperaturbereichs der Wärmequelle (für industrielle Abwärme etwa 350°C) sein sollte. Eine oberösterreichweite Abwärmeerhebung gelangte auf eine Leistung von 1 GW Abwärme im Bereich von 50-400°C. Damit ist eine ungefähre Abschätzung des vorhandenen Potentials an industrieller Abwärme möglich.

Weitere lohnende Anwendungsfelder für thermochemischen Energiespeicher könnten sein:

- A Saisonale Energiespeicher im Haushalt speichern Solarenergie aus dem Sommer für die Heizung im Winter.
- B Chemische Wärmepumpen verschieben Abwärme zu höheren, für industrielle Prozesse interessantere Temperaturen.
- C Speicherung von Solarenergie für Trocknungsanwendungen in der Landwirtschaft: Die Getreidearten Soja und Mais werden im Herbst gerettet und müssen in der Regel mit Gas, das mit chemisch-gespeicherter Wärmeenergie ersetzt werden könnte, getrocknet werden.

- D Nicht nur Industrieabwärme kann verwendet werden, auch aus mobilen Verbrennungsmotoren (PKW, LKW) könnte Abwärme zum Vorwärmen von Motor oder Kabine verwendet werden, zB. Dampfturbinen im Abgasstrom von LKW-Motoren (Nischenanwendung).

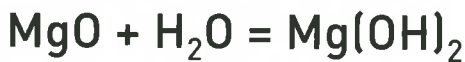
In einem Sondierungsprojekt dazu wurde im Rahmen einer Literaturstudie festgestellt, dass bei den verschiedenen Publikationen eine grundlegende Materialsuche fehlte und außerdem der Ausgangspunkt der Forschung immer institutionsnahe Energietechnik war.

Der neue Ansatz dieses Projekts ist eine software-unterstützte, grundlegende Materialsuche und eine Charakterisierung, die in Zusammenarbeit mit vier Chemieinstituten und einem Energietechnikinstitut durchgeführt wird. Im Zuge des Projekts soll auch eine Methodik entwickelt werden, wie potentielle Speicherstoffe zu charakterisieren sind.

Verfahren im Detail

Durch reversible Reaktionen kann aufgrund der freiwerdenden oder benötigten Reaktionsenthalpie Energie gespeichert oder rückgeführt werden. Eines der bekanntesten chemisch-reversiblen Reaktionen ist das Kalklöschchen $\text{CaO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{Ca}(\text{OH})_2$, wobei diese Reaktion bei atmosphärischen Bedingungen bei einer Temperatur von ca. 600°C Wärmeenergie speichern kann. Auch $\text{MgO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{Mg}(\text{OH})_2$,

Heat output <-- Hydration
storage density = 2 MJ/kg



<-- Dehydration <-- heat storage

welches für die Reaktion eine Temperatur von nur 300°C benötigt, ist in der industriellen Abwärmennutzung sehr gut einsetzbar.

Auf Basis der vorhandenen Stoffdatenbanken wird nun ein Suchalgorithmus entwickelt, um für verschiedene Temperaturbereiche alle chemisch möglichen Stoffpaare/Reaktionen herauszufiltern. Aus diesem ersten Pool an Stoffpaaren wird anschließend anhand der Kriterien Energieumsatz, Reaktionspartner, deren Verfügbarkeit sowie Aggregatzustände der beteiligten Reaktanten eine überschaubare Anzahl an Stoffpaaren herausgefiltert. Diese Auswahl wird noch nach ökonomischen Gesichtspunkten gereiht und die vielversprechendsten Stoffpaarungen werden schließlich mit verschiedenen nasschemischen Methoden im Labormaßstab untersucht.

Auswahlkriterien

Bindungstyp	Anteil ionisch Anteil kovalent
Reaktionskinetik	Makro: Diffusion Mikro: atomare Wechselwirkung der Teilchen – Dipol – Gitterenergie
Ionenradius	
Polarität	
Bindungsstärke	Bindungsenthalpie
Aktivierungsenergie	
Reversibilität	Zwischenprodukte

Unser innovativer Forschungsansatz

Um einen umfassenden Überblick über verfügbare chemische Substanzen zu erlangen, wird anhand von chemischen Datenbanken mit hinterlegten thermodynamischen Daten eine grobe Vorauswahl getroffen. Die teuren Laborversuche werden nur mit den laut Berechnung besten chemischen Substanzen durchgeführt.

Finden aller
Reaktionen mit
technischem Gas

Entfernen aller
nicht möglichen
Reaktionen

Bewerten nach
versch. Kriterien
(zB, Leistungsdichte)

Methodik

Als Ausgangspunkt werden die Datenbanken von HSC Chemistry 7.1® und Factsage® verwendet, welche mit Matlab® eingelesen und auf bestimmte Gruppen im Molekül durchsucht werden (zB. OH für Hydrate).

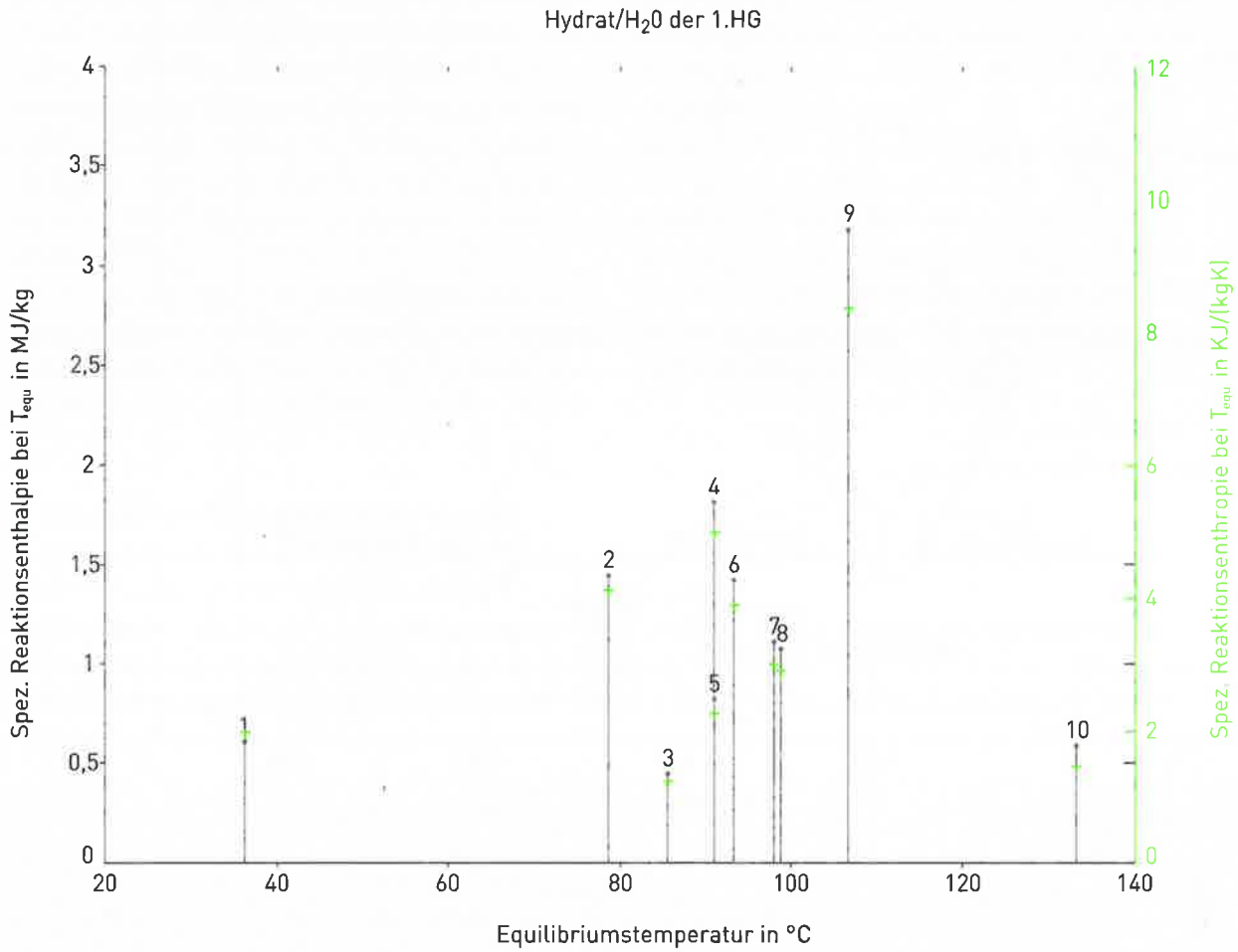
Die aus der systematischen Datenbankanalyse gewonnenen Daten werden schließlich in einer übersichtlichen graphischen Darstellung (spezifische Reaktionsenthalpie bei Gleichgewichtstemperatur) angezeigt. Eine Auswahl an bisher gefundenen Stoffpaarungen wird mit der Abbildungsmethodik in Abbildung 1 illustriert.

Ziel

Das Ziel des Projekts ist die Erstellung eines umfassenden Katalogs mit möglichen Speicherpaarungen und die Quantifizierung deren Eigenschaften. Der Katalog soll in Form einer Datenbank öffentlich verfügbar sein.

Reaktionsenthalpie und -entropie der Salzhydrate der 1HG bei T_{equ}

ABBILDUNG 1

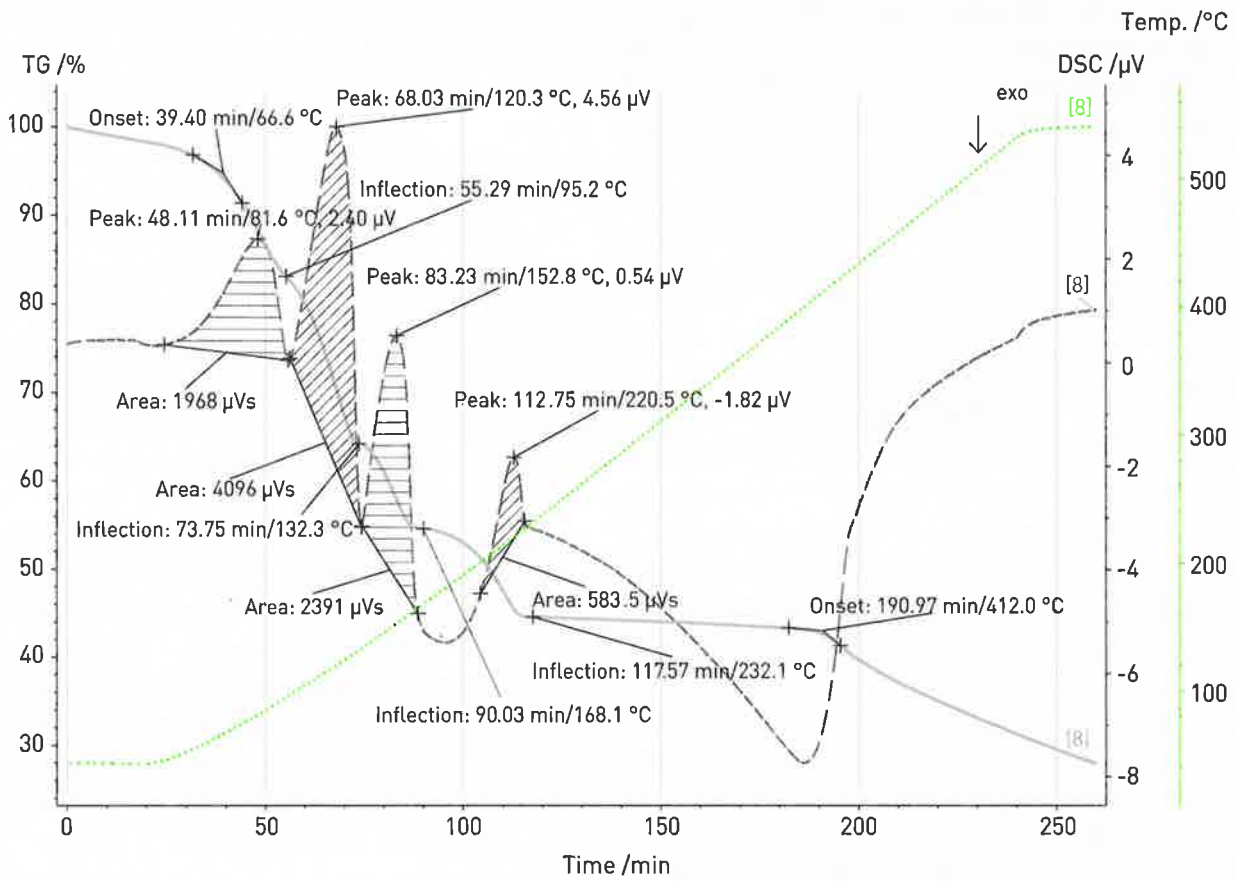


- 1 $\text{NaI} \cdot 2 \text{H}_2\text{O} > 2 \text{H}_2\text{O} + \text{NaI}$
- 2 $\text{LiNO}_3 \cdot 3 \text{H}_2\text{O} > 3 \text{H}_2\text{O} + \text{LiNO}_3$
- 3 $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O} > \text{H}_2\text{O} + \text{Li}_2\text{SO}_4$
- 4 $\text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O} > 12 \text{H}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{HPO}_4$
- 5 $\text{NaBr} \cdot 2\text{H}_2\text{O} > 2 \text{H}_2\text{O} + \text{NaBr}$

- 6 $\text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} > 7 \text{H}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{HPO}_4$
- 7 $\text{LiBr} \cdot 2\text{H}_2\text{O} > 2 \text{H}_2\text{O} + \text{LiBr}$
- 8 $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O} > 5 \text{H}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$
- 9 $2 \text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} > 15 \text{H}_2\text{O} + \text{Na}_4\text{P}_2\text{O}_7$
- 10 $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O} > 3 \text{H}_2\text{O} + \text{KAl}(\text{SO}_4)_2$

MgCl₂ - Dehydratation

ABBILDUNG 2



„Mithilfe der thermochemischen Energiespeicherung den Einsatz von fossilen Brennstoffen dramatisch reduzieren.“
 PROJEKTLEITER PETER WEINBERGER

Untersuchungsverfahren zur Stoffcharakterisierung

Die vielversprechendsten Stoffpaarungen werden einerseits mithilfe der Röntgenpulverdiffraktion (XRD) auf Phasenreinheit geprüft. Gegebenenfalls werden darüber hinaus IR-Spektroskopie und Einkristall-Röntgendiffraktion zur Strukturaufklärung eingesetzt. Die Energetik des reversiblen Umsatzes wird mithilfe der ‚Differential Scanning Calorimetry‘ (DSC) gekoppelt an Thermogravimetric Analysis (TGA) bestimmt. In Abbildung 2 ist die Dehydratation von MgCl_2 -Hexahydrat als Beispiel verwendet worden.

Die uns zugänglichen Messgeräte können nicht nur den gesamten gewünschten Temperaturbereich abdecken sondern auch unter Sondergas – Atmosphäre (Wasserdampf, CO_2 , SO_2 , NH_3 etc.) – geführt werden.

Mithilfe derartig festgestellter Reaktionsführung werden dann im Labormaßstab (Volumen: < 1 Liter) eine nasschemische Umsetzung dieser Reaktion durchgeführt. Erst wenn sich hierbei die Reaktionen problemlos handhaben lassen, wird eine zyklische Wiederholung dieser Energieaufnahme- und Energieabgabe-Reaktionen geprüft.

Wenn die Zyklenfestigkeit solcherart im Labormaßstab getestet ist, wird in einem eigens entwickelten kontinuierlichen Versuchsreaktor die Reaktionsführung im Wirbelschichtbetrieb überprüft. Nach Optimierung der Betriebsführungsparameter kann dann an einen Up-Scale in den industriellen Großmaßstab gedacht werden.

DREI GUTE GRÜNDE FÜR DAS PROJEKT

- Eine solide Wissensgrundlage für die Auswahl geeigneter Stoffpaare zur thermochemischen Energiespeicherung wurde geschaffen.
- Mithilfe des interdisziplinären Forschungsansatzes (Chemie, Verfahrenstechnik, Maschinenbau) sind noch zuvor unerreichte Lösungsansätze entstanden.
- Die Ergebnisse dieses Projekts ermöglichen Österreichs energie-intensiven Industrie einen Kostenvorteil.

