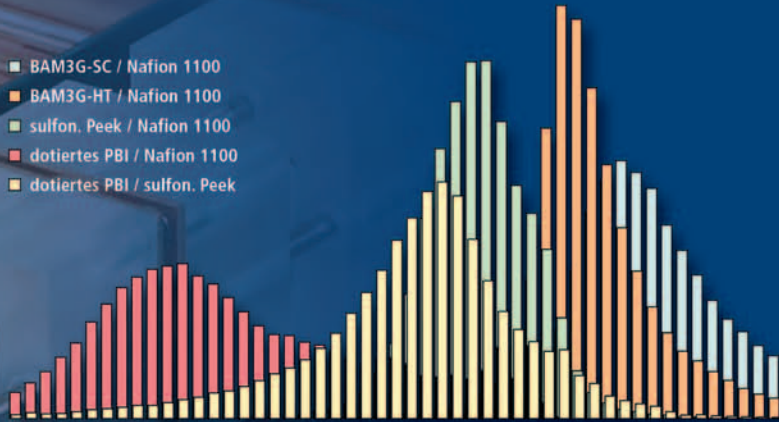




Benchmarking-Methodik für Komponenten in Polymerelektrolyt- Brennstoffzellen

Matthias Gebert

- BAM3G-SC / Nafion 1100
- BAM3G-HT / Nafion 1100
- sulfon. Peek / Nafion 1100
- dotiertes PBI / Nafion 1100
- dotiertes PBI / sulfon. Peek



Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energietechnik / Energy Technology

Band / Volume 30

Forschungszentrum Jülich GmbH
Institut für Werkstoffe und Verfahren der Energietechnik
Institut 3: Energieverfahrenstechnik

Benchmarking-Methodik für Komponenten in Polymerelektrolyt- Brennstoffzellen

Matthias Gebert

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energietechnik / Energy Technology

Band / Volume 30

ISSN 1433-5522 ISBN 3-89336-355-6

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek
Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen
Nationalbibliografie; detaillierte Bibliografische Daten sind im Internet
über <<http://dnb.ddb.de>> abrufbar.

Herausgeber und Vertrieb: Forschungszentrum Jülich GmbH
Zentralbibliothek
D-52425 Jülich
Telefon (02461) 61-5368 · Telefax (02461) 61-6103
e-mail: zb-publikation@fz-juelich.de
Internet: <http://www.fz-juelich.de/zb>

Umschlaggestaltung: Grafische Betriebe, Forschungszentrum Jülich GmbH

Druck: Grafische Betriebe, Forschungszentrum Jülich GmbH

Copyright: Forschungszentrum Jülich 2004

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energietechnik / Energy Technology Band / Volume 30

D 82 (Diss., Aachen, RWTH, 2004)

ISSN 1433-5522
ISBN 3-89336-355-6

Alle Rechte vorbehalten. Kein Teil des Werkes darf in irgendeiner Form (Druck, Fotokopie oder in einem anderen Verfahren) ohne schriftliche Genehmigung des Verlages reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet, vervielfältigt oder verbreitet werden.

BENCHMARKING-METHODIK FÜR KOMPONENTEN IN POLYMERELEKTROLYT-BRENNSTOFFZELLEN (PEFC)

von Matthias Gebert

KURZFASSUNG :

Für die Brennstoffzellen-Technologie ist die Erreichbarkeit vorgegebener Kostenziele neben Aspekten der Lebensdauer, des Wirkungsgrades und der Umweltverträglichkeit mit die wichtigste Fragestellung. Vorrangiges Ziel dieser Dissertation ist es daher, für die in PEFC-Stacks der kW-Klasse enthaltenen Bauteile ein allgemeingültiges, techno-ökonomisches Kostenmodell zu entwickeln. Wichtig hierbei ist, in enger Anlehnung an die Management-Methodik des Benchmarkings verschiedene technische Realisierungsvarianten im Hinblick auf die mit ihnen verbundenen Herstellkosten vergleichen zu können.

Dem Ermitteln der massenbezogenen Herstellkosten kommt eine Schlüsselfunktion zu. Neu ist hier unter anderem der Einsatz eines Monte-Carlo-Verfahrens, welches Erwartungswerte und Konfidenzintervalle für Materialkosten der Stack-Komponenten liefert. Die Betrachtung der Fertigungskosten erfolgt angepasst an Produktionsbedingungen der jeweiligen Bauteile.

Die neue Analysemethode findet zunächst Anwendung auf das Spritzgießen von Compositplatten als eine von mehreren Technologien zur Herstellung von Bipolarplatten (BPP). Weil ferner die chemischen Synthesen von ionenleitenden Polymermembranen komplex und speziell für die späteren Kunden nur schwer einschätzbar sind, bilden detaillierte Kostenanalysen für fünf gängige Ionomere den anwendungstechnischen Schwerpunkt der Arbeit. Der hohe Materialwert des in Katalysatoren enthaltenen Platins lässt dessen produktionstechnische Aspekte in der Kostenbetrachtung zunächst noch in den Hintergrund rücken. Die folgende Tabelle zeigt zentrale Ergebnisse der Planungsrechnungen zu Vollkosten (S. 90, 141) :

	Materialkosten		Fertigungskosten		denkbarer Nettoverkaufspreis		
	€/ kg	€/ m ² akt. Fläche	€/ kg	€/ m ² akt. Fläche	€/ kg	€/ m ² akt. Fläche	€/ kW _{el}
Composit-BPP	6,4...10,4	34...72	9,6...13,2	51...70	22...31	116...192	23...38 @ 5 kW/m ²
Nafion® 1100	114	11	42	4,2	243	24	4,9 @ 5 kW/m ²
BAM3G-SC	218	26	49	5,9	417	50	10 @ 5 kW/m ²
BAM3G-HT	132	16	49	5,9	283	34	6,8 @ 5 kW/m ²
sulfon. PEEK	19	3,8	28	5,6	73,7	15	4,2 @ 3,5 kW/m ²
H ₃ PO ₄ -dot. PBI	7	1,4	21	4,2	43,7	8,7	2,5 @ 3,5 kW/m ²

Strategisch gesehen können derartige entwicklungsbegleitende Prozesskosten-Kalkulationen mit Sicherheit einen Beitrag leisten, das Kostenpotenzial aussichtsreicher Technologien für Brennstoffzellen-Materialien und -Komponenten schneller zu erkennen. Vorhandene Ressourcen für Forschung und Entwicklung können so effizienter auf den kommerziellen Erfolg der Brennstoffzelle hinarbeiten.

BENCHMARKING METHODOLOGY FOR COMPONENTS OF POLYMER ELECTROLYTE FUEL CELLS (PEFC)

by Matthias Gebert

ABSTRACT :

Besides aspects like lifetime, efficiency or environmental compatibility, the question of the attainability of given cost targets is of paramount interest in fuel cell technology. Therefore, a major aim of this PhD thesis is to develop a universally valid techno-economic cost model for components of PEFC stacks in the kilowatt range. Different technical solutions will be comparable with regard to their corresponding production costs – based on the concept of “benchmarking” management.

Determination of mass-specific production costs takes on a key role. The utilization of a MONTE CARLO approach is a novel procedure delivering expectation values as well as confidence intervals for the material costs of the stack components. Consideration of production costs incorporates the fabrication conditions of individual components.

The new methodology is first applied to the injection moulding of composite plates as one of several new technologies for producing bipolar plates (BPP). Furthermore, detailed cost analyses of five common ionomers constitute the main technological focus of the thesis in view of the complexity of ion-conducting polymer membrane production and the difficulties customers would have in assessing this process. The material cost of platinum-based catalysts outweighs their production aspects in a cost analysis, at least under present conditions. The following table gives an overview of the main results of the planning calculations at full cost (pp. 90, 141) :

	material costs		production costs		conceivable (net) sales price		
	€/ kg	€/ m ² active area	€/ kg	€/ m ² active area	€/ kg	€/ m ² active area	€/ kW _{el}
composite BPP	6.4...10.4	34...72	9.6...13.2	51...70	22...31	116...192	23...38 @ 5 kW/m ²
Nafion [®] 1100	114	11	42	4.2	243	24	4.9 @ 5 kW/m ²
BAM3G-SC	218	26	49	5.9	417	50	10 @ 5 kW/m ²
BAM3G-HT	132	16	49	5.9	283	34	6.8 @ 5 kW/m ²
sulfonated PEEK	19	3.8	28	5.6	73.7	15	4.2 @ 3.5 kW/m ²
H ₃ PO ₄ doped PBI	7	1.4	21	4.2	43.7	8.7	2.5 @ 3.5 kW/m ²

From a strategic point of view, such accompanying process cost calculations can undoubtedly contribute to a faster recognition of the cost potential of promising fuel-cell materials and component technologies. Limited R & D resources can thus be focused more efficiently on the commercial success of the innovative fuel cell technology.

MÉTHODOLOGIE « BENCHMARKING » POUR COMPOSANTS DE PILES À COMBUSTIBLE À ELECTROLYTE POLYMÈRE (PEFC)

par Matthias Gebert

RÉSUMÉ :

Une question primordiale de la technologie de pile à combustible (outre la durée de vie, le rendement et la compatibilité écologique) est celle de l'accessibilité des coûts admissibles. Cette thèse a pour objet de mettre au point un modèle techno-économique général pour les composants d'une PEFC dépassant une puissance d'environ un kilowatt. Il est donc important de pouvoir comparer (selon le concept du management méthodique dit « benchmarking ») différentes solutions techniques en fonction des frais de production qui en découlent.

L'identification des frais de production spécifiques à la masse joue un rôle clé. Une nouvelle approche est permise par l'utilisation d'un procédé « Monte Carlo » fournissant non seulement une valeur d'espérance, mais aussi des intervalles de confiance des coûts de matériaux pour une certaine pièce du « stack ». L'analyse des coûts de fabrication est conduite en adéquation avec les conditions de production des différents composants.

Une première application de cette méthode est le procédé du moulage de plaques en composite organique : une parmi plusieurs nouvelles technologies de production de plaques bipolaires. Sachant que ce sont surtout les synthèses des membranes échangeuses de protons qui sont complexes et difficiles à retracer de la part de la clientèle, des analyses très détaillées constituent l'aspect central de l'application du modèle aux technologies relatives aux piles à combustibles. Le coût élevé des matériaux des catalyseurs, surtout leur contenu en platine, repoussent, pour l'instant, les aspects économiques de leur production à l'arrière-plan. Le tableau suivant indique les résultats de la comptabilité prévisionnelle à coûts complets (pp. 90, 141) :

	coûts de matériaux		coûts de production		prix net envisageable		
	€/ kg	€/ m ² surf. active	€/ kg	€/ m ² surf. active	€/ kg	€/ m ² surf. active	€/ kW _{el}
plaques compos.	6,4...10,4	34...72	9,6...13,2	51...70	22...31	116...192	23...38 @ 5 kW/m ²
Nafion® 1100	114	11	42	4,2	243	24	4,9 @ 5 kW/m ²
BAM3G-SC	218	26	49	5,9	417	50	10 @ 5 kW/m ²
BAM3G-HT	132	16	49	5,9	283	34	6,8 @ 5 kW/m ²
PEEK sulfoné	19	3,8	28	5,6	73,7	15	4,2 @ 3,5 kW/m ²
PBI en H ₃ PO ₄	7	1,4	21	4,2	43,7	8,7	2,5 @ 3,5 kW/m ²

D'un point de vue stratégique, ce genre de calcul des frais de production parallèlement au développement peut à coup sûr contribuer à la découverte rapide du potentiel économique de nouvelles technologies pour les matériaux et composants des piles à combustible. Les ressources disponibles pour la recherche et le développement peuvent ainsi être utilisées de manière plus efficace dans l'intérêt d'un succès commercial de la nouvelle technologie des piles à combustible.

people tend to overestimate
what can be accomplished in the short run
but to underestimate
what can be accomplished in the long run

Arthur C. Clarke
futurist and science-fiction writer

1	EINFÜHRUNG UND AUFGABENSTELLUNG.....	4
2	TECHNISCHER ÜBERBLICK	9
2.1	Bipolarplatten und -elemente	10
2.1.1	Bipolarplatten auf metallischer Basis	11
2.1.2	Bipolarplatten aus Grafit-Kunststoff-Mischungen	13
2.1.3	Weitere Varianten für Bipolarplatten	15
2.2	Protonenleitende Membranen.....	16
2.2.1	Derzeit verfügbare Membranmaterialien	17
2.2.2	Neue Konzepte ionenleitender Membranen	18
2.2.3	Auswahl von Ionomeren für die ökonomische Analyse	19
2.3	Katalysatormaterialien	22
2.3.1	Platin als zentraler Bestandteil von PEFC-Katalysatoren	22
2.3.2	Höhere Platin-Nutzungsgrade bei Trägerung auf Leitfähigkeitsruß	23
2.3.3	Nasschemisches Verfahren zur Synthese geträgerter Platinkatalysatoren	24
2.3.4	Synthese von Katalysatoren mittels Spray-Verdampfung	25
2.4	Gasdiffusionsmaterialien	26
2.5	Herstellung von Membran-Elektroden-Einheiten	27
2.5.1	Vakuum-Aufdampfverfahren	28
2.5.2	Sprühverfahren.....	28
2.5.3	Bandbeschichtungen und Siebdruckverfahren.....	28
2.6	Sonstige Stackbestandteile	31
2.7	Zusammenfassung	32
3	KOSTENSITUATION.....	34
3.1	Definition und Abgrenzung des Kostenbegriffs	34
3.2	Studien zu Stackkosten	34
3.2.1	Studie im Auftrag des U.S.-amerikanischen <i>Department of Energy (DoE)</i>	35
3.2.2	Studie der SGL Carbon Group (D)	36
3.2.3	Studie der Firma Siemens	37
3.3	Studien zu einzelnen Stack-Komponenten	38
3.3.1	Reine Grafitplatten mit gefrästen Kanalstrukturen	38
3.3.2	Metallische Bipolarplatten	38
3.3.3	Bipolarplatten aus Grafit-Kunststoff-Compositen	39
3.3.4	Membranpolymere	39
3.3.5	Kohlenstoff-geträgerte Edelmetall-Katalysatoren	42
3.3.6	Gasdiffusionslagen.....	43
3.3.7	Membran-Elektroden-Einheiten (MEAs).....	43

3.4	Zusammenfassung	43
4	METHODIK ZUR BAUTEIL- UND PROZESSANALYSE	45
4.1	Strategische Kostenrechnung	45
4.2	Zusammensetzung der Herstellkosten.....	47
4.3	Benchmarking für PEFC-Stacks	47
4.3.1	Entstehung, Definition und Einsatzmöglichkeiten	47
4.3.2	Stackbewertung über ein Bauteil-Prozess-Benchmarking	48
4.3.3	Kennzahlen für das Kostenmodell	48
4.4	Ökonomisches Modell eines Brennstoffzellen-Moduls	49
4.5	Monte-Carlo-Analyse zur Materialkostenbewertung	55
4.5.1	Historische Entwicklung und Grundprinzip	56
4.5.2	Statistische Methodik zur Ermittlung von Erzeugniskosten.....	59
4.5.3	Kombination von Modell und Rohstoffkosten-Verteilungen	62
4.6	Investkostenbewertung von Produktionsanlagen.....	63
4.6.1	Literaturübersicht	63
4.6.2	Vorgehensweise der verfahrenstechnischen Kalkulation	64
4.6.3	Vorgehensweise bei PEFC-Stack-Komponenten	67
4.7	Zusammenfassung	72
5	ANALYSE VON COMPOSIT-BIPOLARPLATTEN.....	73
5.1	Klassifikation möglicher Abhängigkeiten.....	73
5.2	Composit-Platten aus Kunststoff und Grafit	74
5.3	Auswahl der Maschine	77
5.4	Kosten des Gießwerkzeugs	79
5.5	Materialkosten.....	79
5.6	Fertigungskosten	82
5.7	Herstellkosten und Beitrag zu möglichen PEFC-Stackkosten.....	86
5.8	Zusammenfassung	91
6	ANALYSE UND BENCHMARKING VON MEMBRANPOLYMEREN.....	92
6.1	Nafion [®]	93
6.1.1	Nafion [®] – Darstellung der chemischen Synthesekette.....	93
6.1.2	Nafion [®] – Verfahrenstechnische Umsetzung	95
6.1.3	Nafion [®] – Mengenbilanzierung und Materialkostenanalyse.....	99
6.1.4	Nafion [®] – Investkosten der Produktionsanlage.....	103

6.2	BAM-3G	105
6.2.1	BAM-3G – Darstellung der chemischen Synthesekette	105
6.2.2	BAM-3G – Verfahrenstechnische Umsetzung.....	107
6.2.3	BAM-3G – Mengenbilanzierung und Materialkostenanalyse	112
6.2.4	BAM-3G – Investkosten der Produktionsanlagen	116
6.3	Sulfoniertes Polyetherketon (PEEK).....	119
6.3.1	PEEK – Darstellung der chemischen Synthesekette	119
6.3.2	PEEK – Verfahrenstechnische Umsetzung.....	120
6.3.3	PEEK – Mengenbilanzierung und Materialkostenanalyse.....	123
6.3.4	PEEK – Investkosten der Produktionsanlage.....	124
6.4	Phosphorsäure-dotiertes Polybenzimidazol (PBI).....	126
6.4.1	PBI – Darstellung der chemischen Synthesekette	126
6.4.2	PBI – Verfahrenstechnische Umsetzung.....	128
6.4.3	PBI – Mengenbilanzierung und Materialkostenanalyse	130
6.4.4	PBI – Investkosten der Produktionsanlage	133
6.5	Vergleichende Diskussion von Material- und Fertigungskosten.....	134
6.6	Beitrag zu möglichen PEFC-Stackkosten	140
6.7	Zusammenfassung	143
7	ZUSAMMENFASSUNG, BEWERTUNG UND PERSPEKTIVEN	145
8	ANHANG	150
8.1	Formelverzeichnis, Akronyme und CAS-Nummern der Chemikalien.....	150
8.2	Tabellenverzeichnis	153
8.3	Abbildungsverzeichnis	154
8.4	Kollektionen der Datenbank EUROPROMS.....	157
8.5	Exemplarisch ausgewählte Datensätze aus der Datenbank EUROPROMS.....	158
8.6	Auswerten von EUROPROMS-Daten	159
8.7	Composit-Spritzguss : Maschinendaten und Werkzeug-Kostenkalkulation	162
8.8	Composit-Spritzguss : Kostenaspekte von Bipolarplatten	165
8.9	Ionomersynthesen : Rückrechnung auf benötigte Eduktmengen.....	168
8.10	Ionomersynthesen : Berechnung des Anlagen-Kapitalbedarfs.....	175
8.11	Materialwert des Platins in Katalysatoren.....	185
8.12	Literaturverzeichnis	186

1 Einführung und Aufgabenstellung

Die Intensität von Forschung und technischer Entwicklung auf dem Gebiet der Brennstoffzellen hat in den vergangenen zehn Jahren stark zugenommen. Ein wesentlicher Antriebsfaktor hierfür ist der Wunsch nach einem Umwandlungsaggregat, das chemisch gespeicherte Energie mit hohem Wirkungsgrad in Strom umwandelt. Die genutzten Energieträger sollen dabei die Umwelt weniger als in heutiger Zeit durch limitierte Schadstoffe und Kohlenstoffdioxid belasten. Ferner müssen sie in ausreichender Menge und volkswirtschaftlich tragbarer Weise verfügbar sein.

Aus den Raumfahrtprogrammen der 60er Jahre ist bekannt, wie gut sich in diesen Punkten Wasserstoff und Brennstoffzellen gegenseitig ergänzen. So gilt es, das hieraus gewonnene Wissen zu erweitern und auf die terrestrische Energieversorgung oder Fahrzeugantriebe anzuwenden. Dies geschieht nicht zuletzt unter dem Druck einer weltweit wachsenden politischen Unsicherheit bei der Versorgung mit Erdöl - und im Fall der stationären Stromerzeugung angesichts einer unvermindert hohen Gefahr bei der Entsorgung atomarer Abfälle aus Kernkraftwerken.

Vor diesem Hintergrund kam es gerade in der letzten Dekade des 20. Jahrhunderts zu großen Fortschritten bei der Forschung und Entwicklung der Brennstoffzellen-Technologie. Betrachtet man die fünf wesentlichen Arten dieser Gruppe von Energiewandlern, so lag das Augenmerk zunächst auf der alkalischen und der phosphorsauren Brennstoffzelle (AFC und PAFC). Mittlerweile wird aber den drei anderen Typen ein höherer zukünftiger Anwendungsnutzen zugeschrieben: der festoxidischen Brennstoffzelle (SOFC), der Schmelzkarbonat-Brennstoffzelle (MCFC) und vor allem der protonenleitenden Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle (PEFC). Letztere ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit, da die PEFC relativ zu den anderen Brennstoffzellentypen entscheidende Vorteile aufweist :

- Betrieb mit Luft möglich (anders als bei der CO₂-empfindlichen AFC)
- Elektrodenräume durch festen Elektrolyten getrennt (nicht bei AFC, PAFC, MCFC)
- Betrieb bei moderaten Temperaturen zwischen 80 und 120 °C
(im Gegensatz zu MCFC und SOFC mit ~ 650 °C beziehungsweise 850 °C)
- Sehr dynamisches Verhalten bei Lastwechseln (besser als PAFC, MCFC oder SOFC)

Nicht zuletzt macht diese schnelle Anpassungsfähigkeit an eine spontan vom elektrischen Verbraucher geforderte Last die PEFC zur Brennstoffzelle der Wahl, wenn es um den zukünftigen Antrieb von Kraftfahrzeugen geht. Doch auch auf dem Sektor der stationären Stromerzeugung bietet eine dynamische Charakteristik Vorteile: Je geringer Verzögerungszeiten eines Einzelaggregates sind, desto weniger bedarf es eines komplexen Netzwerks, um auf Änderungen beim Stromverbrauch reagieren zu können. Wird keine Energie benötigt, so können dynamische Einheiten leicht abgeschaltet werden, wohingegen träge Systeme in einem Bereitschaftszustand verbleiben müssen und dabei *Standby-Power* benötigen.

Weltweite Arbeiten in Forschung und Industrie auf dem Gebiet der Polymermembran-Brennstoffzelle haben deren technischen Reifegrad während der vergangenen Jahre maßgeblich erhöht, auch wenn bei der Langzeitstabilität ihrer Systeme noch Verbesserungsbedarf besteht. Die größte Herausforderung bleibt allerdings das Erreichen der von möglichen Anwendungen klar vorgegebenen Kostenziele, da nur dann auch eine Kommerzialisierung erfolgreich ist.

Kostenziele möglicher Anwendungen von PEFC-Brennstoffzellen

Ein großer Vorteil der PEFC ist, dass sie von ihrem Prinzip her in sehr unterschiedlichen Anwendungen als Energiewandler eingesetzt werden kann. Leistungsklasse und Zielkosten verschiedener möglicher Einsatzbereiche der Brennstoffzelle zeigt die folgende Tabelle.

Tabelle 1.1 : Beispiele für Zielkosten der Brennstoffzelle in verschiedenen Anwendungen [1, p. 3]

	Leistung [kW]	Zielkosten [Euro/kW]	Investition absolut [Euro]
tragbare Fotokameras	0,02	5.000	100
stationäre Blockheizkraftwerke	200	1.000-1.500	$2 - 3 \cdot 10^5$
Pkw - Bordstromversorgung	5	500	2.500
Pkw - Antrieb	80	50	4.000

Die Zahlen ermöglichen eine gute Orientierung, sind jedoch mit Abweichungen behaftet. Nicht immer ist eindeutig spezifiziert, welche Teile der zusätzlich benötigten System-Peripherie im betrachteten Kosten-Bilanzraum eingeschlossen sind.

Die Herstellung sehr kleiner Brennstoffzellen (wie zum Beispiel für tragbare Kameras) unterliegt speziellen Gesetzmäßigkeiten bezüglich Anforderungen, Design, Fertigungstechnik oder Kostenrelationen. Die vorliegende Arbeit wird sich daher im Weiteren ausschließlich mit der Herstellung von PEFC-Stapeln (so genannten *PEFC-Stacks*) im Kilowatt-Bereich befassen. Größere Systemleistungen wie in Fahrzeugantrieben oder stationären Kraftwerken werden durch eine Parallelschaltung mehrerer PEFC-Stacks zu PEFC-Modulen realisiert.

Je nach Leistungsklasse muss die erwähnte periphere Systemtechnik (meist bestehend aus Pumpen, Filtern, Wärmetauschern und dergleichen) zwar anders dimensioniert sein, die Fertigung der Brennstoffzellen-Stacks selbst ist aber hiervon weitgehend unabhängig. Entscheidend für Design und Fertigung sind eher die Kostenziele sowie gewünschte Betriebsbedingungen, die dann zu einer bestimmten Auswahl an Einzelkomponenten für den Stack führen.

Die derzeit noch vorherrschende Divergenz zwischen Ziel- und Ist-Kosten wird Kapitel 3.2 detailliert darstellen. Stellvertretend für mehrere Brennstoffzellen-Entwickler sei hier lediglich eine Quelle erwähnt, die den finanziellen Aufwand zur Herstellung eines Stacks im Jahr 2001 mit über 10.000 US-\$ pro kW angibt [2]. Somit liegt die "Kostenlücke" zu den in Tabelle 1.1 gezeigten Zielkosten noch bei einem Faktor von 20 für Pkw-Bordstromversorgungen beziehungsweise einem Faktor von 200 für kommerzielle Pkw-Antriebe.

Aufgabenstellung für die vorliegende Arbeit

Die Erreichbarkeit gesetzter Kostenziele tritt mittlerweile als eine der wichtigsten Fragestellungen in das Zentrum des Interesses an der Brennstoffzellen-Technologie. Den meisten bisherigen Kosteninformationen fehlt aber eine systematische Darstellung von Prinzip, Annahmen und Zwischenschritten. Dies macht ein Nachvollziehen und eine objektive inhaltliche Bewertung der Daten unmöglich. Zudem erfolgen nur selten Hinweise auf konstruktionstechnische und werkstofftechnologische Alternativen oder Ansätze zur weiteren Kostensenkung. Vergleiche mit konkurrierenden Lösungen im Sinne eines Benchmarkings finden kaum statt. Eine Anpassung der Betrachtungsmethoden an neue technologische Entwicklungen ist meist unmöglich.

Vorrangiges Ziel dieser Dissertation ist es daher, für die in PEFC-Stacks der kW-Klasse enthaltenen Bauteile zunächst ein generisches Kostenmodell zu entwickeln, das frei von subjektiven Interessen einzelner Firmen verschiedene technologische Realisierungsvarianten im Hinblick auf die mit ihnen einhergehenden Herstellkosten vergleichen kann. Modularität und Transparenz stellen dabei eine Nachvollziehbarkeit sicher, erlauben spätere Modifikationen für den Fall veränderter Randbedingungen und ermöglichen schließlich auch eine analoge Betrachtung zukünftiger technischer Entwicklungen.

Zu der Frage, inwiefern und mit welchen Lösungsansätzen die Kostenziele auch erreichbar sind, wird diese Arbeit für die wichtigsten Kostenträger einen ersten Beitrag leisten. Folgende Fragestellungen sollen dabei das Erkennen der Zusammenhänge erleichtern :

Technisches Verständnis (Kapitel 2)

- ◆ Aus welchen Bauteilen besteht ein PEFC-Stack fertigungstechnisch gesehen ?
- ◆ Welche Funktionalitäten müssen diese Komponenten im Stack erfüllen ?
- ◆ Welche Materialien und Strukturen kommen aus heutiger Sicht hierfür in Frage ?
- ◆ Wie kann eine Produktion der Bauteile in naher Zukunft aussehen ?

Wirtschaftliche Analyse (Kapitel 3 und 4)

- ◆ Zu welchen Aussagen gelangen bisherige Studien ? Welches sind Haupt-Kostenträger ?
- ◆ Mit welcher Methodik lassen sich deren Haupt-Kostenfaktoren darstellen ?
- ◆ Wie hoch sind Material- und Fertigungskosten bei Annahme eines großen Absatzmarktes ?
- ◆ Wie hängen Herstellkosten und Leistungsvermögen eines Bauteils zusammen ?
- ◆ Wo bestehen gegebenenfalls Engpässe auf dem Weg der Kostensenkung, wo nicht ?

Ein derartiger Ansatz ist, soweit bekannt, bisher in keiner zugänglichen Veröffentlichung systematisch für PEFC-Stacks verfolgt worden. Ein ökonomisches Stackmodell mit entsprechender Methodik zur Analyse von Bauteilen und Herstellprozessen stellt demnach eine Innovation auf dem Gebiet der Brennstoffzellen-Technologie dar.

Bisher veröffentlichte potenzielle Kostenverläufe, die in Kapitel 3 zitiert werden, stammen überwiegend von Industriefirmen, die an der Entwicklung beteiligt sind. Deren Aussagen sind meist auch im Kontext einer Marktstrategie zu sehen. Somit besteht ein unverändert hohes Interesse an einer Analyse ökonomischer Potenziale von einem unabhängigen Standpunkt aus.

Kapitel 2 dieser Arbeit wird hierfür zunächst einige technische Grundlagen für die Komponentenbewertung bereitstellen, indem es für die Einzelkomponenten eines Stacks sowie deren Montage die Breite heute absehbarer technischer Umsetzungen zeigt, um dann hieraus eine Vorauswahl für die inhaltliche Analyse zu treffen.

Kapitel 3 stellt bereits vorhandene Kostenbewertungen für die Stack-Bestandteile vor und zeigt Grenzen ihrer Aussagekraft auf. Dennoch sind die Betrachtungen hilfreich, um in Verbindung mit Kapitel 2 eine Entscheidung zu treffen, welche Kostenträger von hoher Bedeutung sind, und wie sie demnach im Rahmen dieser Dissertation weiter behandelt werden.

Kapitel 4 entwickelt für die wirtschaftlichen Analysen im Rahmen dieser Arbeit die wesentlichen methodischen Grundlagen. Das techno-ökonomische Modell für ein PEFC-Modul macht über die entscheidenden Kenngrößen die Optimierungsziele sichtbar und quantifizierbar. Für die Bereitstellung von Kosteninformationen kommen in einem nachfolgenden Schritt auch neue Quellen zum Einsatz.

Die Kapitel 5 und 6 beinhalten Anwendungsbeispiele des entwickelten Kostenmodells auf zwei sehr wichtige Kostenträger: Zunächst erfolgt eine Analyse des Fertigungsprozesses von Bipolarplatten aus einer Graphit-Kunststoff-Mischung, der als eine mögliche technologische Innovation für Brennstoffzellen-Stacks gilt. Das sich anschließende Kapitel untersucht in detaillierter Weise die Herstellwege verschiedener protonenleitender Polymermembranen.

Im Fall der Bipolarplatte handelt es sich um die Betrachtung einer Einzeltechnologie für das Bauteil, was noch kein Benchmarking im eigentlichen Sinne zulässt. Vielmehr soll hier die erstmalige Anwendung des Modells aus Kapitel 4 in exemplarischer und übersichtlicher Weise vorgeführt werden. Kapitel 6 enthält hingegen ein vollständiges Kosten-Benchmarking für Polymermembranen, das direkte Vergleiche von fünf aussichtsreichen Alternativen durchführt.

Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass sich die Arbeit nicht mit den Kosten edelmetallhaltiger Katalysatoren beschäftigen wird. Der Anhang 8.11 enthält aber zu Vergleichszwecken mit den untersuchten Komponenten eine einfache tabellarische Übersicht über mögliche Materialkosten des enthaltenen Platins bei Annahme verschiedener Bedingungen. Parameter sind hierbei Beladung, Leistungsdichte der Zellen und Platinpreis.

Der unterschiedliche Detaillierungsgrad bei Anwendung des Modells auf Bipolarplatten, Ionomermembranen und Katalysator illustriert zugleich dessen Flexibilität sowie die einzelnen Phasen, die beim Aufbau eines vollständigen Kosten-Benchmarkings durchlaufen werden. Bild 1.1 auf der nächsten Seite zeigt die Modellanwendungen grafisch.

Kapitel 7 fasst die neu gewonnenen Erkenntnisse abschließend zusammen und evaluiert dabei auch das neu geschaffene Modell im Hinblick auf dessen Stärken und Schwächen. Es gibt zudem einen Ausblick auf weitere wichtige Arbeiten, die in Zukunft erforderlich sind, um schließlich zu einer leistungsstarken und vollständigen Bewertungsmethodik der Herstellungskosten unterschiedlichster PEFC-Stacks zu gelangen.

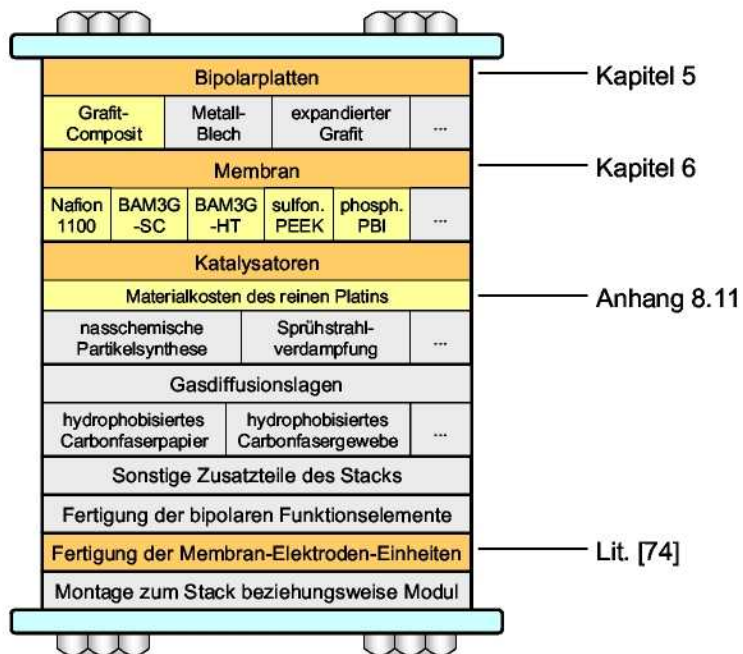


Bild 1.1 : Anwendungsobjekte (gelb) des in dieser Arbeit erstellten Kostenmodells

2 Technischer Überblick

Ausführliche Beschreibungen zum elektrochemischen Funktionsprinzip von Brennstoffzellen sind ausreichend vorhanden [3, p. 1-1]. In diesem Kapitel wird daher bereits der Schwerpunkt auf die Beschreibung eines Brennstoffzellen-Stacks mit Hinblick auf die Produktion der einzelnen Bauteile gelegt, damit sich Kostenfaktoren in späteren Kapiteln leicht zuordnen lassen. Einen Überblick zum Aufbau eines Stack gibt zunächst das folgende Bild 2.1 :

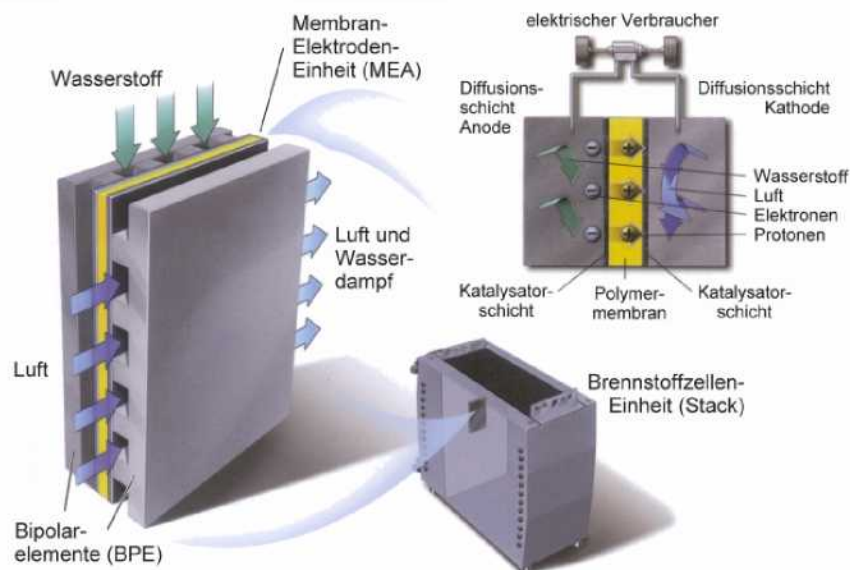


Bild 2.1 : Aufbau eines Brennstoffzellenstacks sowie seiner Einzelzellen [4, p. 12]

Ein Brennstoffzellen-Stack weist in seiner Architektur Parallelen zu herkömmlichen Akkumulatoren auf: Beide stellen eine Reihenschaltung von Einzelzellen aus Anoden und Kathoden dar, an deren Endpolen sich der Stromabgriff befindet. Während die chemischen Reaktanten eines Akkumulators sich meist ausschließlich in dessen Inneren befinden, versorgen hingegen kontinuierliche Ströme an Brenngas und Luft die Brennstoffzelle während ihres Betriebs.

Im Fall der PEFC spaltet die Anode den im Brenngas enthaltenen Wasserstoff katalytisch in Protonen und Elektronen (Oxidation). Gleichzeitig entstehen auf der Kathodenseite OH^- -Ionen infolge der Reduktion von Luftsauerstoff. Die H^+ -Ionen passieren eine ionenleitende Membran und reagieren dort mit den OH^- -Ionen zu H_2O . Gleichzeitig führt die Potenzialdifferenz zwischen Anode und Kathode zur Migration der Elektronen durch den elektrischen Verbraucher. Die ausschließlich katalytisch aktiven Elektroden unterliegen im Idealfall keinen chemischen Veränderungen, wie dies bei Akkumulatoren überwiegend der Fall ist.

Die praktische Umsetzung dieser Teilreaktionen erfolgt mit zwei wesentlichen Bauteilen, wie Bild 2.1 zeigt: Ein elektrisch leitfähiges Bipolarelement (BPE) sorgt für eine elektrische Kontaktierung der aktiven Reaktionsflächen und gewährleistet über Kanalstrukturen zugleich die Medienversorgung der beiden Elektroden. Eine Membran-Elektroden-Einheit (MEA) aus protonenleitender Membran, dünnen Katalysatorschichten und beidseitig aufgetragenen Diffusionsschichten garantiert die Feinverteilung der Gase an den Elektroden, die elektrochemische Reaktion am Katalysator und den Ionentransport.

Funktionsweise, Aufbau und Fertigung der Bipolarelemente beschreibt das Unterkapitel 2.1. Für die deutlich komplexere Sandwich-Struktur der Membran-Elektroden-Einheit geschieht dies schrittweise in den nachfolgenden Unterkapiteln 2.2 bis 2.5. Beim Vergleich der Einzelkomponenten wird auffallen, dass die Art der Teile sowie deren Herstellprozesse sehr stark variieren. Somit ist es erforderlich, die analytische Betrachtungsweise an die jeweiligen Produktionsabläufe anzupassen. Wichtig ist zugleich, trotz dieser verschiedenen Technologien in Kapitel 4 erstmals Methoden der Kostenbetrachtung bereitzustellen, die auch bei Änderungen der Produktionstechnik gut auf alle Teile applizierbar bleiben. Materialien und Herstellprozesse, wie sie im Folgenden beschrieben werden, stellen somit nur einen derzeitigen Stand der Technik dar, auf den die Analysemethodik dieser Arbeit exemplarisch angewandt wird.

Der Übersichtlichkeit halber sollen zunächst die kostenintensivsten Bestandteile des Stacks Gegenstand der Betrachtungen sein. Die Entscheidung hierfür ist im Vorfeld auf Basis bisher verfügbarer Studien gefallen, wie aus Kapitel 3 ersichtlich ist. Eine zentrale Rolle nehmen in dieser Arbeit die protonenleitenden Polymermembranen ein: Komplexität und finanzieller Aufwand der Synthese sind hier für die meisten Entwickler von Brennstoffzellen kaum abschätzbar, was zu hoher Unsicherheit führt. Bei den Herstellmöglichkeiten von Bipolarelementen führt die Breite möglicher Alternativen sowie eine Art Pattsituation aus Vor- und Nachteilen verschiedener Varianten zu einer letztlich unklaren Gesamtsituation. Daher sollen auch sie näher betrachtet werden. Bei Katalysatoren sind mengenmäßiger Bedarf und Materialkosten des Edelmetalls entscheidend, weswegen die Kostenbetrachtung hier zunächst auf diese beiden Einflussfaktoren begrenzt ist [5, p. 27].

2.1 Bipolarplatten und -elemente

Das Bipolarelement erfüllt gleichzeitig drei wesentliche Funktionen in einer Brennstoffzelle :

- ◆ Homogene Verteilung der gasförmigen Reaktanden über die aktive Zellfläche
- ◆ Durchleitung der Elektronen von der Anoden- zur Kathodenseite
- ◆ Abfuhr der bei der Reaktion zugleich entstehenden Reaktionswärme aus der Zelle

Stacks, die nur bei geringen flächenbezogenen Leistungsdichten um $0,1 \text{ W/cm}^2$ betrieben werden, können noch luftgekühlt betrieben werden. Bei Modulen mit hohen Leistungsdichten um $0,5 \text{ W/cm}^2$ ist es hingegen unabdingbar, die zusätzlich entstehende Wärme über einen separaten, flüssigkeitsgekühlten Kreislauf aus dem Zellstapel abzuführen.

Dies wirkt sich auf den Aufbau eines Bipolarelements aus: Die Platte muss nicht nur auf beiden Außenseiten Strukturen zur homogenen Gasverteilung über der Fläche aufweisen, sondern benötigt zudem in ihrem Inneren Leitungskanäle für Kühlwasser. Eine sinnvolle und übliche

Lösung hierfür ist, das Bipolarelement aus zwei zuvor einzeln hergestellten Bipolarplatten (BPP) zusammenzufügen. Bild 2.2 zeigt eine mögliche praktische Umsetzung.

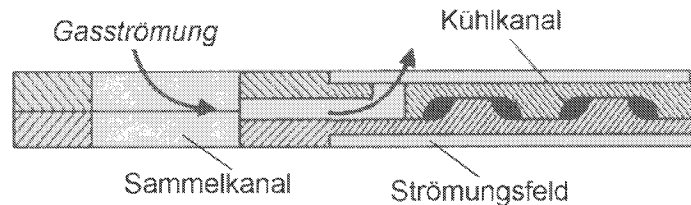


Bild 2.2 : Aufbau eines kühlbaren Bipolarelements aus zwei Bipolarplatten [6]

Des Weiteren ergeben sich für ein Bipolarelement folgende Materialanforderungen :

- ◆ hohe Gasdichtigkeit der Platten für die sichere räumliche Trennung von Anoden- und Kathodengas in allen auftretenden Betriebszuständen. Zielwert des U.S. Department of Energy (DoE): $< 2 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ H}_2 \text{ je Sekunde und cm}^2$, bei 80°C und 3 bar [7, p. 197]
- ◆ geringer elektrischer Widerstand des Vollmaterials, ca. $0,01 \text{ } \Omega \text{cm}$ und niedriger elektrischer Oberflächen-Übergangswiderstand $< 0,02 \text{ } \Omega \text{cm}^2$ [7, p. 197]
- ◆ sehr hohe Oxidationsstabilität bei Betriebstemperatur [7, p. 197]. Korrosionsstromdichte trotz der auftretenden feuchten, oxidierenden Bedingungen $< 16 \text{ } \mu\text{A/cm}^2$
- ◆ hohe Planparallelität mit Toleranzen $< 20 \text{ } \mu\text{m}$, um bei der Kontaktierung mit der MEA eine homogene Verteilung des Anpressdrucks zu erreichen [8, p. 27]. Dieser bestimmt maßgeblich den lokalen Oberflächen-Übergangswiderstand.
- ◆ hohe thermische Leitfähigkeit und mechanische Stabilität (Bruchsicherheit)
- ◆ leichtes Bauteil, also niedrige Plattendicke und geringes spezifisches Materialgewicht

Gemäß dem derzeitigen Stand der Technik kommen für Bipolarelemente im Wesentlichen zwei verschiedene Alternativen in Betracht: Entweder werden gestanzte und strukturierte Metallbleche eingesetzt, auf deren Oberfläche eine Korrosionsschutzschicht aufgebracht worden ist, oder man verwendet nichtmetallische Platten auf der Basis von Grafit.

Für Prototypen können zunächst auf CNC-Fräsmaschinen * variable Geometrien in Platten aus reinem Grafit eingefräst werden. Für eine Serienfertigung von größeren Mengen mehrerer hundert Platten ist dieser Prozess aber selbst bei günstigen Annahmen zu kostenintensiv, da sich gepresster Grafit nur sehr schwer sauber bearbeiten lässt und die Fertigungsdauer je Platte infolge komplexer Geometrien unverhältnismäßig hoch ist. Eine kommerzielle Produktion auf diesem Weg scheidet daher mit hoher Sicherheit aus.

2.1.1 Bipolarplatten auf metallischer Basis

Die Anforderung hoher elektrischer Leitfähigkeit lässt es nahe liegend erscheinen, zur Fertigung von Bipolarplatten Bleche aus passenden Metall-Legierungen zu verwenden. Zudem ergeben sich noch weitere Vorteile wie niedrige Blechdicken von unter 1 mm sowie eine einfache und präzise durchführbare Formgebung.

* Computerized Numerical Control

Das Kernproblem metallischer Bipolarplatten stellt jedoch die Korrosionsanfälligkeit dar [9]. Edelstähle weisen bezogen auf die von Brennstoffzellen geforderte Lebensdauer von mehreren tausend Stunden in der Regel eine zu niedrige Korrosionsresistenz auf [2]. Untersuchungen an unbehandelten Edelstählen haben drei wesentliche Ursachen aufgezeigt [10]: Das Metall wird deutlich stärker angegriffen, sobald der pH-Wert im Produktwasser unter einen Wert von etwa fünf abfällt oder Membran und Metallplatte an manchen Stellen miteinander in direktem Kontakt stehen. Ein weiterer Effekt kommt beim Übergang von Einzelzell- auf Stack-Messungen hinzu: Über den Sammelkanal kann das Produktwasser mehrere Zellen miteinander in ionischen Kontakt bringen und Parallelströme hervorrufen. Dies wird durch die höhere Gesamtspannung im Stack noch unterstützt [10]. Die ausgelösten Metallionen schaden der Membran, da sie dort aktive Zentren irreversibel blockieren. Dies kann speziell die Anoden betreffen, für die geeignete Legierungen und Schutzschichten gefunden werden müssen [11]. Nickelbasis-Legierungen oder Titan sind im stark oxidierenden Milieu der Anode beständiger, wobei Titan allerdings bereits schwerer zu verarbeiten ist und eine elektrisch schlecht leitende Oxidschicht ausbildet. Die Schlüsselfunktion kommt demnach einer funktionellen Oberflächenbeschichtung zu: Sie soll das Metall über die gesamte Lebensdauer hinweg sicher vor einem oxidativen Angriff schützen und zugleich auf einen sehr niedrigen elektrischen Oberflächen-Übergangswiderstand führen - also ein guter elektrischer Leiter sein. Klassische Schutzschichten auf der Basis von Oxiden sind demnach nicht zielführend. Auch mit Gold beschichtete Nickelbasis-Legierungen finden in der Literatur Erwähnung, um niedrige Kontaktwiderstände und Metallstabilität gleichzeitig zu erreichen [2].

Eine preisgünstigere Alternative könnte eine Schutzschicht aus Titan-Nitrid (TiN) darstellen. Das Material wird industriell in einem CVD-Verfahren* zur Oberflächenhärtung mechanischer Werkzeuge wie Bohrer, Fräser oder Gießformen aufgebracht, um deren Verschleißfestigkeit zu erhöhen. Das goldfarbene Titan-Nitrid zeichnet sich insbesondere durch chemische Resistenz und einen niedrigen elektrischen Widerstand aus, der mit $1,2 \cdot 10^{-5} \Omega\text{cm}$ etwa um einen Faktor vier unter dem des reinen Titans liegt [12, p. 181 und 282]. Bei reinen Titanplatten besteht zudem die Möglichkeit einer direkten Oberflächenreaktion mit Stickstoff unter erhöhten Temperaturen [13, p. 20]. Für die Schmelzkarbonat-Zelle (MCFC) sind derartige Beschichtungen bereits untersucht und positiv bewertet worden [14].

Eine britische Firma hat sich ein Verfahren zur Oberflächenbehandlung von Titan- und Edelstahlplatten schützen lassen [15]. Es umfasst folgende Bearbeitungsschritte :

- ◆ Reinigen und anschließendes Aufrauen der Plattenoberfläche (durch Strahlputzen)
- ◆ Elektrochemische Behandlung in H_2SO_4 - oder HCl -Lösung mit $\text{pH} < 5$
(Gleichstrom von 20-50 mA/cm² während 3-7 Minuten)
- ◆ Beschichtung mit Titan- oder Chrom-Nitrid

In der Praxis erfolgt zunächst die Profilierung der Platten (Prägen, hydrostatische Streckumformung oder ähnliche Verfahren), an die sich die Oberflächenbehandlung anschließt.

* Chemical Vapor Deposition

2.1.2 Bipolarplatten aus Grafit-Kunststoff-Mischungen

Die bereits erwähnten positiven Erfahrungen aus dem Bau von Prototypen mit reinen Grafitplatten haben in den letzten Jahren eine neue Material- und Prozessentwicklung speziell für Brennstoffzellen auf den Weg gebracht. Das Ziel hierbei ist es, die hohe chemische Beständigkeit des Grafits und seine gute elektrische Leitfähigkeit auch für kommerziell hergestellte Brennstoffzellen-Module zu nutzen.

Der langsame Fräsprozess beim Einarbeiten der Kanalstrukturen in jede einzelne Platte muss hierfür aber durch ein deutlich schnelleres und somit auch profitableres Herstellverfahren substituiert werden. Eine mögliche Lösung stellt das Spritzgießen oder Spritzprägen von Kunststoffen oder deren Vorprodukten dar, denen ein hoher Füllstoffanteil aus pulverisiertem Grafit beigemischt wird. Die entsprechende Anlage zeigt Bild 2.3 :

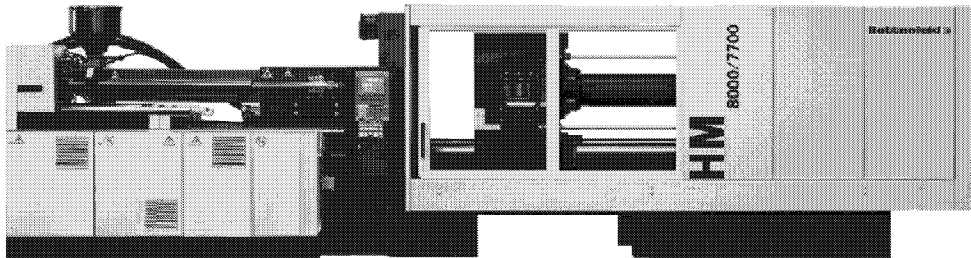


Bild 2.3 : Spritzgießanlage mit Extrudier-, Werkzeug- und Schließereinheit (v.l.n.r.) [16]

Ein vorgemischtes Compound aus Grafit und Kunststoff wird im linken Teil der Anlage aufgegeben und dann im Doppelschneckenextruder aufgeheizt, verdichtet und starken Scherkräften ausgesetzt. Im Einspritzteil des etwa 20 bis 40 Sekunden dauernden Produktionszyklusses drückt die Extruderschnecke eine definierte Menge an vorplastifiziertem Material während kurzer Zeit in die Kavität des Werkzeugs. Werden Duroplaste verarbeitet, dann kommt es in der heißen Form zu einer chemischen Aushärtereaktion, ehe das verfestigte Teil aus der Form ausgeworfen wird. Bei Thermoplasten ist das Werkzeug relativ zur Schnecken spitze kühler, so dass das Polymer lediglich erstarrt. Die in Bild 2.3 rechts dargestellte Schließereinheit verhindert über Gegenkräfte, dass die Form infolge des hohen Einspritzdrucks aufschwimmt. Sie wird erst geöffnet, um die fertige Platte aus der Kavität zu entfernen.

Es ist industriell üblich, den Spritz- und Gießmassen diverse Füllstoffe zur Veränderung der Produkteigenschaften beizumengen. Um Teile elektrisch leitfähig zu machen, werden häufig Ruße oder Metallfasern zugesetzt. Mit Leitfähigkeitsrußen lassen sich spezifische Durchgangswiderstände bis etwa $1 \Omega\text{cm}$ realisieren - Metallfasern führen hinunter auf bis zu $10^{-2} \Omega\text{cm}$. Weitere Grundlagen siehe [17, p. 106-108].

Um das auf Seite 11 erwähnte Ziel von etwa $10 \text{ m}\Omega\text{cm}$ ohne metallische Zusätze erreichen zu können, muss die Kunststoffmatrix mit Grafit gefüllt werden. Die Füllgrade übersteigen dabei deutlich Werte, wie sie für antistatische Anwendungen oder Abschirmungen benötigt werden. Hierfür fanden 1996 Untersuchungen des Perkulationsverhaltens leitfähiger Compounds im Bereich von null bis 15 Vol.-% statt, was bis zu circa 30 Ma.-% entspricht [18]. Die Lage der Perkolationsschwelle hängt dabei von der Rußart (insbesondere dessen spezifischer Ober-

fläche) und dem Kunststofftyp ab (Polypropylen: ~ 5 Vol.-% (11 Ma.-%) Ruß, Polystyrol: ~ 9 Vol.-% (17 Ma.-%) Ruß). Jedoch liegt auch das untere Widerstandslevel über $1 \Omega\text{cm}$ und damit um zwei Größenordnungen über dem Zielwert. Bipolarplatten von Brennstoffzellen erfordern somit deutlich höhere Füllgrade von mindestens 60 Vol.-% Grafit, was material- und verarbeitungstechnische Neuentwicklungen erforderlich macht.

Die große Herausforderung für die Produktion besteht darin, einen maximal tragbaren Grafitanteil im Compound noch extrudierbar zu halten, sodass eine feste und zugleich bruchresistente Platte mit minimalen elektrischen Widerständen entsteht. Ziel der Entwicklungen ist, dass das Bauteil die geforderten Eigenschaften bereits ohne maschinelle Nachbearbeitung aufweist. Dies scheint technisch erreichbar [19]. Unabhängig vom optimalen Anteil an Grafit, der im Zuge der derzeitigen Entwicklungen bestimmt wird, ist in dieser Arbeit ein Intervall zwischen 60 und 90 Vol.-% untersucht worden. Das folgende Bild zeigt den prinzipiellen Aufbau einer einzelnen Bipolarplatte im Detail (in Anlehnung an Bild 2.2).

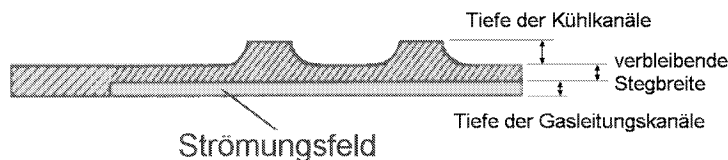


Bild 2.4 : Design einer einzelnen Composit-Bipolarplatte

Die Gesamtdicke der Platte folgt aus den Tiefen der beiden Fluidkanäle sowie der für Stabilität und Herstellbarkeit nötigen Stegbreite. Vor allem bei spritzgeprägten oder -gegossenen Composit-Platten ist es aus Gründen der Materialeinsparung sinnvoll, die jeweiligen Maße auf ein Minimum zu reduzieren. Begrenzende Faktoren sind hierbei :

- ◆ für den Kühlkanal: Die Höhe des entsprechend dem erforderlichen Kühlvolumenstrom entstehenden Druckverlusts.
- ◆ für das gasseitige Strömungsfeld: Die erforderliche Mindestdicke, bei der im Stack noch eine Gleichverteilung von Brenngas beziehungsweise Luft über der aktiven Fläche herrscht - obwohl die angrenzende Gasdiffusionslage (GDL) sich in Folge des hohen Anpressdrucks etwas in die Gaskanäle hineindrückt.
- ◆ für die Stegbreite: Die minimal nötige Dicke, um bei den während Montage und Betrieb auf die Platte einwirkenden Kräften ein Bauteilversagen durch Bruch zu verhindern. Hinzu kommt die Fertigung, bei der mit zunehmend geringerer Dicke ein homogenes und vollständiges Ausfüllen der Form mit der vorplastifizierten Masse zunehmend schwieriger wird. Entscheidend ist hierbei das so genannte Fließweg:Wandstärken-Verhältnis [17, p. 148].

Nachteil der Grafit-Composite im Vergleich zu metallischen Bipolarplatten ist die fertigungstechnisch bedingte höhere Bauteildicke von 1,5 bis 3 mm und das damit einhergehende höhere Bauteilgewicht. Für Metallplatten genügen Blechstärken unter 0,2 mm. Auch die geringere Dichte von Grafit ($2,2 \text{ g/cm}^3$) kann diesen Unterschied selbst bei Mischung mit Thermoplasten ($0,9 \text{ g/cm}^3$) nicht kompensieren. Tabelle 2.1 zeigt für mehrere Materialien eine Gegenüberstellung der Massen je aktiver Fläche [8, p. 28 mit einer Ergänzung für Grafit-Composit-Material].

Tabelle 2.1 : Flächen- und leistungsbezogene Massen von Bipolarplatten-Materialien [8, p. 28]

Material	Dichte	Typische Plattendicke	Masse der Platte pro Fläche	Masse von zwei Platten bei 0,5 W/cm ²
	[g/cm ³]	[mm]	[g/cm ²]	[kg/kW]
Edelstahl	~ 8	0,1	0,08	0,32
Titan	4,5	0,5	0,23	0,90
Aluminium	2,7	0,5	0,14	0,54
reiner Grafit	2,25	1,5	0,34	1,35
Grafit-Composit	~ 1,9	1,5	0,29	1,14

Ein Wechsel von Grafit-Composit auf Titan bringt demnach etwa 20 % Gewichtsersparnis ein. Verwendet man die noch dünneren Edelstahlbleche, so ergibt sich ein um über 70 % geringeres Bauteilgewicht. Der Einsatz von Aluminium ist insofern bedenklich, als leichte Fehlstellen in der Beschichtung direkt zu einer starken Freisetzung von Metallionen dieses unedlen Elements an der Anode führen können.

Was das Bauvolumen angeht, so bestimmen im Wesentlichen die Kanaltiefen für die Reaktionsmedien die Bipolarplattendicke. Metallische Platten benötigen im Allgemeinen etwa 30-40 % weniger Bauraum, da sie ohne den in Bild 2.4 dargestellten Steg auskommen; sofern die Blechdicke gegenüber dem Steg der Compositplatte vernachlässigt wird.

2.1.3 Weitere Varianten für Bipolarplatten

Neben den soeben beschriebenen beiden Architekturen, die in Forschung und Industrie im Zentrum des Entwicklungsinteresses stehen und in dieser Arbeit näher auf ihre Kosteneigenschaften hin untersucht werden, sollen kurz auch noch einige Varianten Erwähnung finden :

Der Widerstand von Composit-Platten lässt sich leicht dadurch senken, dass diese nach der Formgebung abgeschmirgelt werden [20]. Dies wäre allerdings in der industriellen Fertigung auch mit einem zusätzlichen mechanischen Bearbeitungsschritt verbunden.

Die Kühlfunktion lässt sich nach außen verlagern, indem eine thermisch gut leitende, flache Aluminiumplatte als Träger dient. Anoden- und Kathodenseite aus einem Grafit-Compound werden dann um eine in die Form eingelegte Platte herum aufgeprägt [21]. Kleine Lüfter sorgen im Betrieb für die Wärmeabfuhr an die Umgebung. Das Design ist jedoch wiederum mit erhöhtem Bauvolumen außerhalb des eigentlichen Stacks verbunden. Zudem droht eine Verkürzung der Lebensdauer, falls Aluminium-Ionen ungewollt in Lösung gehen und in das Membranmaterial eindringen.

Neben Platten aus Grafit-Kunststoff-Mischungen stellen dünne Grafitfolien aus expandiertem Naturgraphit mit 0,3 bis 0,8 mm Dicke eine aussichtsreiche Alternative dar [22]. Sie sind nach dem Imprägnieren (in der Regel mit Phenolharz) auch hinreichend gasdicht. In die Folien können einfache Kanalstrukturen unter Druck eingepreßt werden, was eine bleibende plastische Verdichtung des Materials zur Folge hat und somit Formstabilität sicherstellt. Allerdings lässt sich entstehende Reaktionswärme nicht direkt abführen, sodass hierfür zusätzliche Bauteile

nötig sind. Neben europäischen haben sich auch US-amerikanische Firmen Schutzrechte auf entsprechende Verfahren erteilen lassen [23, 24].

Ein britisches Carbon-Unternehmen beschreibt ein Verfahren, bei dem eine ebene Graphitplatte über eine lithografische Schablone mit feinen Kanalstrukturen versehen werden kann. Dabei werden nicht bedeckte Bereiche der Platte erodiert und bilden so die Kanalstrukturen aus. Dieses so genannte Elektroätzen (*electro etching*) erfordert dem Anwender zufolge einen um einen Faktor 50 geringeren Zeitaufwand relativ zum konventionellen Fräsen von Graphit [25].

2.2 Protonenleitende Membranen

Eingangs des Kapitels wurde bereits erwähnt, dass die Brennstoffzelle auf zwei wesentlichen Baugruppen basiert. Während das in 2.1 beschriebene Bipolarelement (BPE) vor allem die Medienversorgung gewährleistet, laufen in der Membran-Elektroden-Einheit (MEA) die entsprechenden elektrochemischen Reaktionen ab. Sie basiert auf einer Sandwich-Struktur mehrerer aktiver Schichten, deren Fügeprozess zu MEAs in Abschnitt 2.5 näher beschrieben ist.

Zunächst stehen Funktion und Herstellung der protonenleitenden Polymermembran selbst im Mittelpunkt. Dieser im Gegensatz zu anderen Brennstoffzellentypen feste Elektrolyt wird häufig als das zentrale und wichtigste Element der PEFC angesehen. Während bei der Fertigung von Bipolarelementen vor allem Fragen der Materialverarbeitung im Vordergrund stehen, kommt es hier auf die präzise industrielle Synthese eines Spezialpolymers an, das ohne Fehlstellen zu einer zwischen 25 und 180 μm dicke Elektrolytmembran geformt werden muss.

Diese Membran erfüllt gleichzeitig drei wesentliche Funktionen in einer Brennstoffzelle :

- ◆ Durchleitung der Protonen von der Anode zur Kathode
- ◆ Sichere räumliche Trennung von Brenngas- und Luftraum
- ◆ Elektrische Isolierung der beiden Elektroden

Die praktische Umsetzung in ein Bauteil besteht aus einer dünnen Folie, welche dann bei der MEA-Fertigung als Rollenware verarbeitet wird. Für den Kunststoff ergeben sich auf Basis der Funktionserfüllung folgende Materialanforderungen :

- ◆ Hohe ionische Leitfähigkeit für Protonen von etwa 0,1 S/cm oder mehr. In den meisten Fällen ermöglichen dies Sulfonsäuregruppen ($-\text{SO}_3\text{H}$), die mit gewissem Abstand kovalent an eine Haupt-Polymerkette gebunden sind.
- ◆ Hohe Gasdichtigkeit der Folie für die Trennung von Anoden- und Kathodengasraum in allen auftretenden Betriebszuständen. Die Diffusion von Wasserstoff zur Kathode kann im Betrieb zu Leistungseinbußen führen - im Stillstand zudem zur möglichen Bildung explosiver Gemische. Der vom U.S. DoE festgelegte Grenzwert für das Stromdichteäquivalent der H_2 -Permeation liegt daher bei unter 1 mA/cm^2 [7, p. 197].
- ◆ Niedriger Quellgrad, also eine möglichst geringe Verformung der Membran bei Wasseraufnahme. Materialien mit derzeitigem Stand der Technik sind nur in ausreichend feuchtem Zustand gut ionenleitfähig. Zu hohe Quellgrade beeinflussen allerdings die Druckverhältnisse im fertigen Stack und erschweren zusätzlich in hohem Maße eine präzise MEA-Fertigung. Im Bereich 20 - 100 % relative Feuchte gilt daher ein Quellgrad $< 10\%$ als anzustrebendes Ziel [7, p. 197]. Handelsübliche Folien besitzen bisher etwa 30-50 %.
- ◆ Säurestabilität des Polymers, Degradation $< 2\text{ mV}$ je 1000 Betriebsstunden [7, p. 197].

- ♦ Thermische Stabilität bei den herrschenden Einsatztemperaturen. Zurzeit gelten etwa 80 °C als günstigster Betriebspunkt für PEFC-Stacks. Für die Zukunft wird jedoch im Hinblick auf ein optimiertes Gesamtsystem ein höheres Niveau um 120 °C angestrebt, was speziell für Fahrzeuganwendungen vorteilhaft wäre. Diese Temperatur stellt dort ein oberes Limit für wasserbasierte Kühlkreisläufe dar.
- ♦ Mechanische Belastbarkeit insbesondere durch Zugspannungen, die während der Folienformung und der Beschichtungen mit Elektroden üblicherweise auftreten. Außerdem sollte das Material unter den auftretenden Bedingungen bei Herstellung und Anwendung ausreichend elastisch bleiben, um Sprödbrüche zu vermeiden.

Eine grundlegende Beschreibung des Betriebsverhaltens von protonenleitenden Membranen in Zellen und Stacks gibt in anschaulicher Weise [3, p. 3-4]. Auf diese operativen Aspekte soll daher im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter eingegangen werden.

2.2.1 Derzeit verfügbare Membranmaterialien

Für die praktische Umsetzung der gestellten Materialanforderungen sind seit den 60er Jahren verschiedene Gruppen von Polymeren als mögliche Festelektrolyt-Membranen der PEFC erforscht und weiterentwickelt worden [26]. Zu Beginn der 80er Jahre kamen für die Chlor-Alkali-Elektrolyse perfluorierte, ionenleitende Membranen von mindestens vier verschiedenen Herstellern aus den USA und Japan auf den Markt. Das mit diesen Materialien möglich gewordene "Membranverfahren" ist seitdem dabei, Altanlagen zur Synthese von Chlor und reiner Natronlauge zu ersetzen, die noch mit dem "Amalgamverfahren" arbeiten und dadurch Mitarbeiter wie Umwelt durch kontinuierliche Emissionen an Quecksilber belasten.

Schnell hat sich gezeigt, dass die für das "Membranverfahren" entwickelten Polymerfolien auch gut als Elektrolyt in Brennstoffzellen einsetzbar sind und dort bessere Leistungsdaten und höhere Lebensdauern aufweisen als bis dahin übliche sulfonierte Polystyrol-Derivate [26, p. 138].

Der hohe Preis für den perfluorierten Ionenleiter sowie sein hoher Gehalt am Halogen Fluor sind ab Beginn der 90er Jahre jedoch Triebkräfte gewesen für die parallele Forschung an sulfonierten, arylischen Polymeren: Fluorfreie Makromoleküle mit einer Hauptkette, die aus Benzolringen und Brückengruppen wie $-O-$, $-CO-$ oder $-SO_2-$ bestehen. Diese zum Teil für andere Märkte bereits handelsüblichen Polymere^{*} erhalten in einem zusätzlichen Reaktionsschritt mittels Schwefelsäure, Chlorsulfonsäure oder Schwefeltrioxid funktionelle Sulfonsäuregruppen, die ihnen die protonenleitenden Eigenschaften verleihen [27, 28, 29].

Eine Untergruppe stellen heterozyklische Polymere dar, bei denen zum Beispiel Stickstoff-Atome in der Hauptkette mögliche Ankerpunkte für Säuren wie H_3PO_4 sind. An die Stelle einer Sulfonierungsreaktion kann hier ein längeres Eintauchen des Polymers in eine konzentrierte Säure treten, woraufhin sich die Membran mit dem Protonenleiter füllt. Untersuchungen über längere Betriebszeiträume zeigen allerdings, dass die Protonenleitfähigkeit abnimmt, sobald flüssiges Produktwasser im Stack auftritt: Es löst die Phosphorsäure aus der Struktur heraus und senkt somit die Säurekonzentration irreversibel ab. Dennoch ist ein solches Stoffsystem marktrelevant - vor allem, weil es dank des hohen Siedepunktes der Säure auch Betriebs-

^{*} so genannte Polyetherketone (PEK) beziehungsweise Polysulfone (PSU)

temperaturen deutlich über 100 °C zulässt. Dieser Bereich ist mit sulfonierten Polymeren kaum zugänglich, da oberhalb der H₂O-Siedelinie im Normalfall Verdampfung einsetzt, die Membran austrocknet und die Protonenleitung zum Erliegen kommt.

Bei allen Polymertypen können zudem funktionale, meist anorganische Zusatzstoffe wie Siliziumdioxid, Heteropolysäuren oder Zirkonphosphat in die Membran eingebaut werden, die dort Eigenschaften wie die Protonenleitfähigkeit oder den Wasserhaushalt beeinflussen [29, 30, 31]. Auch das Prinzip der Funktionentrennung ist in diesem Zusammenhang anwendbar: Häufig wird die mechanische Stabilität dadurch gewährleistet, dass ein Gewebe aus expandiertem Polytetrafluorethylen (PTFE) mit hoher Porosität ($\epsilon \sim 0,9$) in das ionenleitende Spezialpolymer eingelassen wird. Diese Matrix kann dann während des Produktionsprozesses die Zugspannungen aufnehmen und ein späteres Verziehen der Membran im Stack verringern.

2.2.2 Neue Konzepte ionenleitender Membranen

Neben einer Vielzahl an Variationen und Mischungen der beschriebenen Polymergruppen befinden sich seit mehreren Jahren auch so genannte Phosphazene in der Untersuchung als Brennstoffzellen-Elektrolyte. Hierbei handelt es sich um anorganische Polymere, deren Hauptkette nicht auf Kohlenstoff basiert, sondern auf alternierenden $-(P-N)-$ Einheiten [32]. Für die Polymerisation selbst sind mehrere überschaubare Reaktionsketten möglich [33]. Am Phosphoratom können hier diverse Seitenketten mit ionischen Substituenten fixiert werden. Bei guter Auswahl sind Leitfähigkeiten in der Größenordnung etablierter Ionomere erreichbar [34]. Den Phosphazenen werden darüber hinaus chemische Resistenz sowie hohe thermische Belastbarkeit zugeschrieben. Niedrige Permeationsraten des Methanols machen das Material zu einem aussichtsreichen Festelektrolyten für die Direktmethanol-Brennstoffzelle (DMFC). Allerdings beschäftigen sich bisher nur wenige Arbeitsgruppen weltweit mit dieser seltenen Art von Makromolekülen [35]. Es fehlen bisher veröffentlichte Leistungsdaten bei Temperaturen > 80 °C und Informationen zum Betrieb über längere Zeiträume.

Ähnliches gilt für sulfonierte Polyimide: Deren Block-Copolymere degradieren ab etwa 80 °C infolge Hydrolyse und sind somit zumindest in höheren Temperaturbereichen nicht einsetzbar [36]. Auch fluorfreie, sehr einfache Butadien-Styrol-Copolymere zeigen im Betrieb schnell Zersetzungerscheinungen. Die bei der Sauerstoffreduktion auftretenden radikalischen Intermediate trennen bereits oberhalb von 40 °C mit merklicher Geschwindigkeit die C-H-Bindungen kohlenwasserstoff-basierter Polymere auf, was dem Erreichen hohen Leistungsdichten in solchen Zellen entgegensteht [37].

Als deutlich stabiler erweisen sich kommerziell erhältliche Folien aus perfluorierten Polymeren wie PTFE oder FEP, in denen zunächst mit einem Elektronenstrahl Radikale erzeugt werden. Beginnend an diesen aktiven Zentren polymerisiert dann zugesetztes Styrol. Ein Anteil von etwa 10 Ma.-% Divinylbenzol führt zusätzlich zu einer Quervernetzung der longitudinalen Hauptketten bei optimiertem Leistungsverhalten. In Zellen haben solche abschließend sulfonierten Membranen bei 80 °C über 4.500 Stunden Lebensdauer ohne merkliche Degradation demonstriert [38].

Eine Möglichkeit wasserunabhängiger Protonenleitung stellen heterozyklische Kohlenwasserstoffe mit Wasserstoffatomen und einem freien Elektronenpaar dar, wie dies zum Beispiel bei

Imidazol ($C_3H_4N_2$) der Fall ist [39]. Eine Weiterleitung von Protonen könnte hier ähnlich der Wasserstoffbrückenbildung bei H_2O allein durch eine räumliche Rekoordination der N-H-Bindungen erfolgen und wäre damit vom Diffusionsmechanismus entkoppelt. Um die Imidazoleinheiten trotz der erhöhten Betriebstemperatur in der Membran zu halten, werden diese an Makromolekülen oder Nanopartikeln verankert [40]. Untersuchungen hierzu befinden sich noch im Bereich der Grundlagenforschung.

2.2.3 Auswahl von Ionomeren für die ökonomische Analyse

Die eben in Kürze dargestellte Vielfalt möglicher Werkstoffe für die protonenleitende Membran macht es erforderlich, für die Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen einige wenige Lösungsmöglichkeiten auszuwählen. Deren produktionstechnische Umsetzung wird Kapitel 6 näher untersuchen. In sehr ähnlicher Weise soll die Methodik der vorliegenden Arbeit aber auch systematisch auf andere Protonenleiter applizierbar sein, sobald diese aufgrund technologischer Weiterentwicklungen stärker in den Vordergrund treten. Folgende Kriterien spielen bei der Auswahl eine wichtige Rolle :

- ◆ Derzeitiger Einsatz in Prototypen von Brennstoffzellen und deren Stacks
- ◆ Grad des Interesses seitens von Wissenschaftlern und Entwicklern
- ◆ Stand der laborchemischen beziehungsweise technischen Entwicklung
- ◆ Nachweis der vollen Funktionalität unter den bei PEFC-Stacks der kW-Klasse aus systemtechnischer Sicht günstigen Betriebsbedingungen
- ◆ Basischarakter hinsichtlich weiterer Membranvarianten (materialtechnologische Plattform)
- ◆ Klarheit in Bezug auf eine definierte Materialauswahl und -zusammensetzung
- ◆ Dokumentation der möglichen Synthesewege

Unter Berücksichtigung dieser Aspekte wurden fünf verschiedene Polymere ausgewählt und hinsichtlich ihrer Herstellung näher untersucht. Es sind dies die folgende Materialien :

1) Nafion[®] aus dem Hause des US-amerikanischen Herstellers *E.I. DuPont de Nemours*. Dieses Polymer steht stellvertretend für die Gruppe der sehr ähnlich aufgebauten perfluorierten Iomere, die zunächst für das Membranverfahren der Chlor-Alkali-Elektrolyse konzipiert wurden. Es ist das am weitesten entwickelte und derzeit auch meistgenutzte Material für PEFC-Prototypen. Chemisch gesehen handelt es sich bei Nafion[®] 1100 um ein Copolymer aus Tetrafluorethen (TFE, C_2F_4) und einem perfluorierten Fluorsulfonyl-Vinylether im molaren Verhältnis von etwa 6,5 : 1 [41, p. 38]. Details zeigt Kapitel 6.

Die japanischen Anbieter *Asahi Chemical* und *Asahi Glass* bieten sehr ähnliche Polymere an, die jedoch auf einem etwas anderen Weg produziert werden [41, p. 39]. Die erwähnten Produkte kommen auch bei der Firma *W.L. Gore & Associates* zum Einsatz [42, p. 10], um sie zur mechanischen Verstärkung mit einem firmeneigenen, hochexpandierten PTFE-Gewebe zu kombinieren und so ebenfalls dünne und leistungsstarke Membranen herzustellen (Gore-Select[®]). Die Herstellung eines weiteren verwandten Materials durch die *DOW Chemical Corp.* musste Mitte der 90er Jahre eingestellt werden, nachdem eines der chemischen Zwischenprodukte verboten worden war [42, p. 8].

2/3) BAM3G stammt aus der Polymerentwicklung der kanadischen *Ballard Power Corp.*, die seit Beginn der 90er Jahre ein eigenes Membranmaterial entwickelt hat. Die Bezeichnung geht

zurück auf die Abteilung *Ballard Advanced Materials*, 3G steht für die "dritte Generation". Das Polymer besteht aus einer zu Nafion® identischen perfluorierten Hauptkette ähnlich dem PTFE. Die Herstellung erfolgt aber nicht mit TFE selbst, sondern nur aus verschiedenen Monomeren mit der allgemeinen Formel $F_2C=CF-R$. Der Rest R kann hierbei sehr unterschiedliche Strukturen besitzen.

Das Membranmaterial ist im Unterschied zu den zuvor genannten nicht frei verkäuflich, sondern wird nur von Ballard selbst für den Eigenbedarf synthetisiert. Es hat inzwischen auch Leistungsvermögen und Langlebigkeit nachgewiesen.

Die Ballard-Entwicklung wird in Kapitel 6 in zwei unterschiedlichen Strukturen analysiert, da sie in gleichem Maße in den Patentveröffentlichungen beschrieben werden. Variante 1 ist ein sulfoniertes Copolymer (im Weiteren als BAM3G-SC bezeichnet) und Variante 2 ein nach der Polymerisation hydrolysiertes Terpolymer aus drei verschiedenen Monomeren (BAM3G-HT).

4) Sulfoniertes Polyetherketon PEEK wird von einer großen Zahl an Forschungseinrichtungen und Firmen untersucht. Die ausgewählte Variante mit zwei Ether- und einer Keto-Einheit steht stellvertretend für die gesamte Gruppe von Polyetherketonen (auch als PE_mK_n bezeichnet). In der Literatur finden sich umfangreiche Veröffentlichungen zu Sulfonierung und Brennstoffzellentests von PEEK. Das unsulfonierte Polymer wird kommerziell vor allem von der Britischen Firma *Victrex plc.* im Maßstab von rund 2.500 Tonnen p.a. für den Markt thermisch stark belastbarer Hochleistungspolymere hergestellt (Victrex PEEK®). Seit 2002 wird PEEK zusätzlich in Indien von *Gharda Chemical* hergestellt.

5) Phosphorsäure-dotiertes Polybenzimidazol PBI beruht auf dem von *Celanese Ventures* exklusiv hergestellten und vertriebenen heterozyklischen Polymer mit Handelsnamen *Celazole®*. Wie bei PEEK, so handelt es sich auch hier zunächst um ein bereits kommerzielles, hochtemperaturresistentes Sondereinsatzpolymer. Es wird allerdings überwiegend der Kunstfaserproduktion zugeführt, und die daraus gewobenen Textilien finden in Feuerschutzanzügen Verwendung. Die Kapazität der PBI-Anlage in Rock Hill / South Carolina wird von Herstellerseite mit 100 Tonnen p.a. angegeben.

Tränkt man eine Membran aus Polybenzimidazol in Phosphorsäure, so wird ein Teil des H_3PO_4 an die Polymerstruktur gebunden und verleiht ihr die geforderten protonenleitenden Eigenschaften. Alternativ wären über Zusatzreaktionen auch kovalent gebundene Seitenketten mit ionischen Endgruppen möglich, die hier jedoch nicht weiter untersucht werden sollen.

Phosphazene sind bisher nur mit Einschränkungen bewertbar. Wie bereits erwähnt, wird an ihnen nur von wenigen Forschungsgruppen mit Blick auf Brennstoffzellen-Anwendungen gearbeitet. Ein Leistungsnachweis oberhalb von 80 °C steht offenbar noch aus. Hinzu kommt, dass ihr chemischer Aufbau für Bewertungen des gesamten Darstellungsweges noch nicht ausreichend konkret ist. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit sollen sie daher noch nicht betrachtet werden. Allerdings handelt es sich um eine komplett eigenständige Gruppe von Makromolekülen, die in Zukunft durchaus stärker ins Interesse der technischen Entwicklung rücken könnte. Das folgende Bild 2.5 zeigt nun abschließend zur Übersicht die chemischen Wiederholungseinheiten derjenigen Polymere, deren Synthesen in Kapitel 6 beschrieben und analysiert sind.

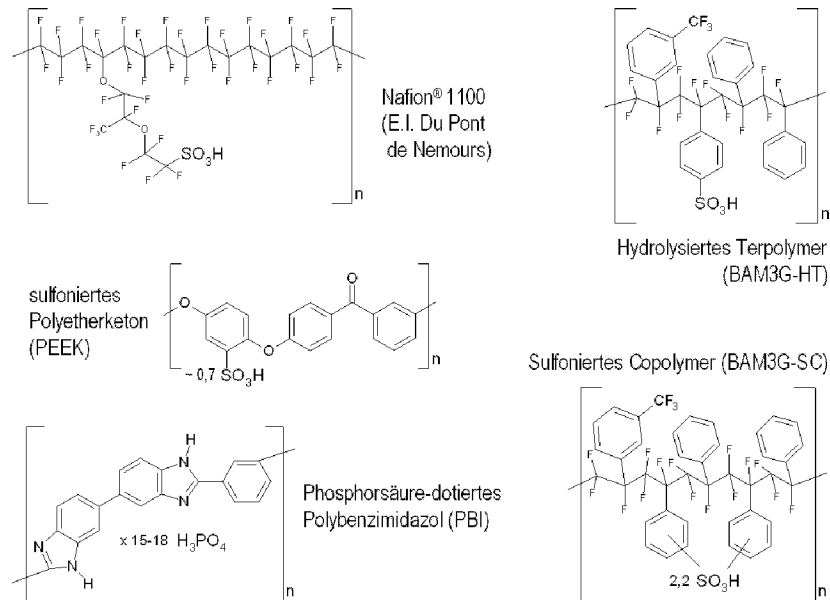


Bild 2.5 : Wiederholungseinheiten der fünf für Kapitel 6 ausgewählten Polymere

Wie zu erkennen ist, handelt es sich um drei Polymervarianten auf Fluorbasis sowie zwei fluorfreie Alternativen. Bis auf PBI basiert der Leitungsmechanismus für die Protonen bei allen Ionomeren auf Sulfonsäuregruppen. Für hohe Leitfähigkeiten sind diese auf einen gewissen Wassergehalt in der Membran angewiesen. Die obere Temperaturgrenze im Betrieb liegt daher nahe $100\text{ }^\circ\text{C}$, dem Siedepunkt des Wassers bei Atmosphärendruck. Höhere Temperaturen können unter Überdruck erreicht werden, jedoch steigt hierbei auch der energetische Aufwand für Kompression und Befeuchtung der reagierenden Gase stark an. Letztere können über $100\text{ }^\circ\text{C}$ hohe Wassermengen aufnehmen, deren Verdampfungsenthalpie dem System zuzufügen ist. Diesen Gegebenheiten unterliegt das H_3PO_4 -getränkte Polybenzimidazol nicht, da es sich bei Phosphorsäure bereits um einen intrinsischen Protonenleiter handelt. Ihr hoher Siedepunkt wirkt sich vorteilhaft aus, da er hohe Betriebstemperaturen ermöglicht und eine Gasbefeuchtung einfacher werden beziehungsweise ganz entfallen kann.

Tabelle 2.2 : tabellarische Übersicht der diskutierten protonenleitenden Polymere

	Hersteller des Basismaterials	frei von Fluoratomen	Lebensdauer > n · 1000 h	H ⁺ -Leitungsmechanismus	maximale Einsatztemp.	Kommerzialisierung
Nafion®	DuPont	–	+	$\text{SO}_3\text{H}-\text{H}_2\text{O}$	~ $100\text{ }^\circ\text{C}$	+
BAM3G	Ballard	–	+	$\text{SO}_3\text{H}-\text{H}_2\text{O}$	~ $100\text{ }^\circ\text{C}$	o
sPEEK	Victrax, Gharda	o	–	$\text{SO}_3\text{H}-\text{H}_2\text{O}$	~ $120\text{ }^\circ\text{C}$	o
PBI	Celanese	+	+	H_3PO_4	~ $200\text{ }^\circ\text{C}$	o
(PN) _n	Bechtel et al.	+	–	$\text{SO}_3\text{H}-\text{H}_2\text{O}$	~ $80\text{ }^\circ\text{C}$	–

2.3 Katalysatormaterialien

In engem Kontakt mit der protonenleitenden Membran befindet sich auf beiden Seiten Katalysatormaterial, das die reaktiven Zentren für die Anoden- und Kathodenreaktionen in der Brennstoffzelle bereitstellt (Bild 2.1, Seite 9).

In dieser zentralen Position entlang der Grenzschicht zwischen dem Gasraum mit den Reaktanden, dem Elektrolyten zur Ionenleitung und dem elektrischen Stromableiter für die Elektronenverteilung, ist für den Katalysator ein intensiver Kontakt zu allen drei benachbarten Phasen von essenzieller Bedeutung. Folgende Funktionen sind beispielsweise vom Anoden-Katalysator simultan zu übernehmen :

- ◆ Adsorption, Aktivierung und Oxidation des gasförmigen Wasserstoffs
- ◆ Weiterleitung der Protonen in den Elektrolyten
- ◆ Ableitung der Elektronen in die Elektrode

Für die Kathodenseite gelten die Aufgaben im Zusammenhang mit der Reduktion des Luftsauerstoffs entsprechend. Die Aufnahme von Protonen und Elektronen führt dort über Zwischenreaktionen zur H_2O -Bildung. Somit lassen sich für die Katalysatoren folgende Materialanforderungen ableiten :

- ◆ gute elektrische Leitfähigkeit
- ◆ hohes Adsorptions- und Dissoziierungsvermögen für H_2 beziehungsweise O_2
- ◆ niedrige Überspannungen dieser Gase
- ◆ hohe Austauschstromdichten für die gewünschten Elektrodenreaktionen
- ◆ chemische Stabilität in oxidierender und reduzierender Atmosphäre sowie in Säuren
- ◆ gute Möglichkeit der feinen und homogenen Verteilung auf den Phasengrenzflächen

2.3.1 Platin als zentraler Bestandteil von PEFC-Katalysatoren

Während bei alkalischen Brennstoffzellen (AFC) noch Materialien wie Nickel oder Silber für die Elektroden benutzt werden können, so haben sich im Fall der PEFC mit ihrem säurehaltigen Elektrolyten häufig nur Katalysatoren auf der Basis des Edelmetalls Platin (Pt) als hinreichend aktiv und beständig erwiesen.

Forschung und Entwicklung streben danach, dessen katalytische Aktivität zu stabilisieren beziehungsweise zu erhöhen, indem insbesondere auf der Anodenseite weitere Legierungsmetalle oder deren Oxide zugesetzt werden. Hierbei handelt es sich in erster Linie um Ruthenium (Ru). Ferner sind auch Rhodium (Rh), Pt-WO_3 oder SnO_2 als mögliche Zusätze zu Platin in der Diskussion [43, p. 111].

Neue Laboruntersuchungen deuten bei Zusatz von Nickel oder Kobalt auf Verbesserungen der Sauerstoffreduktion an der Kathode hin [44]. Andere Publikationen bestätigen diese positiven Effekte durch Legierungsbildung mit zusätzlichen Metallen wie Chrom, Kobalt oder Nickel [45, 46, 47]. Die im Vergleich zum Platin unedleren Legierungspartner haben eine höhere Sauerstoffaffinität und können intermediäre Adsorbate wie OH^- von benachbarten Pt-Atomen übernehmen, wodurch das Platin selbst schneller wieder als aktives Zentrum für weitere Reduktionen zur Verfügung steht [45, p. 3802]. Andererseits ist noch unklar, in welchen Betriebszuständen sich weniger edle Bestandteile aus dem Katalysator lösen und in die Mem-

bran eindiffundieren. Dies würde die Lebensdauer durch ein irreversibles Blockieren der SO_3^- -Gruppen stark vermindern.

Bei der Betrachtung von Kostenaspekten in dieser Arbeit liegt der Schwerpunkt somit zunächst auf dem Hauptbestandteil Platin selbst. Da es bisher in Mengen von mehreren Gramm je m^2 Brennstoffzellenfläche benötigt wird, stellt allein der Materialwert des Edelmetalls bereits einen beträchtlichen Kostenfaktor dar. Er lässt sich in einfacher Weise zu den Herstellkosten anderer Stack-Komponenten in Relation setzen.

2.3.2 Höhere Platin-Nutzungsgrade bei Trägerung auf Leitfähigkeitsruß

Anders als bei Verbrennungsprozessen, deren in Nutzleistung wandelbare Energiefreisetzungsrate proportional zum Reaktionsvolumen ist, handelt es sich bei Brennstoffzellen-Stacks um eine oberflächenproportionale Umwandlungsreaktion. Für die Katalysatorschichten bedeutet dies, die aktiven Oberflächen innerhalb der eingangs erwähnten Dreiphasen-Grenzschicht möglichst groß zu gestalten und dabei zugleich den Gehalt an katalytisch inaktivem Platin zu minimieren.

Während in Prototypen nicht selten das reine Edelmetall in fein pulverisierter Form Eingang fand (*Black Metal Powder*), so bestehen weiter gereifte Katalysatormischungen aus einer Kohlenstoffstruktur mit speziell eingestellter Morphologie, auf der dann feine Platinpartikel aus einer Lösung komplexierter Platinionen heraus abgeschieden werden. Die Abscheidung auf dem elektrisch leitfähigen Träger führt bei präzise eingestellten Reaktionsbedingungen zu Platin-Nanopartikeln mit 2,5 nm Durchmesser und darunter. Massenbezogene Oberflächen liegen dann bei rund 60 bis 120 m^2 pro Gramm Platin [48]. Während noch 1997 die optimalen Gehalte an Platin im Katalysator bei etwa 20-40 Ma.-% vermutet wurden [49], da bei höheren Werten die Partikelgröße zunahm, so sind führende Hersteller heute in der Lage, die Nanopartikel auch noch bei 60-70 Ma.-% gleichbleibend klein zu halten [48].

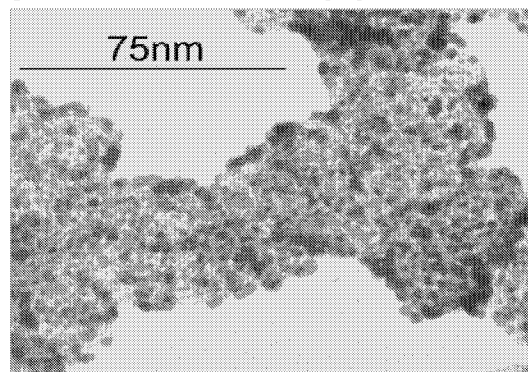


Bild 2.6 : Platinkatalysator auf Kohlenstoff mit 70 Ma.-% Pt [48]

Bild 2.6 zeigt die TEM-Aufnahme* eines Kohlenstoff-geträgerten Platinkatalysators mit 70 Ma.-% Pt. Im Ausschnitt ist eine sehr homogene Verteilung sowie eine hohe Bedeckung der Grundstruktur mit den Nanopartikeln zu sehen.

* Transmissions-Elektronen-Mikroskopie

2.3.3 Nasschemisches Verfahren zur Synthese geträgerter Platinkatalysatoren

Das elektrisch leitende Trägermaterial bildet grafitisierter Ruß aus Öl- oder Ethin-Feuerungen (Acetylen), der im Maßstab mehrerer Millionen Tonnen pro Jahr hergestellt wird [50]. Rund 60 % dieses weltweit produzierten *Carbon Black* wird Gummi-Mischungen für Autoreifen zur erhöhten Gasdichtigkeit und als UV-Schutz zugesetzt. Weitere etwa 20 % sind Zusätze zu Elastomer-Mischungen für Schläuche und ähnliche Formteile. Andere Märkte für Rußkohlenstoff sind Toner für Kopierer und Drucker, Pigmente oder elektrisch leitende Kunststoffe [51]. Durch eine nachgeschaltete Oberflächen-Grafitisierung kann der Ruß eine erhöhte elektrische Leitfähigkeit erhalten [52].

Das bisher vorrangig eingesetzte Verfahren zur Katalysatorherstellung ist die nasschemische Fällung der Metalle aus gut wasserlöslichen Kationenkomplexen, wie Bild 2.7 schematisch zeigt. Sie geschieht in alkalischen Wasser-Suspensionen der Kohlenstoffpartikel und ist ebenso auf reines Platin wie auch auf Legierungen applizierbar. Deren Metalle lassen sich unter kontinuierlichem Rühren sequenziell oder simultan abscheiden; zunächst jeweils in Form unlöslicher Hydroxid-Hydroperoxo-Komplexe $\text{Me}(\text{OH})_m(\text{OOH})_n$ [53, p. 4441]. Um der Suspension aus Wasser und grafitisiertem Ruß basischen Charakter zu verleihen, erfolgt zuvor im allgemeinen eine Zugabe von Soda, Natron oder verdünnter Natronlauge [46, 47].

Legierungsmetalle wie Chrom, Kobalt oder Nickel für Kathoden werden vorwiegend als Nitratkomplex-Lösungen zugegeben; Ruthenium für Anodenkatalysatoren häufig als Kolloid aus Rutheniumchlorid [54]. Für Platin selbst gibt es zwei Alternativen: Entweder kommt Hexachlorplatinsäure (H_2PtCl_6) [47] oder das daraus synthetisierbare Platinnitrat zum Einsatz. Letztere Variante bietet die Möglichkeit, das Platin gemeinsam mit den gewünschten Legierungselementen in einem Verfahrensschritt zu fällen [46].

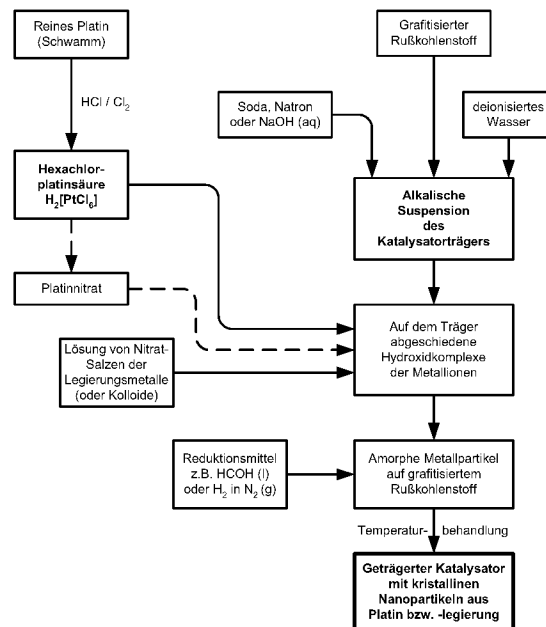


Bild 2.7 : Herstellung geträgerter Katalysatoren im chemischen Nassverfahren

Die zentralen Kationen der erwähnten Hydroxid-Hydroperoxo-Komplexe werden nach der Abscheidung mit einem Reduktionsmittel in ihre metallische Form überführt, haben dann aber zunächst noch eine amorphe Struktur. Erst eine nachgeschaltete Temperaturbehandlung bei etwa 930 °C überführt das Platin und die anderen Metalle innerhalb von rund einer Stunde in geordnete Kristallgitter. Der hierfür vorgegebene Zeit-Temperatur-Verlauf bestimmt dabei maßgeblich die Katalysator-Morphologie (Gitterstruktur, Partikelgrößenverteilung, spezifische Platinoberfläche, Anteil der elektrochemisch aktiven Metallatome) [46].

2.3.4 Synthese von Katalysatoren mittels Spray-Verdampfung

Eine prozesstechnisch sehr attraktive Alternative zum beschriebenen nasschemischen Fällungsverfahren stellt die Sprühstrahlverdampfung einer kolloidalen Lösung der Kohlenstoffträger inklusive der Metallsalz-Lösungen dar [55]. Ultraschall-Aktoren versprühen die wässrige Mischung zu einem feinen Aerosol. Dieses wird unter Zuhilfenahme eines Trärgases in einer beheizten Rohrstrecke von einigen Metern Länge bei kurzer Verweilzeit einem einstellbaren Temperaturprofil bis etwa 1100 und 1400 °C ausgesetzt.

Die *in situ* entstehenden Partikel durchlaufen zunächst die Phase der Flüssigkeitsverdampfung, ehe sich dann bei immer höheren Temperaturen durch Verdichtungs-, Sinter- und Kristallitwachstum zunächst amorphe, dann nano- und schließlich polykristalline Partikel ausbilden. Sie haben Größen um 1,4 µm und enthalten Substrukturen mit Metall-Nanopartikeln zwischen 1 und 3,5 nm [56]. Bild 2.8 verdeutlicht mögliche Umwandlungen schematisch entlang des Zeit-Temperatur-Pfades.

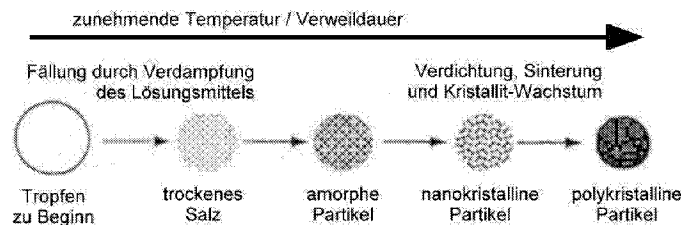


Bild 2.8 : Partikel-Modifikationen während der Spray-Verdampfung, nach [56]

Anders als bei der langsamen Fällung aus Lösungen entstehen hierbei Produkte, deren Morphologie deutlich stärker von kinetischen Effekten bestimmt wird. Die Partikel stellen thermodynamisch gesehen einen fixierten Ungleichgewichtszustand dar.

Vorteile einer derartigen Variante können sein :

- ◆ quasi einstufige Synthese ohne aufwändige Trennverfahren
- ◆ hohe Raum-Zeit-Ausbeute durch niedrige Verweilzeiten im Sekundenbereich
- ◆ hohe Aktivität der Metallpartikel durch eine große spezifische Oberfläche
- ◆ geringe Mengen an zu behandelnden Suspensionen
- ◆ niedriger Personalaufwand, flexible Produktionsmenge und Möglichkeit des *scale-ups*

Das Verfahren ist von einer US-amerikanischen Firma patentrechtlich geschützt und in [57] allgemein beschrieben, da sich mit einer entsprechenden Anlage auch noch andere Arten von technischen Pulvern herstellen lassen.

Weitere Offenlegungsschriften gehen näher auf Metall-Kohlenstoff-Compositpulver ein oder beschäftigen sich explizit mit platinhaltigen Mischungen [58, 59]. Sehr bedeutend ist an dieser Stelle, dass auch dieser Prozess bevorzugt auf Hexachlorplatinsäure und kristallinen Rußkohlenstoff als Ausgangsmaterialien zurückgreift [59, *claim* 48] [58, *col.* 8, 53-55].

Die Gegenüberstellung der beiden in der industriellen Entwicklung befindlichen Herstellverfahren für geträgerte Katalysatoren hat gezeigt, wie unterschiedlich die Prozesse sein können. Allerdings sind beide im gleichen Maße auf dieselben Ausgangssubstanzen angewiesen: Rußkohlenstoff in ähnlichen Modifikationen und Übergangsmetallnitratre in Komplexlösungen. Eine herausragende Stellung nimmt in allen Fällen das bisher essenzielle Edelmetall Platin ein, aus dessen reinem so genanntem "Schwamm" (*Sponge*) die für die Produktionen nötige Hexachlorplatinsäure H_2PtCl_6 hergestellt werden muss. Ausführlichere Informationen zur Gewinnung und Weiterverarbeitung von Platin sind der Literatur zu entnehmen [60, p. 10] [61].

2.4 Gasdiffusionsmaterialien

In Bild 2.1 (Seite 9) war bereits zu erkennen, dass sich zwischen der mit Katalysator belegten Membran und den Bipolarelementen auf Anoden- und Kathodenseite noch zusätzliche Schichten befinden - so genannte Gasdiffusionslagen (GDL). Deren Funktionen sind :

- ◆ homogene Verteilung der Gase, die über die Kanalverteilungsstruktur der Bipolarplatten eintreten und nun orthogonal zur Strömungsrichtung über Diffusion an die katalytisch aktive Schicht gelangen sollen (im Besonderen H_2 und O_2)
- ◆ gleichzeitiger Abtransport der Reaktionsprodukte (vor allem H_2O) in umgekehrter Richtung - vom Katalysator weg in den konvektiven Gasstrom aus der Zelle
- ◆ Transfer der Elektronen zwischen Elektroden und angrenzenden Bipolarelementen
- ◆ Schutz der aktiven Katalysatorschichten vor Beschädigung bei der Montage

Hieraus ergeben sich für die Gasdiffusionsmaterialien folgende Anforderungen :

- ◆ ausreichend hohe Porosität und Stoffübertragungskoeffizienten
- ◆ hydrophobe innere Oberflächen
- ◆ gute elektrische Leitfähigkeit
- ◆ dünnes und zugleich robustes Material

Für die Trägerstruktur wird auf Kohlefaserewebe oder carbonisiertes Papier zurückgegriffen, das im Stack zwischen 200 und 400 μm dick ist. Sie müssen allerdings zuvor hydrophobisiert werden, um die Adsorption feiner Wassertropfen im dichten Netz der Fasern zu verhindern. Sie würde den Fluidaustausch im Betrieb unvermeidlich behindern. Verwendet wird zur Hydrophobisierung der Fasern in der Regel eine Suspension aus PTFE und Ruß. Bild 2.9 zeigt zur Veranschaulichung elektronenmikroskopische Aufnahmen einer mit 5 Ma.-% PTFE beschichteten Faserstruktur.

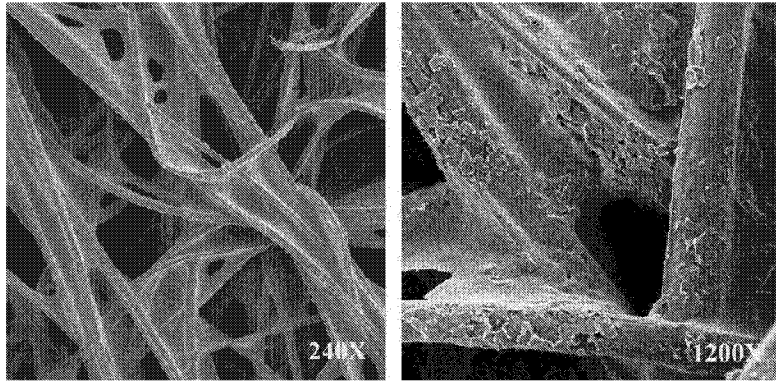


Bild 2.9 : REM-Aufnahmen * eines mit PTFE beschichteten Kohlefasergewebes [62]

Die Produktion von Gasdiffusionslagen setzt Kunstfasergewebe aus Polyacrylnitril (PAN) ein, das als Rollenware einen kontrollierten Verkokungs- und Grafitisierungsprozess durchläuft. Entlang der Fasern weist das fertige Carbonegewebe neben guter elektrischer Leitfähigkeit eine extrem hohe mechanische Festigkeit auf, derentwegen es auch in Carbonfaser-verstärkten Kunststoffen (CFK) Anwendung findet [63].

2.5 Herstellung von Membran-Elektroden-Einheiten

Das auf eine spätere optimale Funktionalität ausgerichtete Zusammenfügen der in 2.2 bis 2.4 beschriebenen Bestandteile einer Membran-Elektroden-Einheit (MEA) bedarf einer ausgereiften Technologie, die sich derzeit bei mehreren Herstellern in der industriellen Entwicklung befindet. Kernoperationen sind hierbei die Beschichtungsvorgänge, in denen großflächige, homogene Beläge in reproduzierbarer Qualität auf flexible Substrate aufgetragen werden müssen. Einen Querschnitt durch eine sich schließlich ergebende MEA zeigt Bild 2.10 :

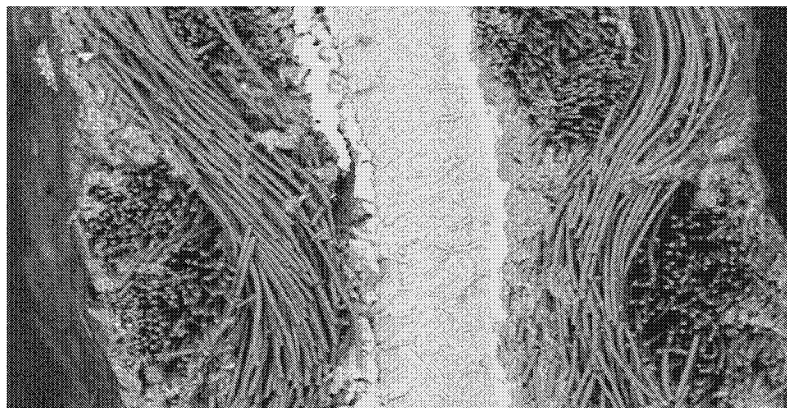


Bild 2.10 : MEA-Einheit mit Membran, Katalysatorschichten und Gasdiffusionslagen. Dicke ~ 1,1 mm [64]

Die folgenden Abschnitte stellen prinzipiell mögliche Prozess-Alternativen zur Beschichtung vor.

* Raster-Elektronen-Mikroskopie

2.5.1 Vakuum-Aufdampfverfahren

Sie kombinieren Katalysatorentstehung und Abscheidung auf einem Substrat. Verschiedene Varianten der *Physical Vapor Deposition* (PVD) mit oder ohne Elektronenstrahl besitzen prinzipiell beachtliche Potenziale, jedoch sind bisher über Produkte und Prozesse im Zusammenhang mit MEAs nur wenige Informationen zugänglich [65]. Wichtige Fragen wie zum Beispiel die genaue Morphologie der entstehenden Partikel (üblicherweise ungeträgerte Metallmischungen) oder die strukturellen Ursachen für deren angeblich hohe Aktivität sind noch unklar.

Neue Varianten schlagen vor, über eine von einem Brenngas erzeugten Flamme polymerhaltige Katalysator-Suspensionen in Nanopartikel zu überführen [66]. Allerdings bleiben Aspekte wie die thermische Stabilität der Makromoleküle unsicher. Solange grundlegende technologische Ausführungen noch unvollständig sind und zudem gewisse Zweifel an der technischen Umsetzbarkeit der Verfahren bestehen, bleibt der Sinn techno-ökonomischer Analysen noch fraglich.

2.5.2 Sprühverfahren

Sprühprozesse mit Suspensionen oder Trockenpulvern werden von einigen wissenschaftlichen Gruppen entwickelt und eingesetzt [67, 68, 69]. Solche Prozesse haben jedoch den Nachteil, dass derartiges Sprühen bei den für PEFC-Stacks gängigen Außenmaßen von bis zu mehreren Dezimetern Kantenlänge leicht zu Beschichtungen inhomogener Dicke führen kann. Dies liegt an der schwer zu kontrollierenden Strahlrichtung und -zusammensetzung. Zusätzlich treten an den Kanten der gewünschten Geometrie Materialverluste im Prozentbereich auf, die speziell für Edelmetall-Katalysatoren nicht akzeptabel sind.

2.5.3 Bandbeschichtungen und Siebdruckverfahren

Diese beiden sehr ähnlichen Verfahren sind diejenigen, welche derzeit am häufigsten eingesetzt und am intensivsten weiterentwickelt werden. Daher sollen sie an dieser Stelle näher beschrieben werden.

Wie bei anderen industriellen Druckverfahren, so trägt auch hier eine geeignete Anordnung von Walzen und Rakeln speziell angepasste Lösungsmittel-Suspensionen des Katalysators (auch als "Tinten" bezeichnet) für die einzelnen Funktionsschichten auf ein Substrat auf, welches die Maschine als Rollenmaterial durchläuft. Den Auftragswerken nachgeschaltete Trocknungs- und Sinterstrecken entfernen dann flüchtige Bestandteile aus der Schicht und bewirken im Anschluss eine feste Verbindung mit dem Substrat [70]. Der klare Vorteil solcher Verfahren besteht darin, dass die endgültige Mikrostruktur der MEA anhand vieler einstellbarer Prozessparameter gut beeinflusst und reproduzierbar hergestellt werden kann.

Da im montierten Brennstoffzellen-Stack später immer nur ein Teil der gesamten Querschnittsfläche einer Zelle elektrochemisch aktiv ist, sollte auch nur in diesem entsprechenden Bereich katalytisch aktives Material aufgetragen sein. Diese Berücksichtigung der Geometrie ist bei der kontinuierlichen Bandbeschichtung zunächst nicht möglich. Hier müssen aus der fortlaufenden Bahn erst einzelne Flächen ausgestanzt werden, die später die reaktiven Bereiche der Zellen im Stack darstellen. Nachfolgend erhalten diese Aktivflächen am Rand eine geeignete Geometrie zur Medienversorgung und Abdichtung, beispielsweise durch einen Polysulfonrahmen oder

über Silikonspritzguss [71]. Erst dann ist die MEA als Baugruppe vollwertig einsetzbar und bereit für die Stackmontage.

Als ein weiterentwickeltes Verfahren ermöglicht der Rotationssiebdruck, die Stackgeometrien direkt zu berücksichtigen und nur auf die später reaktiven Flächen auch Katalysator-Suspensionen aufzutragen. Dies geschieht über eine Siebwalze, die bereits das Muster der MEA-Geometrie in aufgerollter Form enthält. Ein schematisches Beispiel für eine einfache anlagen-technische Umsetzung von Bandbeschichtungen oder Siebdruckverfahren zeigt Bild 2.11. Neben den variablen Möglichkeiten zur Anordnung verschiedener Auftragswerke (links) wird ein Großteil des Bauvolumens von den Trocknungsstrecken (rechts) in Anspruch genommen.

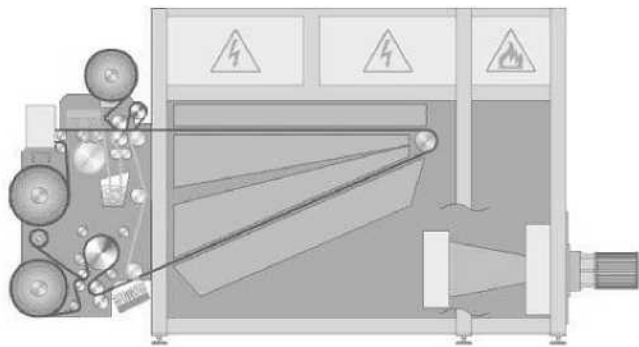


Bild 2.11 : Schematische Darstellung einer Anlage zur nasschemischen Beschichtung [72]

Um ein wie in Bild 2.10 gezeigtes Fünf-Schicht-System herzustellen, bedarf es mindestens zweier Beschichtungs- und mindestens zweier Kaschier-Aufträge, da die Katalysatorlagen aus Suspensionen heraus entstehen und Membran sowie Gasdiffusionslagen in der technischen Praxis als Rollenmaterialien vorliegen. Wie die entsprechenden Darstellungen Bild 2.12 und Bild 2.13 aufzeigen, so bestehen für den Aufbau der gesamten MEA folglich zwei produktions-technologische Alternativen :

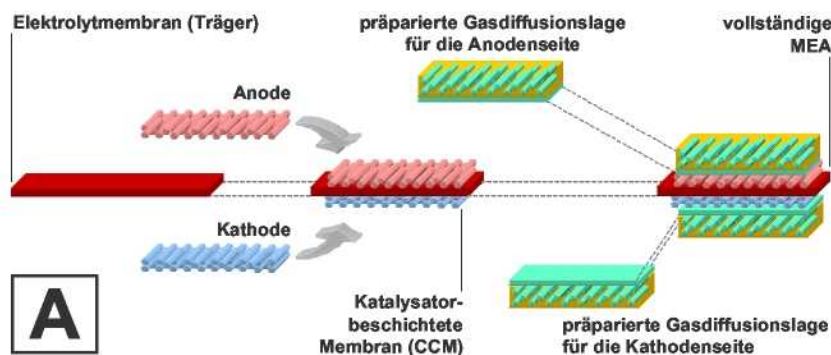


Bild 2.12 : MEA-Aufbau über Katalysator-beschichtete Membranen, nach [70]

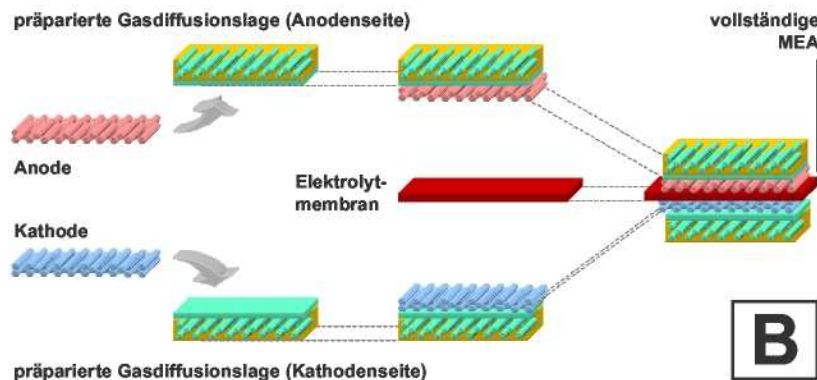


Bild 2.13 : MEA-Aufbau über Katalysator-beschichtete Gasdiffusionslagen, nach [70]

- A) Die Katalysator-Suspensionen werden auf die Membran aufgetragen und bilden dadurch eine Katalysator-beschichtete Membran (*catalyst coated membrane, CCM*). Sie wird danach in den Kaschierprozessen mit vorpräparierten Gasdiffusionslagen (GDL) verbunden.
- B) Die Katalysator-Suspensionen werden zunächst auf die entsprechend vorbereiteten GDLs aufgetragen, die im Anschluss gemeinsam mit einer zentral zugeführten Membran miteinander kaschiert werden (vergleiche Bild 2.13).
- C) Hybridverfahren aus den Prozessen A und B: Der eine Katalysator wird auf seiner GDL, der andere aber direkt auf der Membran aufgetragen. Die Kaschierungen finden dann entsprechend statt.

Der ergänzend aufgeführte Fall C deutet bereits an, dass sich in der Praxis eine größere Anzahl an Schaltungsvarianten der einzelnen Arbeitsschritte ergibt, die im Hinblick auf die Leistungsfähigkeit der hergestellten MEAs klar zu verschiedenen guten Ergebnissen führt. Eine Literaturstelle erwähnt den asymmetrischen Aufbau explizit als ein vorteilhaftes Verfahren, weil er in Tests zu leistungstärkeren MEAs führt [73].

Jedoch hat die Reihenfolge der durchgeführten Operationen zumeist nur einen sehr geringen Einfluss auf die Investitionskosten der Anlagen oder die mögliche Ausbringleistung an Produkt. Von ausschlaggebenderer Bedeutung sind die Fertigungstiefe beziehungsweise der Automatisierungsgrad der Anlage. Leicht nachvollziehbar ist, dass eine Maschine wie in Bild 2.11 meist nur einen Arbeitsschritt kontrolliert durchführen kann. Folglich sind mehrere Durchläufe durch die Anlage erforderlich; in der Regel etwa vier bis acht [74].

Eine mögliche industrielle Realisierung eines kontinuierlichen Betriebs ist in Bild 2.14 genauer illustriert [73]. Die Beschichtungen und Kaschierungen finden entlang der Hauptlinie statt, bestehend aus den Operationseinheiten 20 bis 23. Die Walzen 13 und 17 führen in der vollautomatisierten Anlage die Gasdiffusionslagen zu, deren Präparation in den peripheren Einheiten 24 und 25 geschieht. Diese Konditionierung der GDLs kann bei einer Teilautomation aber auch bereits zeitlich vorgelagert auf der Hauptlinie durchgeführt worden sein. Wird für eine Beschichtung die oben genannte Technologie B anstelle von A angewandt, so verschiebt sich der Katalysatorauftrag von 20 nach 24 beziehungsweise von 22 nach 25.

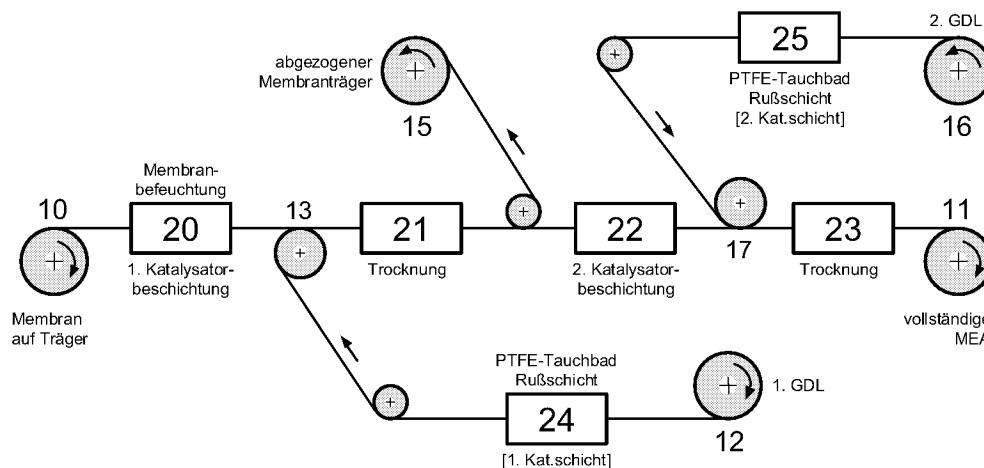


Bild 2.14 : vollautomatisierbare, kontinuierliche Herstellung fünflageriger MEAs [73]

Die Trägerfolie, auf der die 25 bis 100 μm dünnen Ionormembranen üblicherweise von den Herstellern geliefert werden, dient der mechanischen Stabilisierung sowie der besseren Konditionierung der Membran. Es verhindert ein Austrocknen oder Verkleben der sehr dünnen Folie. Die Hilfsschicht kann abgezogen werden, sobald eine Seite der Membran mit der etwa zehnmal dickeren und deutlich zugfesteren GDL verbunden worden ist. Die angesprochene Beanspruchung auf Zug, die in der Beschichtungsanlage die Hauptlinie unter Spannung hält, steht auch einer Durchführung des Prozesses rein nach Prozess A entgegen: Die nur etwa 35 bis 60 μm dicke CCM-Folie muss vorsichtig und ohne die Erzeugung lokaler Defekte durch die Auftragswerke der Anlage transportiert werden.

Um eine Basis für kostentechnische Betrachtungen der MEA-Fertigung zu schaffen, ist im Rahmen einer Diplomarbeit eine Kostenanalyse ähnlich der in Kapitel 4 entwickelten Methodik zunächst für eine Beschichtungsanlage im Technikumsmaßstab durchgeführt worden, wie sie Bild 2.11 schematisch gezeigt hat [74]. Auch wenn das Verfahren mit einer solchen Maschine noch nicht voll automatisierbar ist, so ist dieser Ansatz dennoch gerechtfertigt: Gerade zu Beginn einer Kommerzialisierung umfassen die Einzelaufträge meist nur mäßige Losgrößen und bedürfen zudem kundenindividueller Anpassungen bei der MEA-Herstellung.

2.6 Sonstige Stackbestandteile

Für die endgültige Montage der Brennstoffzellen-Stacks (so genannte Assemblierung) werden auch Zusatzteile benötigt, die bereits standardmäßig verfügbar sind beziehungsweise auf bereits beherrschten Werkstoff- und Fertigungstechnologien beruhen. Dies sind :

- ◆ Zwei Endplatten, die auf den Zellstapel einen definierten Anpressdruck ausüben
- ◆ Zuganker oder Bänder, die beide Endplatten mechanisch verbinden
- ◆ Zwei elektrische Isolierlagen, um die Endplatten potenzialfrei zu halten
- ◆ Zwei Stromabgriffplatten, die als elektrische Pole dienen (Plus und Minus)
- ◆ Flansche für die Medienversorgung sowie Kleinteile wie Unterlegscheiben und dergleichen

Aspekte einer optimierten konstruktiven Gestaltung von Endplatten sind an anderer Stelle eingehender beschrieben [75]. Die Abdichtung des Stacks nach innen und außen fand bisher nur am Rande Erwähnung, ist jedoch nicht vernachlässigbar. Anoden- und Kathodenraum einer jeden Zelle müssen unter allen Betriebsbedingungen abgedichtet bleiben, sowohl aus Gründen der Sicherheit als auch zum Zwecke konstanter Leistung und Lebensdauer.

Während in Prototypen noch eine hohe Zahl an Flachdichtungen oder individuell angefertigter O-Ringe eingebaut wird, so zeichnet sich ab, dass die Dichtfunktion in kommerziellen Stacks in eines der beiden Hauptmodule (BPE oder MEA) integriert sein wird.

Dies ist schon auf Basis des fundamentalen Prinzips der Teilereduktion erforderlich, um Montagezeiten und Anzahl an Fehlerquellen zu minimieren [76, pp. 9, 93-95]. In der Praxis bestehen beide Möglichkeiten: Die Abdichtung kann sowohl über die Bipolarelemente [77, p. 69] als auch über die MEAs [71] erfolgen; jeweils mit funktionellen und fertigungstechnischen Vor- und Nachteilen. Das Dichtungsmaterial wird sich in einem Spritzgießverfahren aufbringen lassen, gegebenenfalls auch simultan auf beiden Seiten des Bipolarelements.

2.7 Zusammenfassung

Ein Überblick über die Breite heute genutzter Technologien zeigt, welche Fertigungsverfahren prinzipiell für die einzelnen Komponenten von PEFC-Stacks in Frage kommen. Im Stack wechseln sich im Wesentlichen zwei Bauelemente in alternierender Weise ab :

- ◆ Bipolarelemente (BPEs), die Gase über der Reaktionsoberfläche verteilen, Elektronen zwischen den Zellen transportieren und Wärme aus dem Stack an ein Kühlmedium abführen
- ◆ Membran-Elektroden-Einheiten (MEAs), an deren katalytischen Oberflächen die Gase reagieren und durch deren zentrale Polymerfolie sich Protonen von der Anode zur Kathode bewegen

Bipolarelemente bestehen meist aus zwei einzelnen Platten, sofern das Element zur Stackkühlung beitragen soll. Diese Einzelplatten können für Prototypen aus reinem Grafit geätzt werden, was aber aus Kostengründen für eine kommerzielle Fertigung ausscheidet. Hier bieten sowohl geprägte Metallbleche mit Korrosionsschutzschicht als auch spritzgegossene Kunststoffteile mit Grafitgehalten über 60 Vol.-% eine Alternative. Beide Ansätze bauen auf heute üblichen Produktionsverfahren auf, erfordern aber zugleich neue fertigungstechnologische Entwicklungen. Dies trifft in gleicher Weise auf Folien aus expandiertem Grafit zu, die bisher zum Abdichten von Flaschen eingesetzt werden. Auch sie stellen eine zukünftige technische Realisierungsmöglichkeit für Bipolarplatten dar.

Protonenleitende Polymerfolien sind der Elektrolyt jeder PEFC und damit der zentrale Bestandteil der Membran-Elektroden-Einheiten. Neben den zunächst für die Chlor-Alkali-Industrie hergestellten perfluorierten Spezialpolymeren befinden sich inzwischen auch fluorfreie und somit umweltverträglichere Makromoleküle in der Entwicklung. Sie können in sulfonierter Form oder als Phosphorsäure-dotierte Membranen ebenfalls als PEFC-Elektrolyt eingesetzt werden.

Die vorliegende Arbeit hat fünf dieser so genannten Ionomere für eine genaue Kostenanalyse ihrer Produktionsverfahren ausgewählt: Nafion® 1100 von *DuPont de Nemours*, zwei Varianten des BAM3G von *Ballard Advanced Materials*, sulfoniertes Polyetheretherketon (PEEK) von *Victrix plc.* sowie H₃PO₄-dotiertes Polybenzimidazol (PBI) von *Celanese Ventures*. Bei Nafion® und BAM3G handelt es sich um perfluorierte, bei PEEK und PBI um fluorfreie Polymere.

Wasserstoffoxidation und Sauerstoffreduktion auf den beiden Seiten des Elektrolyten geschehen erst durch Kontaktierung der Membran mit einem Katalysator auf Platinbasis, der in Form rußgeträgerter Nanopartikel bereitgestellt wird. Ihr Auftrag erfolgt bei der MEA-Herstellung entweder auf die äußeren Gasdiffusionslagen (GDL) aus carbonisiertem Polyacrylnitril oder direkt auf die Membran selbst.

In der industriellen Praxis geschieht dies über ein Rotationssiebdruckverfahren, an das sich ein Verpressen der drei Rollenmaterialien Membran, Anoden- und Kathoden-GDL anschließt. Zur Herstellung der Platinkatalysatoren sind zwei prinzipielle Verfahren bekannt, die beide auf elementarem Platin beziehungsweise Hexachlorplatinsäure (H₂PtCl₆) als zentralem Zwischenprodukt basieren.

Nach diesen technischen Grundlagen gibt Kapitel 3 im Anschluss einen Überblick über bekannte Literatur zu Kostenaspekten der nun in Aufbau, Material und Fertigung beschriebenen Bauteile für PEFC-Stacks.

3 Kostensituation

Nachdem sich Kapitel 2 auf die technische Basis der Fertigungsmöglichkeiten von Brennstoffzellen-Komponenten beschränkt hat, folgt nun ein Überblick, wie in der zugänglichen Literatur vorhandene Kostenanalysen diese Bauteile bewerten. Die Kombination der beiden Kapitel 2 und 3 ermöglicht dann eine Entscheidung, welches wohl die Hauptkostenträger eines PEFC-Stacks sind und welche Fertigungsarten von vorrangigem Interesse für eine erste Anwendung der Benchmarking-Methodik sind.

3.1 Definition und Abgrenzung des Kostenbegriffs

Von großer Bedeutung für korrekte Vergleiche finanzieller Wertangaben ist eine exakte Definition des Kostenbegriffs, der zum genauen Verständnis stets näherer Spezifikation bedarf. Geht es um den in der Kostenrechnung entscheidenden wertmäßigen Kostenbegriff, so definiert sich dieser nach [78, p. 1083] als "der (in Geld) bewertete Verbrauch von Gütern und Dienstleistungen für die Herstellung und den Absatz von betrieblichen Leistungen und die Aufrechterhaltung der dafür erforderlichen Kapazitäten". Für näheres Basiswissen zur Kostenrechnung sei auf [78, pp. 1083-1169] verwiesen. Im gegebenen Fall handelt es sich nicht um betriebliche Kontroll-, sondern ausschließlich um strategische Plankostenrechnung. Dabei werden diese für das entsprechende Erzeugnis als Kostenträgerrechnung ausgeführt, für die sich differenzierende Zuschlagverfahren empfehlen [78, p. 1121]. Wie deren Bestandteile sich im Einzelnen gliedern, zeigt die folgende Tabelle 3.1 :

Tabelle 3.1 : Kostenbegriffe in der Kostenträgerrechnung (Übersicht)

Materialkosten	Herstellkosten (HK)	Selbstkosten (SK)	Verkaufspreis (VK)
Fertigungskosten	<i>production cost</i>		
Verwaltungskosten		<i>cost of sales</i>	
Vertriebskosten		<i>original / prime costs</i>	<i>price of sales</i>
			<i>selling / asking price</i>
Zinsen, Steuern, Skonto und Gewinne			

Durch Verwaltungs- und Vertriebskosten gehen bereits in die Selbstkosten unternehmensspezifische Größen ein. Für Vergleiche unterschiedlicher Fertigungstechnologien, wie sie ja in dieser Arbeit erfolgen sollen, sind daher nur die Herstellkosten eine geeignete Referenzgröße. Im weiteren Verlauf stellt das Kapitel 3 nun die bisher in der Literatur zugänglichen Analysen zu Herstellkosten von PEFC-Brennstoffzellen und deren Komponenten summarisch dar.

3.2 Studien zu Stackkosten

Nur wenige veröffentlichte Untersuchungen haben sich bisher den gesamten Stackkosten auf Basis der Herstellkosten gewidmet. Da sich die Technologie zudem noch mitten in der Entwick-

lung befindet, müssen in Fallstudien auch jeweils Zielbereiche definiert sowie eine gewisse Anzahl an Annahmen getroffen werden. Die Hauptaspekte hierbei sind :

- ♦ Absatzmarkt (Automobilantrieb, stationäre Stromerzeugung, portable Geräte)
- ♦ Zeithorizont (nahe Zukunft, mittelfristig oder Langzeitperspektive)
- ♦ Technologie (heute verfügbar, in der Entwicklung oder Zielspezifikationen)

Es sei auch darauf hingewiesen, dass einige Kostennalysen im Auftrag von Firmen zwar durchgeführt worden, deren Ergebnisse aber unveröffentlicht geblieben sind.

3.2.1 Studie im Auftrag des U.S.-amerikanischen *Department of Energy* (DoE)

Die bekannteste Studie neueren Datums stammt vom amerikanischen Unternehmen Arthur D. Little (ADL) und wurde vom DoE in Auftrag gegeben [79]. Gegenstand ist die Konstruktion eines Kostenszenarios bei einer Produktion von 500.000 Personenkraftwagen mit Brennstoffzellenantrieb. Dabei sind neben dem Stack auch die Aggregate der Benzinreformierung betrachtet worden. In Zusammenarbeit mit dem Argonne National Laboratory (ANL) hat ADL einen speziellen Auslegungsentwurf erstellt und unter Kostenaspekten bewertet. Einer ersten Analyse im Jahr 2000 folgte 2001 eine Aktualisierung auf Basis von Gesprächen mit Automobilherstellern und -zulieferern. Die Summe der eingeschlossenen Kostenarten entspricht den Herstellkosten (Material und Fertigung) und schließen demnach spezifische *Overheads* für Verwaltung, Vertrieb, Forschung und Entwicklung, Gewährleistung und Steuern aus [79, p. 14]. Der Brennstoffzellen-Stack basiert auf einer perfluorierten Membran vom Nafion®-Typ sowie spritzgeprägten Bipolarplatten aus Grafit-Kunststoff-Compositmaterial. Alle Bipolarelemente (BPE) sind kühlbar, wie aus [80, p. 41] hervorgeht. Zentrale Eigenschaften des Systems zeigt zunächst Tabelle 3.2 :

Tabelle 3.2 : Auslegungsdaten der ADL-Studie zur Brennstoffzellen-Pkw-Serienfertigung [79, pp. 21-25]

Auslegungskapazität in der Analyse	500.000 produzierte Fahrzeuge p.a.
Betriebsdruck und -temperatur im Stack	3 bar und 80 °C
Betriebspunkt (mit Reformatgas aus Benzin)	0,31 A/cm ² bei 0,8 V Zellspannung (2,5 kW/m ²)
geforderte elektrische Nettoleistung	50 kW _{el}
Membrantyp	perfluoriert, Dicke 50 µm
aktive Fläche : Gesamtquerschnitt	75 %
Platinbeladung Anode + Kathode = gesamt	4 + 4 = 8 g/m ²
Rutheniumbeladung Anode	2 g/m ²
Bipolarelemente (jede Zelle kühlbar)	Grafit-Vinylester-Composit, Dicke 4,75 mm

Den Analyseergebnissen von ADL zufolge werden zwei Drittel aller Antriebstrang-Kosten für das Brennstoffzellen-System verwendet - lediglich ein Viertel ist der Benzinreformierung zuzurechnen. Im Brennstoffzellen-System selbst entfallen lediglich etwa 15 % auf periphere Systemkomponenten wie Luftverdichter, Kühler und Anodengas-Nachbrenner. Die verbleibenden rund 85 % der Kosten entstehen am Brennstoffzellen-Modul selbst und betragen 181 US-\$(2001) je kW_{el}. [79, p. 29-30]. Wie diese sich ADL zufolge aufteilen, zeigt Bild 3.1.

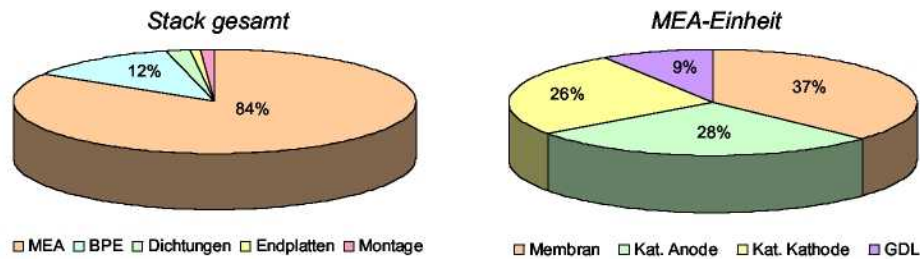


Bild 3.1 : ADL-Studie, Kostenverteilung auf die Stack- und MEA-Komponenten [79, p. 31]

Bei einem Gewicht von 181 kg liefert der Brennstoffzellen-Stack eine elektrische Bruttoleistung von 56 kW_{el}, was zu einer massenspezifischen Leistung von 0,31 kW/kg führt. Die massenspezifischen Herstellkosten betragen ADL zufolge [79, p. 69]

$$\frac{9.035 \text{ US-}\$(2001)}{181 \text{ kg}} = 50 \frac{\text{US-}\$(2001)}{\text{kg Stack}} \quad (\text{Gl. 3.1})$$

Hohe Kosten für das Katalysatormaterial und die Membran sind wesentlich auf den Betriebspunkt bei geringer Stromdichte und hoher Zellspannung zurückzuführen. Hinzu kommt eine mit 8 g/m² beträchtliche Katalysatorbeladung, die allerdings im Hinblick auf ein ausreichendes Leistungsvermögen über die gesamte Lebensdauer des Fahrzeugs so gewählt worden ist (für Pkw-Anwendungen 5.000 Betriebsstunden). Dennoch ist davon auszugehen, dass Katalysatorbeladungen bei der konfigurierten Jahresstückzahl an produzierten Materialeinheiten niedriger liegen werden. Bereits Ende 1998 finden im Zusammenhang mit Stacktests Platinbeladungen von 1,5 g auf der Anoden- sowie 3,5 g auf der Kathodenseite in einem deutschen Projektbericht öffentliche Erwähnung [81, p. 204]. Die Degradationsrate lag bei 15 mV / 1.500 h [81, p. 18].

3.2.2 Studie der SGL Carbon Group (D)

In [82] sind der bereits diskutierten Studie von Arthur D. Little Schätzungen der SGL Carbon Group, Hersteller von Kohlenstoffzeugnissen, gegenüber gestellt worden. Für drei verschiedene Losgrößen zeigt Bild 3.2 die erwähnten relativen Kostenanteile [82].

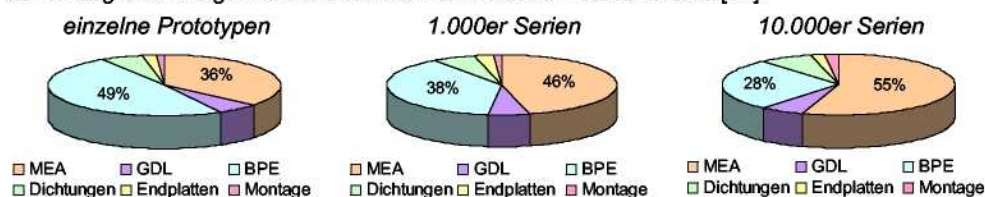


Bild 3.2 : Prognose von SGL Carbon zu PEFC-Prototypen und Losgrößen von 10³ - 10⁴ [82]

Im Vergleich zur ADL-Studie beanspruchen die Bipolarelemente hier einen deutlich größeren Kostenanteil; dies allerdings auch bei geringeren Losgrößen (ADL = 5 · 10⁵). Tendenziell könnten die beiden Angaben sich demnach gegenseitig ergänzen. Außer Kosten in Höhe von 9.618 US-\$/kW für Prototypen enthält die SGL-Veröffentlichung keine weiteren absoluten Werte für Herstellkosten. Nähere Angaben zu den Annahmen, auf denen die Schätzungen beruhen, sind nicht verfügbar.

3.2.3 Studie der Firma Siemens

Eine europäische Studie ist Ende 1999 gemeinsam von der deutschen Firma Siemens, dem niederländischen Energy Research Centre of the Netherlands (ECN) sowie dem Schweizer Paul-Scherrer-Institut (PSI) erstellt worden [83]. Anders als ADL geht Siemens von einem fluorfreien Polymer als Membran sowie metallischen Bipolarplatten (BPP) auf Edelstahlbasis aus. Die BPPs sollen zudem ohne Oberflächenschichten aus Gold auskommen, die zwar Korrosion verhindern, die Plattenkosten jedoch zugleich stark erhöhen würden.

Tabelle 3.3 : Auslegungsdaten EU-Studie zur Stack-Serienfertigung [83, pp. 28-29]

Auslegungskapazität in der Analyse	100.000 produzierte Stacks p.a.
Betriebsdruck und -temperatur im Stack	1,5 bar und 65 °C
Betriebspunkt A (Zell-Prototyp)	0,47 A/cm ² bei 0,75 V Zellsp. (3,5 kW/m ²)
Betriebspunkt B (Szenario)	0,65 A/cm ² bei 0,75 V Zellsp. (4,9 kW/m ²)
Betriebspunkt C (Stack-Prototyp)	2,8 kW/m ²
elektrische Nettoleistung (100 Zellen)	10,9 / 15,2 / 8,7 kW _{el.} (Fälle A / B / C)
Membrantyp	im Experiment Nafion®. Kostenanalyse: n.n.
aktive Fläche	310 cm ²
Platinbeladung Anode + Kathode = gesamt	1,5 + 1,5 = 3 g/m ²
Bipolarelemente (jede Zelle kühlbar)	Experiment Ni-Au / Analyse Edelstahl (goldfrei)

Für den Betriebspunkt A ergaben sich laut Studie Materialkosten in Höhe von 36 Euro(1999) pro kW, die bei einem Übergang auf das Szenario B auf 21 Euro(1999) pro kW fallen. Fertigungskosten bei einer automatisierten Produktion erreichen 6 Euro(1999) pro kW [83, p. 29].

Mit den experimentell bestätigten Leistungsdaten (C) ergeben sich derzeit allerdings Materialkosten im Bereich von rund 2.800 Euro(1999) pro kW, zu denen nochmals Fertigungskosten in mindestens gleicher Höhe hinzukommen. Diese Werte gelten aber für die im Prototypen eingesetzten Materialien Nafion® und goldbeschichtete Platten auf Nickel-Basis.

Eine Aufteilung der Materialkosten für den Stack ergibt sich in etwa wie folgt: Eine Hälfte der Stackkosten entfällt auf die MEA, wobei die Elektroden doppelt so teuer wie die Membran sind. Die andere Hälfte teilen sich paritätisch die Bipolarelemente sowie Endplatten inklusive Kleinteile. Angesetzte Produktionsmengen sind nicht bekannt.

Das Zustandekommen der Werte ist in Ermangelung konkreter Annahmen nur schwer nachvollziehbar. Es fehlen Angaben zum unterstellten Membranmaterial sowie zur Realisierbarkeit eines Konzepts auf der Basis goldfreier Edelstahlplatten, die trotz aggressiver Reaktionsintermediate und hoher Betriebstemperaturen langzeitstabil sein müssen. Im Vergleich zur Studie von ADL stehen in [83] den geringeren Katalysatorkosten relativ gesehen höhere Aufwendungen für die Bipolarelemente gegenüber.

Auch in einer schwedischen Auflistung von Materialkosten eines Stacks aus dem Jahr 1998 dominieren die Bipolarplatten [84], wo sie mit 825 von 1.220 US-\$(1998)/kW einen Anteil von über zwei Drittel beanspruchen. Es folgen die Katalysatoren mit 20 % und das Membranpolymer mit 10 %, wie Tabelle 3.4 zeigt. Die Quelle macht keine weiteren Angaben zur Art der Materialien und zu angenommenen Randbedingungen. Die genannte Summe von 1.220 US-\$/kW ist verglichen mit der Angabe von SGL Carbon aber fast um einen Faktor 8 niedriger.

Tabelle 3.4 : Auflistung von Materialkosten eines Stack-Prototypen 1998 [84, p. 385]

Membran	GDL	Katalysatoren	BPE	Summe	
120	30	245	825	1220	US-\$(1998)/kW
10 %	2 %	20 %	68 %	100 %	[-]
4.800	380	15.200	250	[-]	US-\$(1998)/kg

3.3 Studien zu einzelnen Stack-Komponenten

Der geringen Zahl an Gesamtanalysen und deren stark divergierenden Analyseergebnissen stehen mehrere Aussagen zu einzelnen Fertigungsverfahren gegenüber, die im folgenden in kompakter Weise dargestellt werden sollen.

3.3.1 Reine Grafitplatten mit gefrästen Kanalstrukturen

Literaturquellen nennen für die im Fräsverfahren hergestellten Bipolarplatten Kosten von rund 100 US-\$(2000) pro kW_{el} . [19]. Trotz einer hierbei unterstellten schnellen maschinellen Bearbeitung großer Stückzahlen liegen die Herstellkosten der so produzierten Elemente um etwa einen Faktor 10 über denen von Grafit-Kunststoff-Compositen (siehe 3.3.3). Dies liegt vor allem an der sehr langen Bearbeitungsdauer pro zu fräsender Grafitplatte, die etwa 15 Minuten beträgt [20]. Für eine beidseitig bearbeitete, quadratische Platte mit 38 cm Kantenlänge sind ein Zeitaufwand von über zwei Stunden sowie ein Preis um 250 US-\$(2001) pro Stück publiziert [25].

3.3.2 Metallische Bipolarplatten

Für unbeschichtete PEFC-Edelstahlplatten erscheinen flächenspezifische Gewichte von 3,14 kg/m^2 sowie Materialkosten von 8,0 US-\$(2002)/kg in der Literatur [85] *. Hinzu kommen Fertigungskosten mit 13,5 US-\$(2002)/ m^2 . Dies führt somit auf Bauteil-Herstellkosten von 38,7 US-\$(2002)/ m^2 und 12,3 US-\$(2002)/kg. Als Funktion der Leistungsdichte folgen hieraus folgende Abhängigkeiten für leistungsspezifische Kosten und Gewichte :

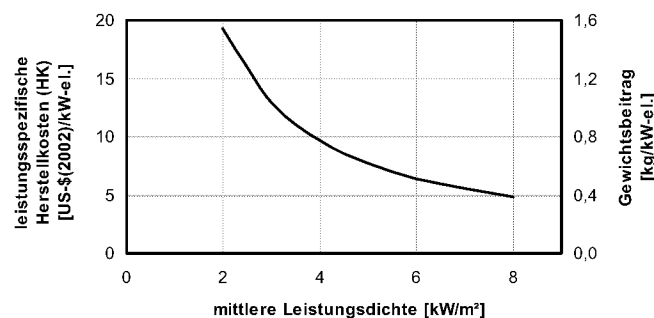


Bild 3.3 : leistungsspezifische Herstellkosten und Gewicht eines metallischen BPE gemäß [85]

Weil sich die eben zitierten flächenspezifischen Angaben für Gewicht und Fertigungskosten auf Vollmaterialflächen beziehen, ist auch in Bild 3.3 eine über aktive und inaktive Flächen gemittelte Leistungsdichte anzusetzen (Quotient aus Zellenleistung und Zellenquerschnitt).

* Annahme: 0,2 mm Dicke und Dichte von 7,85 kg/dm^3

3.3.3 Bipolarplatten aus Grafit-Kunststoff-Compositen

Eine deutsche Quelle erwähnt bei der Herstellung von spritzgeprägten oder -gegossenen Compositplatten Materialkosten zwischen 2 und 8 US-\$(2002)/kg für die Mischungen [20]. Eine US-Quelle gibt die Herstellkosten bei Großmengen mit unter 10 US-\$(2000)/kW an, wobei die Analyse für Material und Fertigung anteilige Werte von 4 beziehungsweise 6 US-\$(2000)/kW ergab [19]. Die Zahlen gelten für jährliche Ausbringungsmengen entsprechend 150 MW äquivalenter elektrischer Peakleistung. Bei Annahme einer durchschnittlichen elektrischen Leistung von 150 W je Zelle entspräche dies einer Million Bipolarelemente beziehungsweise etwa zwei Millionen spritzgeprägter Platten. Abschließend lässt sich aus den Angaben in [19] schließen, dass die Zykluszeit je Teil unter 36 Sekunden liegt, was beim Vergleich mit den Ergebnissen aus Kapitel 5 noch von Relevanz sein wird.

Ein weiterer Hersteller bezieht mögliche Reduktionspotentiale bei der Fertigung von Composit-Platten auf das CNC-Fräsen [82, p. 18]. Demnach führt ein Spritzprägen (*compression moulding*) von 1.000 bis 20.000 Platten auf Kostenreduktionen um 50 - 60 %. Oberhalb dieser Losgrößen liegen die Fertigungskosten der mittels Spritzgießverfahren (*injection moulding*) hergestellten Platten zudem bei rund einem Viertel der Stückkosten beim CNC-Fräsen. Orientiert man sich hierfür an den zitierten 100-200 \$/Stück [19, 25], so wären dies allerdings immer noch 25-50 \$/Stück, wodurch Zielkostenbereiche für viele Anwendungen noch nicht erreicht wären. Auch wenn dünne, imprägnierte Grafitfolien zum Einsatz kommen, so ergeben sich Kosten von rund 30 % der CNC-Fräskosten [82]. Sie sind allerdings im Wesentlichen unabhängig von der Losgröße eines festgelegten Bipolarplatten-Designs.

3.3.4 Membranpolymere

Ausführungen zu Preisen perfluorierter Materialien enthält [42, p. 4]. Die Angaben stammen aus dem Jahr 1997 und erwähnen zu diesem Zeitpunkt Listenpreise für Nafion® (DU PONT DE NEMOURS) zwischen 800 und 900 US-\$(1997) je Quadratmeter. Der Autor erhielt vom Membranhersteller zunächst die qualitative Aussage, dass "der Produktpreis stets den Erwartungen der zugehörigen Absatzmärkte entsprechen werde". Vor diesem Hintergrund schätzt der Verfasser die Materialkosten von Nafion® nach unten durch PTFE ab und erhält über einen Marktpreis von seinerzeit 17 US-\$(1997) je kg PTFE einen Wert von 7 US-\$/m² für eine 200 µm dicke Membran. Hieraus wird auf vernachlässigbar geringe Materialkosten geschlossen [42].

Ein quantifizierbarer Kommentar von Firmenseite in Bezug auf die weitere Preisentwicklung lässt ferner auf einen Degressionsexponenten (DE) von 0,48 schließen^{*}. Letzterer definiert sich als Korrelationskoeffizient zwischen Kosten- und Größenverhältnis zweier Apparate, Stufen oder Anlagen [86, p. 255] :

$$\frac{K}{K_0} = \left(\frac{Q}{Q_0} \right)^{DE} \quad (\text{Gl. 3.2})$$

$$\lg K = DE \cdot \lg Q + \lg \frac{K_0}{Q_0^{DE}} \quad (\text{Gl. 3.3})$$

^{*} " (...), such that a tenfold increase in production will permit a threefold reduction in cost " [42, p. 4]

Q entspricht bei Anlagen der Produktionskapazität, bei einzelnen Apparaten meist einer kennzeichnenden Größe wie Behältervolumen, Kolonnendurchmesser, Pumpendurchsatz, Wärmeübertrager-Oberfläche oder dergleichen. Der Wertebereich von DE liegt in der Praxis zwischen null und eins. Für zugehörige mengenbezogene Kosten K/Q folgt aus Umformung von Gleichung 3.2 der Zusammenhang

$$\frac{K}{Q} = Q^{DE-1} \cdot \frac{K_0}{Q_0^{DE}} \quad (\text{Gl. 3.4})$$

Der US-amerikanische Hersteller hat im November 2002 bei der Präsentation aus der Polymerlösung heraus gegossener perfluorierter Membranen auch selbst eine Schätzung möglicher Preise für diese Materialien publiziert, die Bild 3.4 zeigt. Im vorliegenden Fall besitzen 50 µm dicke Membranen ein Flächengewicht von 100 g/m²; 25 µm dicke entsprechend 50 g/m². Der jährliche Absatz von 2·10⁶ m² verkaufter Polymerfolie entspricht demnach also einem Verkauf von 100 - 200 Tonnen p.a. an ionenleitendem Polymer. Unter der Annahme, das Material findet später in Brennstoffzellen im Gesamtdurchschnitt bei einer Leistungsdichte von 3 kW/m² Anwendung, so ergäbe sich eine in den Stacks verfügbare Spitzenleistung von sechs Gigawatt (2·10⁶ m² · 3 kW/m²). Die in Bild 3.4 angegebenen Preise sind in Tabelle 3.5 nochmals dargestellt und um die gewichtsspezifischen Werte ergänzt worden. Hieraus ist auch erkennbar, dass es sich auch bei vergleichsweise großen produzierten Membranflächen nach wie vor um Spezialpolymere handeln wird, die insbesondere im Vergleich mit anderen Produkten der chemischen Industrie lediglich eine Nischenmenge darstellen. Daher erscheint auch die Qualität der oben zitierten Abschätzung allein über den PTFE-Preis fraglich.

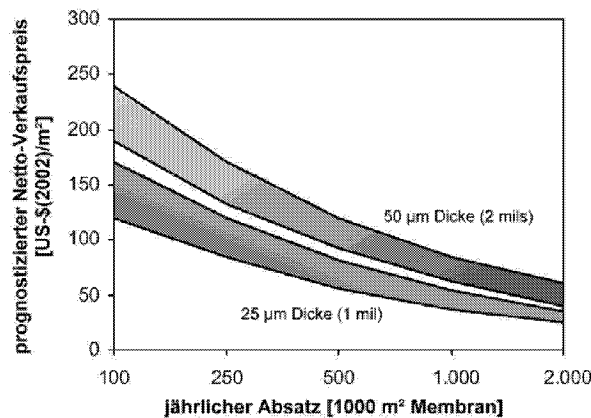


Bild 3.4 : Schätzung des Verkaufspreises perfluorierter, gegossener Membranen [87]

Tabelle 3.5 : Prognose flächen- und massenspezifischer Verkaufspreise von Nafion® [87]

m² p.a.	50 µm (2 mils, 100 g/m²)	25 µm (1 mil, 50 g/m²)	
10 ⁵	190 ... 240	120 ... 170	\$(2002)/m²
	1.900 ... 2.400	2.400 ... 3.400	\$(2002)/kg
2 · 10 ⁶	40 ... 60	25 ... 35	\$(2002)/m²
	400 ... 600	500 ... 700	\$(2002)/kg

Zum Vergleich sind auch allgemeine Aussagen zu Preisen von Kunststoffen verfügbar [88, p. 116]. Ein wichtiger Punkt, der zunächst Erwähnung findet, ist der mit 35 bis 70 % hohe Anteil der Monomerkosten, was anhand von Standard-Polymeren wie PE, PP, PS und PVC belegt wird. Wesentliche Kosten senkende Maßnahmen in der chemischen Industrie sind :

- ◆ Steigerung der Anlagengröße (*economies of scale*)
- ◆ Erhöhung der Raum-Zeit-Ausbeuten
- ◆ Senkung der Aufarbeitungskosten
- ◆ Minimierung unverkäuflicher Kuppelprodukte
- ◆ Energieeinsparungen

Ein Zusammenhang zwischen Preis und Ausbringungsmenge bei der Polymerproduktion ist anhand des Boston-Diagramms (Bild 3.5) ersichtlich, aus dem der für Chemieanlagen typische mittlere Degressionsexponent von 0,6 hervorgeht [88] ($DE-1 = -0,4$). Er beruht im Wesentlichen auf der Steigerung der Apparate-Oberflächen in zweiter Potenz relativ zur Erhöhung der Apparate-Volumina in dritter Potenz zu einer charakteristischen Länge. Der theoretische Wert beträgt demnach $\frac{2}{3}$, streut aber in der Praxis zwischen etwa 0,5 und 0,8 [89, p. 43].

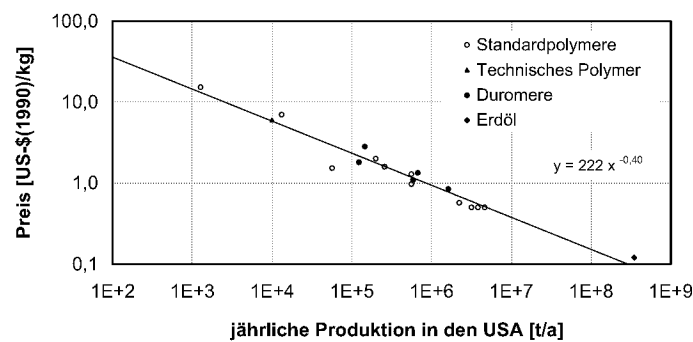


Bild 3.5 : Zusammenhang zwischen Preisen von Polymeren und deren Jahresproduktion [88, p. 118]

Um die auf der Ordinate dargestellten Preise in einen Zusammenhang mit den heute verkauften Polymeren zu stellen, ist eine Korrelation über Erzeuger-Preisindices der USA für die entsprechende Erzeugnisgruppe heranzuziehen (*producer price index, PPI*) :

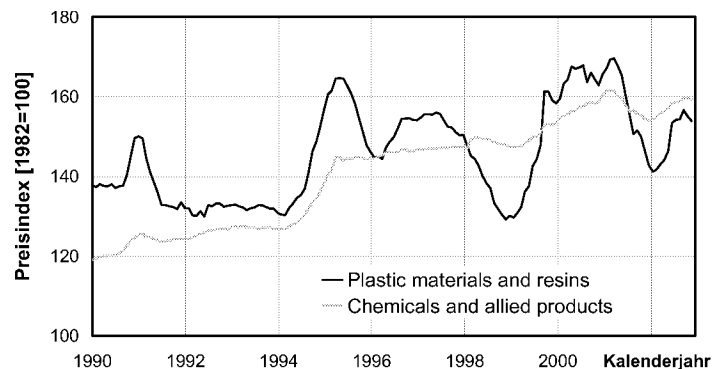


Bild 3.6 : Entwicklung des US-Preisindex für Kunststoffe während der 90er Jahre [90, p. 483]

Erkennbar ist in Bild 3.6 zunächst, wie in den USA die Preise ab Werk für Chemikalien in ihrer Gesamtheit eine nahezu monoton steigende Erhöhung erfahren haben. Zwischen Anfang 1990 und Ende 2002 ergab sich eine Erhöhung des Preisindex um 30 %. Der Preisindex für Kunststoffe und Harze beschreibt konkret eine separat erfasste Untergruppe von Chemikalien. Auch wenn deren Anstieg im selben Zeitraum nur bei 6,7 % liegt, so ist dennoch zu berücksichtigen, dass hier eindeutig höhere Schwankungen auftreten. Sie liegen ausgehend von 1990 in der Größenordnung von - 7 bis + 20 %. Zur Umrechnung der Ordinate in Bild 3.5 empfiehlt es sich daher, für die betrachteten Kunststoffe einen Aufschlag von etwa 10 % anzusetzen.

Für PEFC-Membranen ist bereits dargelegt worden, dass auch große Flächen zunächst nur geringen produzierten Tonnagen um 10^2 t p.a. entsprechen. Hinzu kommt ein mehrstufiger Syntheseweg, dessen industrielle Umsetzung komplexer ist als die der Massenpolymere in Bild 3.5. Eine dortige Extrapolation führt bei 10^2 t/a zu einem Erwartungswert von 40 US-\$(2002)/kg (36 US-\$(1990)/kg + 10 % Indexaufschlag). Ein solcher Preis liegt allerdings um mehr als eine Größenordnung unter den entsprechenden Angaben in Tabelle 3.5. Hinreichend verlässliche Aussagen zu den Preisen einzelner Spezialpolymere lassen sich demnach allein über eine Skalenbetrachtung mit Boston-Diagrammen nicht treffen.

Eine bereits angesprochene Quelle erwähnt schließlich Angaben von Vertretern der kanadischen Firma Ballard Power Systems, wonach die von ihnen entwickelte Membran BAM3G (Seite 19) ihr Kostenziel von 50-150 US-\$(1997)/m² erreichen wird [42, p. 15].

Für alternative arylische Polymere und interessante weitere Polymere zeigt die folgende Tabelle Handelspreise in England mit Stand Juni 2002 [91]. Aus der Tabelle ist gut erkennbar, dass die arylischen Polyetherketone auch in ihrer heute kommerziellen Form Sonderpolymere mit entsprechendem Preisniveau darstellen. Die Weltproduktion von PEEK liegt im Bereich weniger 1.000 Jahrestonnen; mit Anlagen in England und Indien.

Tabelle 3.6 : Marktpreise für ausgewählte Polymere, England, Juni 2002 [91]

Polymertyp	US-cent(2002) / lb	US-\$(2002) / kg
PEEK, unsulfoniert (Seite 17)	4.400	97
PEK, unsulfoniert (Seite 17)	2.950	65
PTFE	450 - 900	9,9 - 19,8
Epoxidharz (für Bipolarplatten)	116 - 126	2,5 - 2,8
Phenolharz (für Bipolarplatten)	55,5 - 87,5	1,2 - 1,9

3.3.5 Kohlenstoff-geträgerte Edelmetall-Katalysatoren

Zum auf Seite 25 dargestellten Verfahren der Katalysatorherstellung via Spray-Verdampfung existieren lediglich qualitative Kostenangaben [55]. Die Produktion kann bei Bedarf hohe Mengen kontinuierlich abgeben und besteht - anders als das konkurrierende Nassverfahren - nahezu aus einem Ein-Schritt-Prozess. Dies lässt geringe Fertigungskosten vermuten, die allerdings nicht quantitativ belegt sind. Ähnliches gilt für das auf Seite 28 beschriebene CVD-Verfahren.

3.3.6 Gasdiffusionslagen

Eine aus Großbritannien stammende Analyse erwähnt Verkaufspreise in Höhe von 100 US-\$(1997) je m² Kohlefaserpapier beziehungsweise -gewebe [42]. Andere Quellen nennen übereinstimmend derzeitige Preise für Gasdiffusionslagen auf Gewebebasis von 200 beziehungsweise 215 US-\$(2002) pro m² [92] [93, p. 7]. Das Kursverhältnis zwischen britischem Pfund und US-amerikanischem Dollar ist zu den fraglichen Zeitpunkten quasi konstant, wie Bild 3.7 zeigt. Dies legt den Schluss nahe, dass für die Differenz der Angaben um einen Faktor 2 eher Unterschiede in der Materialvorbehandlung verantwortlich sind - beispielsweise die Hydrophobisierung mit PTFE oder zusätzlich aufgetragene Rußschichten (Seite 26).

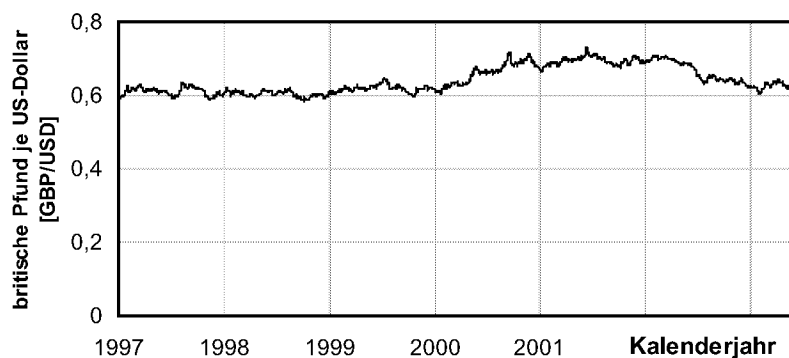


Bild 3.7 : Wechselkursentwicklung zwischen britischem £ und US-\$ [94]

Unterstellt man wie schon bei den Membranpolymeren eine gesamtdurchschnittliche Leistungsdichte von 3 kW/m², so folgen aus Preisen von 200 US-\$/m² immerhin heutige Beiträge von über 60 US-\$/kW_{el.}. Für die Zukunft wird mit Kostensenkungen auf ein Viertel dieses Wertes gerechnet.

Preissenkungen können sich auch in Verbindung mit dem in Zukunft stärkeren Einsatz von leichten CFK-Materialien für Automobilteile ergeben [63]. Die den Kraftstoffverbrauch senkenden Gewichtseinsparungen zeigen dort ein mögliches Einsatzpotenzial von über 100 kg CFK je Fahrzeug, was dann allerdings die heutige Produktionsmenge um zwei Größenordnungen übersteigt. Auf Basis interner Analysen werden für Kohlefaserbündel Herstellkosten von 17,50 US-\$(2002) pro kg genannt [63].

3.3.7 Membran-Elektroden-Einheiten (MEAs)

In der öffentlichen Literatur liegen bisher keine bekannten Kostenanalysen der Fertigungsprozesse bei Membran-Elektroden-Einheiten vor, wie sie in 2.5 beschrieben worden sind.

3.4 Zusammenfassung

In vielen Veröffentlichungen finden sich nur Aussagen zu *Zielkosten* der Brennstoffzelle für verschiedenste mögliche Anwendungen. Die Lücke zu den sehr hohen Kosten heutiger Prototypen wird oft mit einem allgemeinen Verweis auf Kostendegressionen bei gesteigerter Produktionsmenge geschlossen (so genannte Lernkurveneffekte). Quantitativ verwertbare Aussagen zu

den für eine Technologiebeurteilung entscheidenden *Herstellkosten* von Brennstoffzellen-Komponenten sind nur von Seiten weniger an der Entwicklung beteiligter Unternehmen bekannt. Deren Analysen sind in diesem Kapitel so vollständig wie möglich dargestellt.

Kosten heutiger Prototypen von Brennstoffzellen-Stacks liegen bei etwa 5.000 bis 10.000 US-\$(2002) pro kW_{el}. Den darin enthaltenen Materialkosten von 1.200 bis 3.000 Euro(1999)/kW [2, 83, 84] kann nicht durch Automatisierung, sondern nur durch technologische Weiterentwicklung begegnet werden. Vergleiche der Kostenanteile weisen in Gesamtstudien übereinstimmend Bipolarelemente (BPE), Membranmaterial und Katalysatoren als die Haupt-Kostenfaktoren aus, was sie auch zu den Analyseobjekten dieser Arbeit macht (Kapitel 5, Kapitel 6, Anhang 8.11).

Bei Bipolarplatten scheinen sowohl für metallische als auch für Platten aus Grafit-Composit Produktionskosten von 10 bis 20 US-\$(2000)/kW für hohe Losgrößen möglich. Ferner können auch Folien aus expandiertem Grafit eine wirtschaftliche Alternative darstellen.

Preise perfluorierter Ionomermembranen als Standardelektrolyte liegen derzeit zwischen 2.000 und 3.000 US-\$(2002) pro kg, auch wenn allgemeine Extrapolationen über Massenkunststoffe bei kleinen Tonnagen um Größenordnungen geringere Zahlen erwarten lassen (Bild 3.5). Die Diskrepanz zeigt die Sonderstellung des verwendeten Materials auf und legt genauere techno-ökonomische Untersuchungen zu Syntheseprozess und Marktumfeld solcher ionenleitender Polymere nahe. Produzenten solcher Membranmaterialien stellen mittelfristig Preise um 1.000 bis 2.000 US-\$/kg in Aussicht. PEEK, das sich als fluorfreie Alternative in der Entwicklung befindet, besitzt in seiner noch unsulfonierten Form Handelspreise um 100 US-\$(2002)/kg.

Kostenszenarien in Bezug auf die Edelmetallkatalysatoren sind kaum zu finden. Die möglichen prozesstechnischen Alternativen sowie deren Skalierbarkeit legen aber den Schluss nahe, dass der Preis für das enthaltene Platin die Katalysatorkosten heute wie zukünftig schon bei geringen Produktmengen maßgeblich bestimmt.

Gasdiffusionslagen haben sich nur bedingt als kostenkritische Komponenten erwiesen. Sie könnten zudem von Kostensenkungen infolge einer verstärkten Anwendung von Carbonfasern im Automobilbereich profitieren. Ökonomische Analysen von Fertigungsprozessen der Membran-Elektroden-Einheiten (MEA) sind in der Literatur, soweit bekannt, noch nicht erschienen.

Den meisten zitierten Kosteninformationen fehlt eine systematische Darstellung von Prinzip, Annahmen und Zwischenschritten. Dies macht eine objektive inhaltliche Bewertung der Daten oft schwierig. Zudem erfolgen nur selten Hinweise auf technologische Alternativen oder Ansätze zu weiterer Kostenminimierung. Vergleiche mit anderen Lösungen finden kaum statt. Eine Übertragbarkeit auf neue technologische Entwicklungen ist nicht oder kaum möglich.

Aus diesen Gründen baut das folgende Kapitel ein allgemeines techno-ökonomisches Modell für PEFC-Module auf und macht über den Ansatz des *Benchmarks* die entscheidenden Kenngrößen sowie Optimierungsziele quantifizierbar. Enthaltene Kostenarten werden separat diskutiert, um auch Teilergebnisse vergleichen zu können. Bei Kosteninformationen zu Materialien kommen neue Datenquellen und Analysemethoden zum Einsatz. Fertigungskosten können an individuelle technische Gegebenheiten der Produktion angepasst betrachtet und dennoch in realistischer Weise verglichen werden.

4 Methodik zur Bauteil- und Prozessanalyse

Kapitel 2 hat zunächst einen Überblick über die derzeit aussichtsreichen Herstellverfahren für die einzelnen Stack-Komponenten gegeben. Ergänzend ging aus Kapitel 3 die gegenwärtige Kostensituation hervor, wie sie bisher im Entwicklungsstadium und für eine eintretende Kommerzialisierung in der zugänglichen Literatur dargestellt und bewertet wird.

Dieses Kapitel hat das Ziel, unabhängig von bisherigen Abschätzungen ein generisches, fertigungsökonomisches Modell für PEFC-Stacks zu entwickeln. Um für deren Bestandteile Kostenbetrachtungen anstellen zu können, sind geeignete bestehende Methoden auszuwählen, auf die Gegebenheiten bei Brennstoffzellen-Stacks anzupassen und bei Bedarf zu erweitern. Durch konsequente Trennung von Methodik und mit ihr analysierter Technologie soll es dabei auch in höheren technologischen Entwicklungsstadien möglich sein, ergänzende techno-ökonomische Analysen der zugehörigen Produktionsprozesse in effizienter Weise durchzuführen.

4.1 Strategische Kostenrechnung

Ein Grundprinzip des betrieblichen Rechnungswesens besteht im Streben nach verursachungsgerechter Kostenzurechnung. Für erkennbare Einzelkosten eines Kostenträgers ist diese direkt erfüllbar. In der laufenden operativen Praxis besteht das Hauptproblem in der Behandlung von Gemeinkosten. Die übliche Verrechnung angefallener Kosten über geeignete Schlüssel trägt dem Verursachungsprinzip oft nur begrenzt Rechnung, gilt aber für kurzfristige Überlegungen als ausreichend.

Geht es hingegen um mittel- bis langfristige strategische Bewertungen zukünftiger Produktkonzepte, so liegt eine andere Situation vor: Mehrheitlich fehlen den am Entwicklungsprozess Beteiligten belastbare Wertangaben für den Fall einer kommerziellen Produktion. Zudem unterliegt das Erzeugnis selbst noch merklichen Veränderungen in Bezug auf Materialien, Herstellung und Leistungsfähigkeit. In den 90er Jahren haben sich daher neue Kostenrechnungskonzepte entwickelt, die sich speziell auf die strategischen Aspekte eines noch 'virtuellen' Produkts fokussieren (Tabelle 4.1).

Tabelle 4.1 : Verfahren der strategischen Kostenrechnung [78, p. 1158]

Konzept der strategischen Kostenrechnung	vorrangiges Ziel
Prozesskostenrechnung	verursachungsgerechte Gemeinkostenrechnung
Produktlebenszyklus-Kostenrechnung	langfristige Produkterfolgsrechnung
Zielkostenrechnung (Target Costing)	marktorientierte Produktkostensteuerung
Konstruktionsbegleitende Kalkulation	kostenorientierte Konstruktion

Nähere Erläuterungen zu strategischen Kostenrechnungen enthält entsprechende Fachliteratur [78, pp. 1158-1169]. Für den hier zu untersuchenden Fall der Brennstoffzellen sind neben der Zielkostenrechnung vor allem konstruktionsbegleitende Kalkulationen von Interesse:

Abschnitt 3.4 erwähnte die Existenz diverser Aussagen zu Zielkosten für potenzielle Brennstoffzellen-Anwendungen. Demgegenüber fehlen aber nachvollziehbare entwicklungsbegleitende Produktionskostenanalysen. Sie wären speziell zur vergleichenden finanziellen Beurteilung konstruktionstechnischer und werkstofftechnologischer Alternativen besonders wertvoll. Von diesem wirtschaftswissenschaftlichen Ansatz geht daher das im weiteren beschriebene Kostenmodell aus. Bild 4.1 stellt das Umfeld dieses so genannten Prozesskosten-Benchmarkings im Kontext anderer Analysewerkzeuge dar.

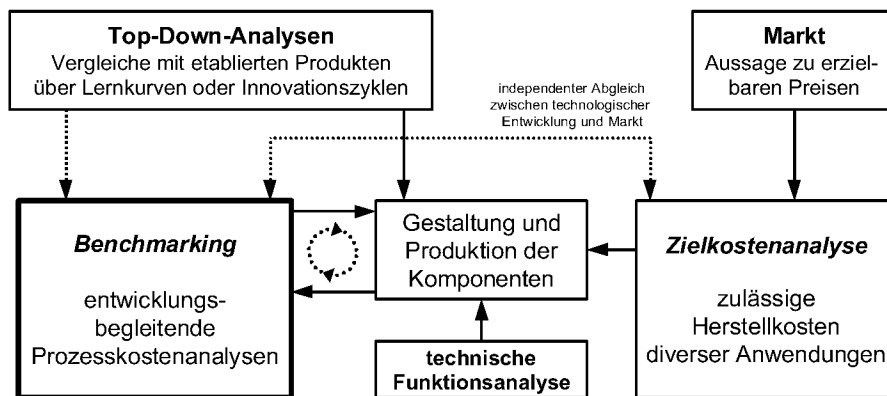


Bild 4.1 : Das Prozesskosten-Benchmarking im Umfeld der Entwicklung von PEFC-Stacks

Im Zentrum stehen technische Gestaltung und Produktion der Komponenten. Die wichtigen Zielkostenanalysen sind für viele mögliche Brennstoffzellen-Applikationen durchgeführt worden. Sie machen aber keinerlei Aussagen zur tatsächlichen technischen Erreichbarkeit ihrer Vorgaben. Derartige Informationen lassen sich nur über Prozesskostenanalysen während der Entwicklung bereitstellen, die zudem speziell an die Gegebenheiten bei PEFC-Stacks adaptiert worden sind. Hierbei können auch Aspekte allgemeiner, produktunabhängiger Analysen mit eingehen, wie sie beispielsweise Untersuchungen von Lernkurven oder Innovationszyklen anderer Produkte darstellen. Alleine sind diese aber nicht fähig, Hemmungen oder Blockaden zu detektieren, die auf technischen Detailproblemen beruhen. Die Funktion solcher *Top-Down*-Analysen ist daher im vorliegenden Kontext eher die eines Hilfsmittels.

Die Parallelität von konstruktionsbegleitender Kalkulation (traditionelle Entscheidungskette) und Zielkostenanalyse (marktorientierte Entscheidungskette) ermöglicht einen Abgleich zwischen dem technologischen Entwicklungsstand und den anwendungsspezifischen Markterfordernissen. Auf diese Weise ist der Abstand von einer ökonomisch erfolgreichen Realisierung der Innovation am Markt quantifizierbar.

Angaben der Komponentenhersteller zu voraussichtlichen Kostenentwicklungen ihrer Produkte (wie in Kapitel 3 dargestellt) unterliegen nicht selten firmenpolitischen Interessen; zudem existiert bisher keine vergleichbare Serienfertigung der in Frage kommenden Bauteile, wie sie Kapitel 2 beschreibt. Folglich kann nur ein unabhängiges Benchmarking möglicher Fertigungsverfahren die Lücke schließen zwischen wissenschaftlich-technischer Produktentwicklung einerseits und den monetären Zielvorgaben von Systementwicklern und Anwendern andererseits.

4.2 Zusammensetzung der Herstellkosten

Die Prozesskosten-Kalkulationen sollten im Endstadium Vollkostenrechnungen der Herstellung darstellen. Sie beinhalten, wie Abschnitt 3.1 (Seite 34) gezeigt hat, in erster Linie Material- und Fertigungskosten, wobei sich letztere vor allem aus dem bewerteten Verbrauch verschiedenster Ressourcen zusammensetzen. In Zwischenstufen lassen sich auch solche äquivalenten Teilergebnisse der Varianten vergleichen. Jedoch muss die spätere Diskussion der Resultate einer solchen Beschränkung auf einen Teil dieser additiven Kostenarten Rechnung tragen.

Die Möglichkeiten der Informationsbeschaffung über publizierte Quellen ist in diesem Bereich beschränkt, speziell was detaillierte technikbezogene Darstellungen angeht. In einigen wenigen Fällen ist man in Ermangelung besseren Wissens auf Abschätzungen der Herstellkosten angewiesen, basierend auf zugänglichen Angaben zu Verkaufspreisen. Abschnitt 4.5.2 zeigt eine neue Lösungsmöglichkeit für Materialkosten auf - Abschnitt 4.6.3 beschreibt die Vorgehensweise für die Fertigung wichtiger Stack-Komponenten.

In vielen Fällen sind Verkaufspreise von Erzeugnissen rund doppelt so hoch wie die Summe ihrer Material- und Fertigungskosten. Der praxisnahe Hintergrund ist, dass Gemeinkosten, Verwaltungs- und Vertriebsaufwand, Handelsmargen und angepeilter Gewinn in der Kostenträgerrechnung wertbezogen auf die Erzeugnisse umgelegt werden, sich also proportional zu den Herstellkosten des Produkts entwickeln (vergleiche Tabelle 3.1). Im Einzelfall bleibt hierbei allerdings zu prüfen, ob der zugehörige Markt ausbalanciert ist. Liegen nämlich ausgeprägte Käufer- oder Verkäufermärkte vor [78, p. 463], so werden in der marktwirtschaftlichen Praxis eindeutig andere Faktoren die Verkaufspreisbildung dominieren.

Die erwähnten Aufschläge (*overheads*) gehen bei entwicklungsbegleitenden Vorkalkulationen, die Vergleiche technischer Alternativen bezwecken, zunächst nicht mit ein. Auch in den Kapiteln 5 und 6 dieser Arbeit erfolgen zunächst isolierte Analysen von Material- und Fertigungskosten. Um jedoch auch in systematischer Vollständigkeit die wirtschaftliche Realität der Komponentenproduktion abzubilden, ergänzt eine abschließende Kostenträgerrechnung mögliche Selbstkosten sowie denkbare Netto-Verkaufspreise. Dies erfolgt über exemplarische differenzierende Zuschlagkalkulationen zu Vollkosten (Seiten 90 und 141).

4.3 Benchmarking für PEFC-Stacks

Bei der Diskussion von Bild 4.1 hat bereits das Prozesskosten-Benchmarking als dem hier gewählten Basisansatz für entwicklungsbegleitende Kostenanalysen Erwähnung gefunden. Diese Entscheidung soll näher begründet werden, ehe sich dann im nachfolgenden Abschnitt 4.4 hieraus das wirtschaftliche Modell eines PEFC-Stacks entwickelt.

4.3.1 Entstehung, Definition und Einsatzmöglichkeiten

Im wirtschaftswissenschaftlichen Kontext hat sich die Idee des *Benchmarking* als eine der modernen Management-Methoden während der 80er-Jahre entwickelt. Grundlegend und umfassend definiert ist das Prinzip in [95, p. 13]: "Benchmarking ist der kontinuierliche Prozess, Produkte, Dienstleistungen und Praktiken zu messen gegen den stärksten Mitbewerber oder die Firmen, die als Industrieführer angesehen werden". Diese firmenorientierte Art der Darstellung enthält vier wesentliche Aspekte des Benchmarking, wie [96] genauer erläutert.

- 1. Generalismus im Objekt :** Die Methode des Benchmarking ermöglicht eine Anwendung auf physische Erzeugnisse ebenso wie auf Dienstleistungen oder bestimmte Abläufe.
- 2. Kontinuität :** Der technologische Stand eines Erzeugnisses unterliegt permanenten Veränderungen, auf die ein Analyseverfahren dynamisch reagieren können muss.
- 3. Metrik :** Leistungsunterschiede werden über definierte Kennzahlen quantifizierbar. Darüber hinaus entsteht ein reflexives Erkennen der Abläufe, das die Gründe für Differenzen offenbart.
- 4. Technologieführerschaft :** Objekt-Vergleiche finden nicht nur innerhalb einer Branche statt, sondern auch mit externen Spezialisten - was Quantensprünge fördert.

Hiermit wird offensichtlich, dass die Konzeption des Benchmarking über das hinaus geht, was viele Verwender des Begriffs vereinfacht als eine Assoziation mit "dem Besten" interpretieren. Benchmarking ist eine konsequente und vor allem umfassende Herangehensweise beim Bearbeiten verschiedenster Fragestellungen der Optimierung. Allgemeine Diskussionen der prinzipiellen Methode enthalten [97, 98, 99].

4.3.2 Stackbewertung über ein Bauteil-Prozess-Benchmarking

Ziel beim Aufbau eines techno-ökonomischen Modells zur Stack-Analyse ist es, alle vier genannten Grundaspekte zu berücksichtigen. Die oben zitierte Definition begreift Benchmarking infolge seiner Entwicklung als Management-Methode verständlicherweise zunächst stark aus einer Firmenperspektive heraus. Dies gilt es im Folgenden auf die Bauteile der PEFC-Stacks als Objekte zu übertragen. Der Wunsch, die primär von Material und Fertigung dominierten Herstellkosten zu vergleichen, führt zu einer gekoppelten Betrachtung von Bauteil und entsprechendem Fertigungsverfahren. Hierfür steht nachfolgend der Begriff des Bauteil-Prozess-Benchmarkings.

Das zu entwickelnde Modell soll in zweierlei Weise generalistischen Ansprüchen gerecht werden: Zum einen besteht das Ziel darin, eine Methode bereitzustellen, aus der sich sowohl Aussagen zu Bipolarelementen als auch zu Membranen und Katalysatorschichten ableiten lassen. Dies schließt bauteilbezogen differierende Varianten in Bezug auf Design und Werkstoffe mit ein - wie zum Beispiel metallische oder grafitische Bipolarplatten (Aspekt 1: Generalismus im Objekt). Zweitens soll eine klare Trennung von Prinzip und Anwendung auf eine definierte Komponente (sowie deren Herstelltechnologie) einen langfristigen Nutzen sicherstellen. Zukünftige Wege der Weiterentwicklung in Industrie und Wissenschaft müssen ohne großen Aufwand analysierbar bleiben, auch wenn sie aus dem in Kapitel 2 beschriebenen Stand der Technik heraus heute noch nicht absehbar sind (Aspekt 2: Kontinuität).

4.3.3 Kennzahlen für das Kostenmodell

Der entscheidende Schritt bei der Durchführung eines Benchmarkings liegt in der Entwicklung geeigneter Kennzahlen (Aspekt 3: Metrik). Diese sollen mit Hinblick auf die Optimierungsaufgabe abbilden, von welchen entscheidenden Parametern die Güte der bewerteten Objekte abhängt. Ihre Erarbeitung soll nach einer systematischen Vorgehensweise ablaufen, die es erlaubt, auch komplexere Produkte oder Prozesse zu analysieren und zu optimieren.

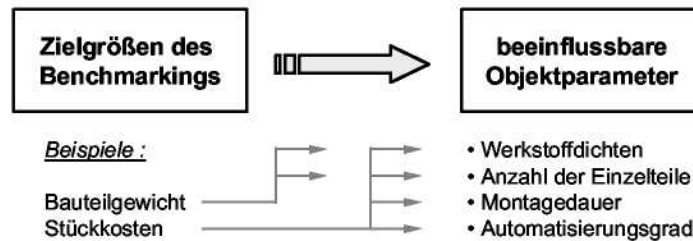


Bild 4.2 : Übertragung der Zielgrößen in Kennzahlen und deren Parameter

Bild 4.2 verdeutlicht das Vorgehen zunächst prinzipiell: Zielgrößen werden in Kennzahlen gefasst und auf die beeinflussbaren Parameter des Objekts zurückgeführt. Bei Kostenmodellen transkribiert man in der Regel monetäre Größen in charakteristische Einflussgrößen des gewählten Designs, der verwendeten Materialien oder des Fertigungsprozesses. Für den Fall von PEFC-Stacks und deren Komponenten geschieht dies im nun folgenden Abschnitt 4.4.

4.4 Ökonomisches Modell eines Brennstoffzellen-Moduls

Den ersten Schritt der Modellbildung stellt die Beschreibung des Gegenstandes dar. Abstraktionen aus der Beobachtung der Prototypenbaus in Forschung und Industrie haben zu einer Darstellung geführt, wie sie das folgende Bild 4.3 zeigt :

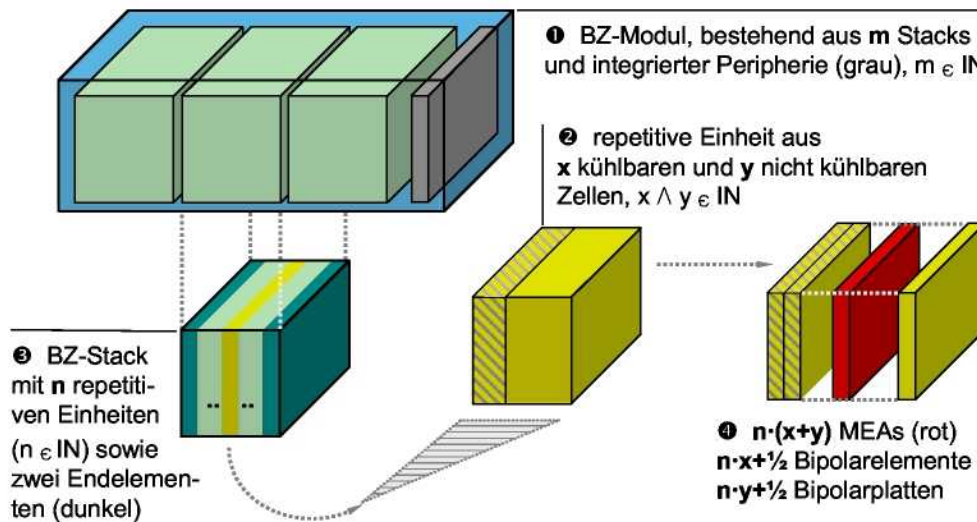


Bild 4.3 : Modell eines BZ-Moduls aus mehreren Stacks mit MEAs, BPEs und Endelementen

Die Industrie ist während der vergangenen Jahre dazu übergegangen, bei der Montage von Systemen kompakte, eigenständig funktionsfähige Module zu verwenden, um eine Endmontage aus vielen Einzelkomponenten und Kleinteilen zu umgehen. Dieses Bestreben lässt sich zum Beispiel in der Automobilfertigung an vielen Baugruppen erkennen, die von den Zulieferern montagefertig bereitgestellt werden.

Auch weiterentwickelte Brennstoffzellen-Aggregate spiegeln diese Entwicklung bereits wider, weswegen Bild 4.3 zunächst von so genannten Brennstoffzellen-Modulen (1) ausgeht, die nicht

nur mehrere einzelne Stacks enthalten, sondern auch kleine Nebenaggregate, eine integrierte Medienversorgung sowie Regelungstechnik. Diese sind symbolisch in Bild 4.3 grau dargestellt, sollen aber im Folgenden nicht detailliert untersucht werden. Das Modell fasst ferner den Stack (②) als einen seriellen Stapel repetitiver Einheiten zwischen zwei Endelementen auf. Ein Ergebnis aus Kapitel 3 war, dass es sich bei kommerziellen Endplatten nicht um kostenkritische Bauteile im PEFC-Stack handelt. Daher stehen sie in dieser Arbeit zunächst nicht im Zentrum des Interesses.

Eine einzelne repetitive Einheit (③) beinhaltet ferner x kühlbare und y nicht kühlbare Zellen, die aus genau einer MEA-Einheit in Verbindung mit einem Bipolarelement (BPE) beziehungsweise einer Bipolarplatte (BPP) bestehen. Mit dem ökonomischen Modell lassen alle denkbaren Kombinationen darstellen, unter anderem :

a) Stack ohne Kühlzellen (nur bei sehr geringer Leistungsdichte)

$$(x, y) = (0, 1) \quad (\text{Gl. 4.1})$$

b) Jede dritte Zelle ist kühlbar (bei mäßiger Leistungsdichte)

$$(x, y) = (1, 2) \quad (\text{Gl. 4.2})$$

c) Alle Zellen werden gekühlt (erforderlich bei Stacks mit hoher Leistungsdichte)

$$(x, y) = (1, 0) \quad (\text{Gl. 4.3})$$

Wie die Detaildarstellung (④) in Bild 4.3 schließlich zeigt, enthält ein Stack folglich $n \cdot (x+y)$ MEA-Bauteile. Da eine MEA im Regelfall auf beiden Seiten Gasverteilungsstrukturen erfordert, ist die Zahl der Bipolarbauteile verglichen mit den MEAs um 1 erhöht und beträgt demnach $n \cdot (x+y)+1$. Konstruktionsbedingt kann es sich hierbei um eine zusätzliche kühlbare oder nicht kühlbare Zelle handeln, weswegen Bild 4.3 in abstrakter Weise die Zahl der BPEs und BPPs nur mit $n \cdot x + \frac{1}{2}$ beziehungsweise $n \cdot y + \frac{1}{2}$ angibt. Für Kostenrechnungen größerer Stacks mit entsprechend hohem n ist dieser Effekt in der Regel vernachlässigbar.

Eine Abdichtung der einzelnen Zellen wird in kommerziellen Stacks nicht über zusätzliche Bauteile erfolgen, wie dies bei Prototypen häufig der Fall ist. Die Dichtfunktion erfüllt vielmehr ein hinreichend temperaturbeständiges Elastomer, das integraler Bestandteil entweder der Bipolarbauteile oder der MEA sein wird (Kapitel 2.6, Seite 31).

Die in Kapitel 3 zitierten zugänglichen Studien deuten bereits an, dass mit etwa 95 % ein Großteil der Stackkosten in den Wiederholungseinheiten enthalten ist. Deshalb sind für deren Bestandteile angepasste Strukturmodelle bereitgestellt worden, die Designalternativen und Zusammensetzung genauer sichtbar machen. Einige häufig wiederkehrende Fälle sind in Bild 4.4 grafisch dargestellt und werden im weiteren Verlauf der Analysen eingesetzt.

Die Dicke der Komponenten, die Querschnittsfläche sowie die Raumanteile der Einsatzstoffe im Bauteilvolumen bestimmen dabei gemeinsam den für die jeweiligen Teile erforderlichen Netto-Materialbedarf. Hierauf beruht in der techno-ökonomischen Analyse die Massenbilanzierung.

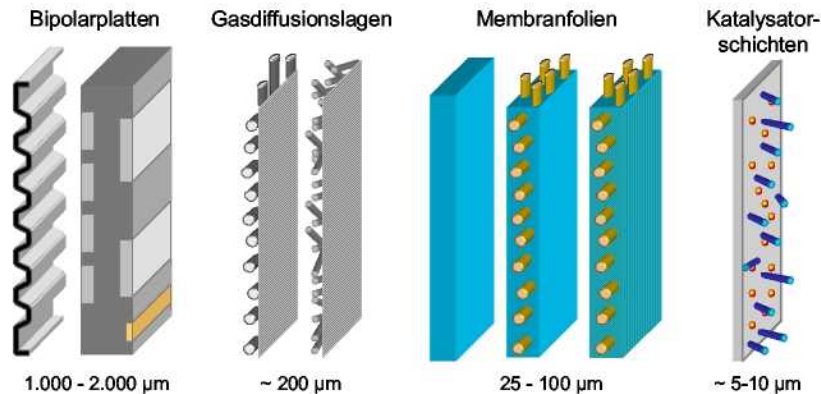


Bild 4.4 : Mögliche Elemente der Wiederholungseinheiten sowie deren ungefähre Dicke

Metallische Platten sind dünne Bleche, deren effektive Dicke sich durch das Einprägen von Kanalprofilierungen erhöht. Die aufzubringende Oberflächenschutzschicht nimmt mit wenigen Mikrometern Dicke praktisch keinen zusätzlichen Raum in Anspruch. Bipolare Platten aus extrudiertem Grafit-Kunststoff-Composit beinhalten einen großen Volumenanteil an Vollmaterial (Kohlenstoff und Polymer), in dem sich Nuten für die Strömungsfelder und Dichtungen befinden. Gasdiffusionslagen (GDL) bestehen aus gewebten Netzen langer Carbonfasern oder zu Papieren verpressten, kurzen, ungerichteten Stücken von Kohlefasern. Auf diesen Substraten wird einseitig eine funktionelle Rußschicht aufgebracht.

Membranen können aus reinem Ionomer bestehen, das zu dünnen Folien gegossen oder gezogen worden ist. Zur mechanischen Stabilisierung speziell bei geringen Dicken lässt sich das ionenleitende Polymer in ein poröses Trägergewebe eingießen. Schließlich kommen auch immer häufiger kleine Feststoffpartikel als funktionelle Zusätze hinzu, deren Berücksichtigung im Modell ebenfalls möglich sein wird.

Die auf Membran oder GDL applizierten aktiven Anoden und Kathoden bestehen aus Katalysmetallpartikeln auf Leitfähigkeitsruß, durchzogen von einem Netzwerk aus Ionomer-Leitungsbahnen (in Bild 4.4 blau angedeutet). Nach Entfernen der Lösungsmittel durch Trocknung verbleibt auf den aktiven Bereichen der Querschnittsfläche eine poröse dreidimensionale Struktur.

Insgesamt gesehen ist von entscheidender Bedeutung, dass es sich bei den soeben beschriebenen Haupt-Kostenträgern ausnahmslos um flächige Bauteile handelt, die lediglich Randgeometrien besitzen zum Zweck des Stackaufbaus, der Abdichtung und der Medienversorgung über Sammelkanäle. Dieser Umstand hat wichtige Auswirkungen auf die Art der Kennzahlgenerierung bei PEFC-Stacks.

Im Gegensatz zum volumenproportionalen Leistungszuwachs bei Verbrennungskraftmaschinen besteht bei Brennstoffzellen-Modulen eine entsprechende Proportionalität zur Oberfläche. Die aktive Fläche wird somit zum maßgeblichen Auslegungsparameter. Sie bildet das Bindeglied zwischen dem im Betrieb ausgegebenen Nutzen und dem bei der Produktion der Bauteile erforderlichen Aufwand an Rohstoffen. Der Aufbau des Kennzahlensystems wird diesem Zusammenhang Rechnung tragen.

Mit Blick auf die Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten im Bereich der Brennstoffzellen-Stacks lassen sich drei strategische Brennpunkte der Entwicklung beobachten: Kosten, Leistung und Lebensdauer. Verbal ausgedrückt besitzt ein "optimaler Stack" somit maximale mögliche Nennleistung und Lebensdauer bei minimalen Kosten. Die leistungsbezogenen Kosten sollen möglichst niedrig sein, und die Rentabilität für den Nutzer ist umso höher, je länger das Produkt hält*. Im mathematischen Sinne lässt sich ein virtueller Benchmark B entsprechend definieren als

$$B = \text{Min} \left\{ \frac{\text{Herstellkosten HK}}{\text{Leistung P} \cdot \text{Lebensdauer L}} \right\} \left[\frac{\text{Euro}}{\text{kW} \cdot \text{h}} \right] \quad (\text{Gl. 4.4})$$

Dieses Entwicklungsziel gilt völlig unabhängig von einer speziellen Technologie und hat somit Basischarakter. Eine solche Kenngröße ermöglicht es auch, in unabhängiger Weise mehrere parallel diskutierte Realisierungen neutral und quantitativ miteinander zu vergleichen.

Gemäß der Idee des Benchmarkings lautet das Ziel, durch Umformungen die in den diversen Stacks messbaren und bei der Konstruktion beeinflussbaren Kenngrößen sichtbar zu machen. Der bereits angesprochene Aufwand an Rohstoffen legt nahe, den obigen Quotienten um die Masse M zu erweitern :

$$B = \text{Min} \left\{ \frac{\text{Herstellkosten HK} \cdot \text{Masse M}}{\text{Masse M} \cdot \text{Leistung P} \cdot \text{Lebensdauer L}} \right\} \quad (\text{Gl. 4.5})$$

Kommt ferner das Volumen hinzu, so werden auch Geometrieparameter sichtbar :

$$B = \text{Min} \left\{ \frac{\text{Herstellkosten HK} \cdot \text{Masse M} \cdot \text{Volumen V}}{\text{Masse M} \cdot \text{Volumen V} \cdot \text{Leistung P} \cdot \text{Lebensdauer L}} \right\} \quad (\text{Gl. 4.6})$$

Für das Volumen V gilt dabei

$$\text{Volumen V} = \text{Querschnittsfläche F} \cdot \text{Bauteildicke D} \quad (\text{Gl. 4.7})$$

In der Praxis wird die gewünschte Reaktion zur Stromerzeugung, wie soeben erwähnt, nur auf einem Teil der Querschnittsfläche F ablaufen. Ein gewisser Bereich ist für die Sammelkanäle der Fluide und die Erfüllung der Dichtfunktion reserviert. Definiert man den aktiven Teilbereich des Gesamtquerschnitts als

$$\text{Aktivfläche A} = \alpha \cdot \text{Querschnittsfläche F}, \quad (\text{Gl. 4.8})$$

dann lässt sich Gleichung 4.6 schließlich erweitern zu

$$B = \text{Min} \left\{ \frac{\text{Herstellkosten HK} \cdot \text{Masse M} \cdot \text{Aktivfläche A} \cdot \text{Dicke D}}{\text{Masse M} \cdot \text{Volumen V} \cdot \alpha \cdot \text{Leistung P} \cdot \text{Lebensdauer L}} \right\} \quad (\text{Gl. 4.9})$$

Durch Umgruppierung werden die entscheidenden Kennzahlen sichtbar :

$$B = \text{Min} \left\{ \underbrace{\frac{\text{Herstellkosten HK}}{\text{Masse M}} \cdot \frac{\text{Masse M}}{\text{Volumen V}} \cdot \frac{\text{Dicke D}}{\alpha}}_{\text{Material, Design und Herstellung}} \cdot \underbrace{\frac{\text{Aktivfläche A}}{\text{Leistung P}} \cdot \frac{1}{\text{Lebensdauer L}}}_{\text{Leistungsvermögen im Betrieb}} \right\} \quad (\text{Gl. 4.10})$$

* zum Begriff der Rentabilität siehe auch [78, p. 47]

Zunächst ist ersichtlich, dass die letzten zwei der fünf Faktoren prinzipiell Größen sind, die vor allem vom Stadium der technologischen Entwicklung abhängen. Sie stellen Zielkennzahlen der einzelnen Bauteile in Bezug auf ihr Leistungsvermögen im Betrieb dar und hängen zudem von weiteren Betriebsparametern der Stacks ab, wie zum Beispiel Temperatur, Druck, Aktivität oder Wassergehalt der eingesetzten Gase.

Das Minimierungsziel des Quotienten aus der erforderlichen Aktivfläche A pro gewünschter Nennleistung P ist unmittelbar nachvollziehbar; ebenso das des Reziprokwertes der Lebensdauer L . Die Lage des Optimums für das mathematische Produkt dieser beiden Faktoren ist nur über Ergebnisse von Materialtests und Anforderungen im Pflichtenheft einer angestrebten Anwendung her bestimmbar.

Der aktuelle Stand der Erkenntnisse deutet ferner darauf hin, dass zwischen den beiden Parametern eine direkte Abhängigkeit der Form $P/A \cdot L = \text{const.}$ besteht. Als technische Ursache wird die bei höherer Leistung zunehmend schwierigere Wärmeabfuhr vermutet, die dann zu lokalen Temperaturspitzen und somit zu Schädigungen im Material führt. Der Betrieb bei hohen Strom- und damit Leistungsdichten geht demnach zu Lasten der Stack-Lebensdauer. Im Umkehrschluss kommt ein Arbeitsbereich bei hohen Zellspannungen und geringen Stromdichten einer statistisch längeren Lebensdauer zugute. Für gesicherte Aussagen fehlt bisher noch eine ausreichend breite Basis an Experimenten, da Lebensdauertests zeit- und kostenintensiv sind.

Im weiteren Verlauf sollen die Technologie-basierten Kenngrößen in Gleichung 4.10 hier nicht weiter betrachtet werden, da ihre Beeinflussung durch die vielen oben genannten Betriebsparameter in erster Linie Gegenstand der experimentellen Entwicklung ist. Das Produkt aus den anderen drei Quotienten HK/M , M/V und D/α soll hingegen als zentrale Kenngröße der Herstellprozesse in dieser Arbeit weiterentwickelt werden, um die reale Struktur der bereits in Bild 4.4 dargestellten Einzelkomponenten detaillierter widerspiegeln zu können.

Manche Einflussgrößen haben direkte Auswirkungen sowohl auf die Herstellung als auch auf das Betriebsverhalten eines Stacks. Beispiele sind die Katalysatorbeladung oder die Dicke der Membran, die mit Parametern wie ionischer Leitfähigkeit und Stoffdiffusion korreliert. Derartige Effekte stellen Wechselwirkungen zwischen Produktion und korrelierten Produkteigenschaften dar. Sie sind erst in einem späteren Stadium analysierbar, da sie gleichzeitig quantitatives Wissen über Herstellung und Betriebseigenschaften erfordern. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit sollen zunächst nur Kosteneffekte der Produktion ausgewählter Basismaterialien analysiert werden. Ein mögliches Leistungsverhalten im Betrieb ergibt sich aus Annahmen auf der Basis bisher bekannter gemessener Daten für die Materialien.

Wie schon in Abschnitt 3.1 (Seite 34) beschrieben, eignen sich für Vergleiche unterschiedlicher Produkt- und Fertigungstechnologien insbesondere deren Herstellkosten HK , da sie noch keine prozessfremden Anteile beinhalten. Benötigte Ressourcen gehen als Einzelkosten des jeweiligen Kostenträgers in die Analyse ein. Der Basisansatz sei zunächst

$$\text{Herstellkosten } HK = \text{Materialkosten } K_M + \text{Fertigungskosten } K_F \quad (\text{Gl. 4.11})$$

Dabei sind die Materialkosten variabel angesetzt. Fertigungskosten können sowohl fixe als auch variable Anteile enthalten, zumal in Gleichung 4.11 die Aufwendungen für die in benötig-

ten Produktionsfaktoren zunächst noch aggregiert sind. Die erforderliche Umformung von Gleichung 4.11 nutzt die folgenden Zusammenhänge :

$$\text{Materialkosten } K_M = \sum_{\text{Stoffe } i} k_{M,i} \cdot m_i \quad (\text{Gl. 4.12})$$

$$\text{Fertigungskosten } K_F = \sum_{\text{Prozesse } j} K_{F,j} = \sum_{\text{Prozesse } j} (K_P + K_E + K_K + K_Z + K_I)_j \quad (*) \quad (\text{Gl. 4.13})$$

$$\text{Massenanteil } w_i = \frac{m_i}{M} \quad (\text{Gl. 4.14})$$

$$\text{mittlere Dichte } \bar{\rho} = \frac{M}{V} = \frac{1}{V} \cdot \sum_i m_i = \frac{1}{V} \cdot \sum_i \rho_i V_i = \sum_i \rho_i r_i \quad (\text{Gl. 4.15})$$

Durch Einsetzen in den Ausdruck 4.10 folgt, dass

$$\frac{HK}{M} \cdot \frac{M}{V} \cdot \frac{D}{\alpha} = \left(\sum_{\text{Stoffe } i} k_{M,i} \cdot w_i + \sum_{\text{Prozesse } j} \frac{K_{F,j}}{M} \right) \cdot \bar{\rho} \cdot \frac{D}{\alpha} \quad \left[\frac{\text{Euro}}{\text{m}^2} \right] \quad (\text{Gl. 4.16})$$

Der Parameter $k_{M,i}$ stellt die Materialkosten der Rohstoffe i dar (und gegebenenfalls auch die zusätzlicher Hilfs- und Betriebsstoffe). Eine Möglichkeit ihrer realitätsnahen Bestimmung auf statistischer Basis, die im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelt worden ist, wird Abschnitt 4.5 näher beschreiben.

Der Quotient $K_{F,j}/M$ quantifiziert zunächst die in einem Fertigungsschritt j anfallenden Kosten pro Masse an Enderzeugnis. Eine Umformung weist den Term anschaulicher aus als

$$\frac{K_{F,j}}{M} \left[\frac{\text{Euro}}{\text{kg}} \right] = \frac{\frac{\text{Fertigungskosten } K_{F,j}}{\text{Bauteil}}}{\frac{\text{verarbeitete Masse } M}{\text{Bauteil}}} = \frac{\text{Fertigungsstückkosten}}{\text{Bauteilgewicht}} \left[\frac{\text{Euro/Stück}}{\text{kg/Stück}} \right] \quad (\text{Gl. 4.17})$$

Für das Optimierungsziel $\text{Min} \{K_{F,j}/M\}$ schlägt Gleichung 4.17 mathematisch betrachtet zwei prinzipiell mögliche Lösungsalternativen vor :

- ♦ Senkung der Fertigungsstückkosten
- ♦ Erhöhung des Bauteilgewichts

Nur die erste der beiden Möglichkeiten ist auch aus ökonomischer Sicht sinnvoll: Verringert man nämlich $K_{F,j}/M$ durch entsprechend proportional niedrigere Fertigungsstückkosten, so folgt hieraus bei konstant gehaltenem Bauteilgewicht unmittelbar eine höhere produzierte Stückzahl. Sie wird auch zu höheren Erlösen führen.

Der Versuch, den Quotienten $K_{F,j}/M$ über einen höheren Materialdurchsatz zu senken, der bei konstanten Fertigungsstückkosten in einem erhöhten Bauteilgewicht aufgeht, hält die produzierte Stückzahl konstant. Die bei konstant gebliebenen Erlösen nun erhöhten Materialkosten führen in Summe zu einem schlechteren HK/M-Wert für das Bauteil.

Es kann geschlossen werden, dass zur Beschreibung der Effizienz einer Fertigung ein Quotient wie $K_{F,j}/M$ nur eine mittelbare und zudem mehrdeutige Größe ist, was sie als Benchmark-Kennzahl ungeeignet macht.

* P: Personal, E: Energie, K: Kapital (Abschreibungen), Z: Zinsen, I: Indirekte Kosten

Das Optimum einer Produktionseffizienz ist daher am Quotienten aus Kosten und Produktausbringung zu messen. Es geht aus Gleichung 4.17 hervor als

$$\text{Min} \left\{ \frac{\text{Fertigungskosten}}{\text{Bauteil}} \right\} = \text{Min} \left\{ \underbrace{\frac{\text{Fertigungskosten}}{\text{verarbeitete Masse}}}_{\text{Produktionsleistung (Anlage)}} \cdot \text{Min} \left\{ \underbrace{\frac{\text{verarbeitete Masse}}{\text{Bauteil}}}_{\text{Bauteilgewicht (Design)}} \right\} \quad (\text{Gl. 4.18})$$

Eine Vorbedingung hierfür ist allerdings, dass die beiden Faktoren in keiner Weise korreliert sind. Dies ist aufgrund der Trennung von Anlagencharakteristik einerseits und Bauteildesign andererseits im Regelfall gegeben oder zumindest leicht realisierbar.

In Gleichung 4.16 ist schließlich auch noch die durchschnittliche Dichte im von Querschnitt F und Dicke D umschriebenen Volumen V des Bauteils enthalten. Für sie gilt nach Gleichung 4.15

$$\bar{\rho} = \frac{M}{V} = \frac{1}{V} \sum_{\text{Stoffe } i} m_i = \frac{1}{V} \sum_{\text{Stoffe } i} \rho_i \cdot V_i = \sum_{\text{Stoffe } i} \rho_i \cdot r_i \quad (\text{Gl. 4.15})$$

sofern ideales Mischungsverhalten vorliegt

Die Übertragung der Massenanteile der einzelnen Stoffe i in Raumanteile r_i des Gesamtvolumens ist nur dann zulässig, wenn es sich um ideale Mischungen handelt, also keine Exzessvolumina auftreten ($\Delta_E V = 0$). Die Art der Darstellung nach Gleichung 4.15 ermöglicht das Erfassen der räumlichen Struktur. Porositäten oder andere materialfreie Gebiete wie Leitungskanäle lassen sich einfach berücksichtigen, indem dort $\rho_i = 0$ gesetzt wird.

Die Bedeutung des Quotienten D/α , den Gleichung 4.16 schließlich am Ende enthält, ist direkt nachvollziehbar: Anzustreben sind geringe Bauteildicke D und hoher Flächennutzungsgrad α .

4.5 Monte-Carlo-Analyse zur Materialkostenbewertung

Das weitere Ziel bei den Vergleichen unterschiedlicher Materialien und Fertigungsverfahren der Bauteile besteht nun darin, die in Gleichung 4.16 dargestellten Benchmark-Faktoren zu ermitteln und unter ähnlichen marktseitigen Rahmenbedingungen miteinander zu vergleichen. Dies wird in den Kapiteln 5 und 6 für die Bipolarplatten und Membranpolymere der PEFC-Stacks exemplarisch ausgeführt.

Eine Schwierigkeit bei der Anwendung der Modellgleichung 4.16 bedarf aber zuvor noch näherer Überlegungen. Daten zu den auftretenden bauteilbezogenen Größen wie Dicke, aktive Fläche, mittlere Dichte oder auch enthaltene Materialmengen sind für ein gewähltes Design einfach ermittelbar. Eine Herausforderung ist es hingegen, über wahre Werte * für die massenbezogenen Materialkosten $k_{M,i}$ der einzelnen Einsatzstoffe zu verfügen und zudem Angaben über Kosten K_F eines Prozessschrittes j während der Komponentenproduktion machen zu können. Sie hängen nicht nur von technischen, sondern zudem auch von sehr unterschiedlichen betriebswirtschaftlichen und volkswirtschaftlichen Parametern ab.

Die Kapitel 4.5 und 4.6 stellen daher Analysekonzepte für diese beiden Kostenarten dar, die in dieser Arbeit entstanden sind und zur Anwendung kommen. Die hier beschriebene Materialkostenbewertung basiert auf Monte-Carlo-Simulationen und stellt somit ein statistisches Auswerteverfahren dar.

^{*} auch "exakter Wert" - gemäß DIN 55 350 Teil 13 der "nicht messbare, ideelle Wert in der Theorie"

Der besondere Vorteil liegt hierbei in der Generierung von Aussagen zu Größen, die von mehreren nicht beeinflussbaren Faktoren mit mittlerer bis hoher Unsicherheit abhängen. In derartigen Fällen sind einerseits Fehlerrechnungen nach Art von GAUSS nicht durchführbar, weil in der Regel keine Normalverteilungen vorliegen. Auf der anderen Seite führen Größtfehlerabschätzungen nur zu sehr unwahrscheinlichen *worst-case*-Szenarien, die in der Realität praktisch nie auftreten werden. Ihre Aussagekraft ist somit zu schwach. Monte-Carlo-Simulationen sind hingegen in der Lage, die Schwankungen im Wertebereich unsicherer Eingangsvariablen direkt zu berücksichtigen und Verknüpfungen mehrerer solcher Faktoren herzustellen, um schließlich Wahrscheinlichkeitsbereiche gesuchter Zielgrößen zu liefern.

4.5.1 Historische Entwicklung und Grundprinzip

Der Name "Monte-Carlo-Experiment" entstand etwa 1949 in Los Alamos (USA), wo ein erweitertes stochastisches Verfahren bei der Entwicklung von Kernwaffen zum Einsatz kam [100]. Treibende Kraft war das Interesse, Bewegungen der an den Kernreaktionen beteiligten Neutronen vorhersagen zu können. Deren so genannte *random walks* konnte die statistische Physik über Wahrscheinlichkeitsanalysen abschätzen [101, p. 145]. Ihren Namen Monte-Carlo-Simulationen erhielten sie in Anlehnung an den für sein Spielcasino bekannten Stadtteil Monacos. Noch 1978 stammten etwa 80 % der Literatur zu Monte-Carlo-Methoden aus dem Bereich der Nukleartechnik. Die Wirtschaftswissenschaften haben erst später damit begonnen, das Verfahren für die Behandlung ökonomischer Fragestellungen zu nutzen. In diesem Zusammenhang kommt das Grundprinzip der Methodik nun auch bei den nachfolgenden Kostenanalysen für Brennstoffzellen-Komponenten zum Einsatz. Allgemein beinhaltet die Anwendung des Verfahrens die folgenden Schritte [102, p. 222] :

1. Beschreibung des zu untersuchenden Systems mit Hilfe eines Modells
2. Identifikation der dominierenden Eingangsparameter
3. Bestimmung zu erwartender Wahrscheinlichkeitsverteilungen für diese Eingangsgrößen
4. N-fache Untersuchung des Modells mit einem zufällig ermittelten Eingangsvektor
5. Statistische Analyse des anhand der Ausgangsparameter beobachteten Systemverhaltens
6. Studie des Konvergenzverhaltens und somit der Effizienz der Verfahrens (optional)

Die Modellbeschreibung legt zunächst Systemgrenzen sowie Ein- und Ausgangsvariablen fest. Zudem sind Verknüpfungen zwischen den Parametern der Ein- und Ausgangsseite derart zu formulieren, dass das Verhalten im Inneren des Systems korrekt wiedergegeben wird. Nachfolgend sind alle für das Systemverhalten entscheidenden Größen über Wahrscheinlichkeitsdichte-Verteilungen ihrer Wertebereiche zu definieren.

Während der Simulationsphase wird für alle Eingangsvariablen je ein zufälliger Wert ausgewählt. Aus dem sich ergebenden Eingangsvektor folgt aus dem Modell ein Einzelergebnis für die Ausgangsparameter. Nach einer hohen Zahl an Wiederholungen (meist etwa 100.000) folgen aus den Einzelexperimenten dann Wahrscheinlichkeitsdichte-Verteilungen der gesuchten Größen. Bei umfangreicheren Simulationen kann das Konvergenzverhalten eine wertvolle Zusatzinformation liefern. Der Grad der Veränderung eines Mittelwertes bei einer zunehmenden Zahl an Experimenten hilft, die Anzahl so hoch wie nötig, zugleich aber dennoch aus Gründen der Effizienz so gering wie möglich zu halten.

Bild 4.5 zeigt ein sehr einfaches Beispielmodell, wie es in Kapitel 6 auch für die Polymermembran-Synthesen entsteht (Seite 101). Eine gesuchte Ausgangsgröße A wird unter dem Einfluss von vier Eingangswerten E_1 bis E_4 und deren (anfangs unbekannten) Wahrscheinlichkeitsverteilungen betrachtet. Im Inneren des Systems treten über Korrelationen feste Verstärkungsfaktoren auf, die zum Beispiel Mengenbilanzen von chemischen Reaktionen abbilden. Beteiligt sind im Beispiel zudem zwei Zwischenprodukte Z_1 und Z_2 .

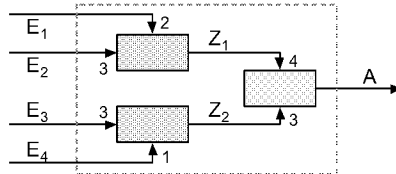


Bild 4.5 : einfaches Beispielmodell für eine Monte-Carlo-Analyse (Auswertung Seite 62)

Maßgeblich für die Qualität einer Monte-Carlo-Analyse sind neben der Präzision des Modells auch die Wahrscheinlichkeitsdichte-Verteilungen eingehender Parameter. Die richtige Art der Verteilung für eine Eingangsgröße zu wählen ist zwar von essenzieller Bedeutung, in der Praxis aber je nach Parametertyp unterschiedlich schwierig.

Viele physikalische, chemische oder technische Größen lassen sich über Sensoren oder Versuchsaufbauten mit unterschiedlichem Aufwand messen. Infolge statistisch auftretender Messfehler ergeben sich hieraus im allgemeinen normalverteilte Ergebnispunkte. Bei korrekter Durchführung des Experiments lassen sich schon mit einer geringen Zahl an Wiederholungen (~ 20) gute Ergebnisse für Erwartungswert und Varianz der gesuchten Größe finden. Ihre Streuung liegt dann meist im Bereich weniger Prozent.

Kennzahlen in Systemen, die von anthropogenen Faktoren beeinflusst werden, unterliegen oftmals anderen Gesetzmäßigkeiten, die zu nicht-normalverteilten Funktionen führen. Ein Beispiel hierfür sind die POISSON-Verteilungen für Warteschlangensysteme, die in einem gegebenen Fall die Länge des Zeitintervalls zwischen zwei Ereignissen beziehungsweise die Anzahl auftretender Ereignisse pro Zeiteinheit beschreiben.

Werden die Systeme schließlich größer und komplexer, so lässt sich gegebenenfalls keine Verteilungsfunktion mehr eindeutig zuordnen. Dies ist häufig bei makroökonomischen Kennzahlen der Fall, wie Bild 4.6 am Beispiel des Wechselkurses zwischen US-Dollar und Euro verdeutlicht.

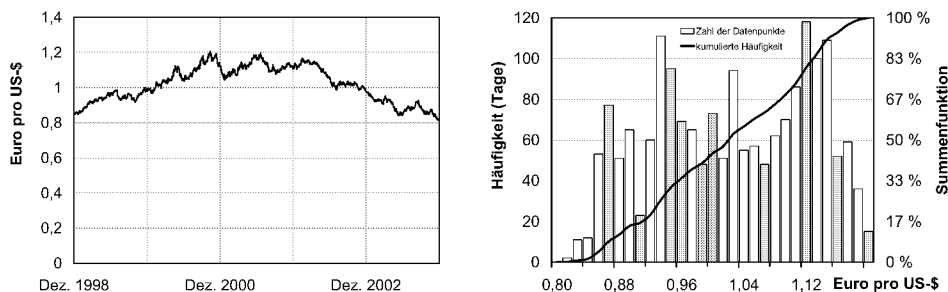


Bild 4.6 : Wechselkursverhältnis zwischen Euro und US-amerikanischem Dollar (Tageskurse)

Die dargestellten 1.830 Tageskurse liegen zwischen einer unteren und einer oberen Schranke (0,8 - 1,2). Der im rechten Teil dargestellte tendenziell lineare Verlauf der kumulierten Häufigkeit deutet auf eine Gleichverteilung der Werte hin, wobei die Menge an Datenpunkten in Nähe der Extrema geringer ist. An der Währungsparität erreicht die Summenfunktion einen Wert von 45 %. In den verbleibenden 55 % der Fälle war demnach der Wert größer als 1 und der Euro somit schwächer als der US-Dollar.

Das Beispiel hat gezeigt, wie die Information über den zeitlichen Verlauf bei der integralen Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilung zwangsläufig verloren geht. Dies ist ein erschwerender Faktor bei derartigen makroökonomischen Größen, denn sie verändern sich angesichts einer Vielzahl von Einflussparametern auch permanent dynamisch. Vor diesem Hintergrund sollte für Analysen kein zu langes Zeitintervall herangezogen werden. Zwar muss es genügend Daten für eine verlässliche statistische Auswertung enthalten (> 20), jedoch können ältere Informationen faktisch bereits ein falsches Bild liefern, da sie unter anderen Rahmenbedingungen als den aktuellen zustande gekommen sind.

Speziell bei der Betrachtung neuartiger Zusammenhänge kann es vorkommen, dass für eine detaillierte statistische Darstellung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen nicht genug oder überhaupt kein inhaltlich geeignetes Zahlenmaterial vorhanden ist. Doch selbst in derartigen Situationen kann man mit einiger Überlegung zu einer stilisierten Verteilung gelangen. Schlussendlich stellt der Wahrscheinlichkeitsbegriff dann keine objektive Information mehr dar, sondern beschreibt eher, für wie realistisch der Analyst beziehungsweise Entscheider das Auftreten eines bestimmten Zustandes hält [103, p. 124]. Auch wenn damit ein Teil der Eingangsdaten für eine Monte-Carlo-Analyse subjektiv beeinflusst ist, so kann ein solches Herangehen dennoch meist in ausreichender Weise Lücken im Eingangsvektor schließen. Dies ist spätestens dann positiv zu werten, wenn die Alternative in einer Nicht-Berücksichtigung der entsprechenden Einflussfaktoren bestünde.

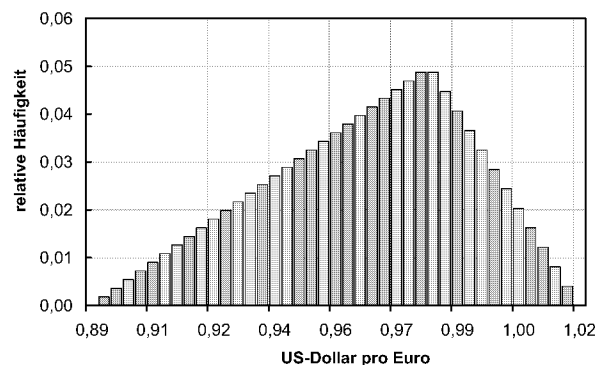


Bild 4.7 : modellierte Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Wechselkursverhältnis US-\$:Euro [74, p. 45]

Bild 4.7 zeigt eine in [74] angenommene Wahrscheinlichkeitsverteilung für das bereits diskutierte Wechselkurs-Beispiel: Ausgehend von unteren und oberen Schranken sowie einem Erwartungswert mit maximaler Wahrscheinlichkeit ist eine so genannte Dreieckverteilung entstanden, die dann in Simulationsrechnungen Verwendung finden konnte.

4.5.2 Statistische Methodik zur Ermittlung von Erzeugniskosten

Nach den grundlegenden Betrachtungen von Monte-Carlo-Verfahren sowie der Art ihrer Anwendung speziell bei der Behandlung wirtschaftswissenschaftlicher Aspekte kommt der folgende Abschnitt nun konkret auf die zu Beginn von 4.5 beschriebene Fragestellung zurück: Die Bestimmung der in Gleichung 4.16 benötigten Materialkosten $k_{M,i}$ (Seite 54). Es ist einleuchtend, dass ein wahrer Wert (siehe Fußnote Seite 55) in der ökonomischen Praxis nicht existent ist.

Der Preis, zu dem ein Stoff i angeboten werden kann, hängt stets von einer Vielzahl an Einflussgrößen ab, wie beispielsweise Anlagenkapazität, Selbstkosten, Abnahmemenge, Wichtigkeit des Kunden, tragbare Kosten auf Kundenseite und dergleichen. Eine nahe liegende Möglichkeit besteht zwar im Einholen mehrerer Angebote, hat aber inhärente Nachteile :

- ◆ Angebote werden nur erstellt, wenn eine Aussicht auf Umsatz erkennbar ist.
- ◆ Wesentlich für Studien abgegebene Angebote sind oft firmenpolitisch beeinflusst.
- ◆ Die Art des Kunden hat eine Rückwirkung auf die Preiskalkulation.
- ◆ Ein Ausschließen von Nebenkosten erfordert ein Anfragen sehr großer Mengen.
- ◆ Die Zahl der Hersteller kann je nach Produkt sehr gering sein.

Weitaus geeigneter als wenige Einzelangebote sind Informationsquellen, die unabhängig von direkten Firmenanfragen sind. Hier kommen entweder Fachverbände der entsprechenden Branchen oder statistische Ämter in Betracht. Ein gravierender Nachteil bei Verbänden ist die sehr individuelle Organisations- und Aktivitätsstruktur. Je nach Verband werden Informationen auf unterschiedliche Art gesammelt, aggregiert und publiziert. Dies schränkt die Vergleichbarkeit von Daten stark ein. Nicht zuletzt stellt ein Branchenverband auch eine Interessenvertretung seiner Mitgliedsfirmen dar, weswegen Informationen und Aktivitäten ebenfalls einer branchenpolitischer Einflussnahme unterliegen können.

Demgegenüber sammeln statistische Ämter Informationen zu verschiedenen Themenbereichen in sehr systematischer Weise und zudem aus einer gesamt-gesellschaftlichen und makro-ökonomischen Perspektive heraus. Aus diesem Grund greift die vorliegende Arbeit im Folgenden auf eine Datensammlung des europäischen statistischen Amtes EUROSTAT in Luxemburg zurück, das gemeldete Daten der 15 EU-Mitgliedsländer in strukturierter Form erfasst und dabei den größten Teil des europäischen Wirtschafts-, Währungs- und Sozialraums abdeckt.

Die umfassende Sammlung NEW CRONOS enthält in ihrem Themenkreis 4 "Industrie, Handel und Dienstleistungen" einen Bereich mit der Datenbank EUROPROMS (Europäische Produktions- und Marktstatistiken). Sie beinhaltet Angaben zu Mengen und Werten produzierter Güter in einer Matrix, die der NACE-Nomenklatur entspricht (*Nomenclature générale des Activités économiques dans les Communautés Européennes*). Nach dieser Katalogisierung der Wirtschaftszweige erfassen die Mitgliedsstaaten seit dem 1.1.1993 ihr Datenmaterial einheitlich, basierend auf einer EU-Regulierung vom 9.10.1990 [104]. Mit Beginn des Jahres 1993 ist damit auch eine Vergleichbarkeit für Statistiken der einzelnen Länder gegeben. Eine Übersicht über die in EUROPROMS enthaltenen Hauptwirtschaftszweige und die Zahl der enthaltenen Datensätze zeigt Anhang 8.4. Der sich anschließende Anhang 8.5 vermittelt einen Eindruck von Umfang und Detaillierungsgrad der insgesamt knapp 6.000 kategorisierten Gütergruppen.

Die ausgewerteten Daten erstrecken sich über einen Zeitraum von 1994 bis zum Jahr 2000. Sie enthalten sowohl Quartalszahlen als auch Jahreswerte. Für die Bestimmung massenspezifischer Kosten hat sich die Auswertung der jährlichen Bilanzen als ausreichend erwiesen. Tabelle 4.2 zeigt zunächst die makroökonomischen Bilanzgrößen, die für die erwähnte Vielzahl individueller Gütergruppen erfasst werden können.

Tabelle 4.2 : erfasste Bilanzgrößen in der Datenbank EUROPROMS

mengenbasierte Größen (quantity)	wertbasierte Größen (value)
qs Menge der verkauften Produktion	vs Wert der verkauften Produktion
qc Menge der Produktion zum Verkauf	vc Wert der Produktion zum Verkauf
qac Menge des Inlandsmarktes	vac Wert des Inlandsmarktes
qii Menge der Importe Intra EU	vii Wert der Importe Intra EU
qie Menge der Importe Extra EU	vie Wert der Importe Extra EU
qei Menge der Exporte Intra EU	vei Wert der Exporte Intra EU
qee Menge der Exporte Extra EU	vee Wert der Exporte Extra EU
qt Menge der Gesamtproduktion	ne Anzahl der Produktionseinheiten

Für eine gesuchte Klasse von Erzeugnissen lassen sich nun aus Wert- sowie zugehöriger Mengeninformation die Quotienten berechnen, meist in Einheiten wie [Euro/kg], [Euro/Liter], [Euro/Nm³] und dergleichen. Verwendet werden im Folgenden die korrespondierenden Verhältnisse: vs/qs , vc/qc , vac/qac , vii/qii , vie/qie , vei/qei sowie vee/qee . Die Daten qt und ne können als zusätzliche Informationsquellen dienen, lassen sich aber nicht zur Berechnung weiterer mengenspezifischer Handelspreise heranziehen.

Auch wenn sich ein Warenwert beim innereuropäischen Handel um die Frachtkosten und bei Zielen oder Quellen außerhalb Europas zudem um Ein- oder Ausfuhrzölle in gewissem Maße erhöht, so erfolgt dennoch im weiteren Verlauf der Betrachtungen eine Gleichbehandlung der oben genannten Quotienten. Dies geschieht zunächst aus Gründen der Übersichtlichkeit und zudem vor dem Hintergrund, dass eine statistische Betrachtung mit zunehmendem Umfang der Stichprobe auch verlässlichere Aussagen liefert. Zusätzlich findet eine Integration über die Jahre des Betrachtungszeitraums statt, wie dies Bild 4.6 bereits verdeutlicht hat.

Aus der Zusammenfassung der beschriebenen Parameter ergibt sich eine Matrix bestehend aus 16 Länderwerten (15 + "EU-gesamt"), 7 Bilanzgrößen (Tabelle 4.2) und 7 Jahren, was eine maximal mögliche Anzahl von 784 Datenpunkten zur Folge hat. Allerdings entsteht eine Information nur dann, wenn sowohl für die Wert- als auch die zugehörige Mengeninformation Zahlen vorliegen. Ansonsten ist keine Quotientenberechnung möglich. Dies kann speziell in den folgenden Fällen vorkommen :

- ◆ Ein entsprechendes Erzeugnis wird im Land nicht hergestellt.
- ◆ Das Mitgliedsland hat zur entsprechenden Produktgruppe keine Daten gemeldet.
- ◆ Es ist eine Mengengröße bekannt, aber nicht der zugehörige Wertstrom - oder umgekehrt.
- ◆ Aus Gründen der Vertraulichkeit erfolgt keine Veröffentlichung der gemeldeten Daten.

Der letztgenannte Fall liegt dann vor, wenn die Zahl der Hersteller so niedrig ist, dass die Publikation einem der Erzeuger Rückschlüsse auf Produktion beziehungsweise Absatz der Konkur-

renz zulassen würde. Um dies zu unterbinden, erscheint in der Matrix anstelle der Zahlen dann der Hinweis " : c " (*confidential*) .

Art und Ablauf der neu konzipierten Analyse einer EUROPROMS-Produktgruppe stellt Anhang 8.6 dar. Der Übersichtlichkeit halber sei an dieser Stelle stellvertretend mit Bild 4.8 ein exemplarisches Endergebnis vorgestellt, wie es sich für den Kunststoff PTFE (Gruppen-Nr. 24.16.30.60) ergibt.

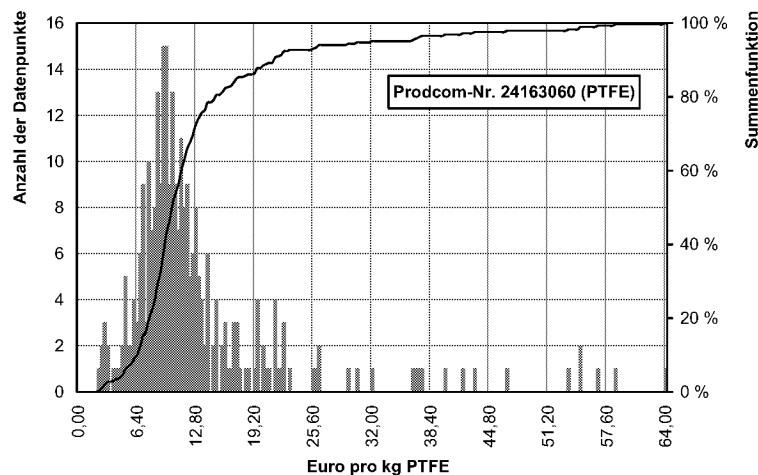


Bild 4.8 : Histogramm der EUROPROMS-Informationen für PTFE (287 Datenpunkte)

Die Auswertung besitzt nach der Konsistenzprüfung, bei der 1,7 % der verfügbaren Daten entfernt wurden (Anhang 8.6), einen Stichprobenumfang von 288 Datenpunkten. Schnitte der Summenfunktion liefern über die erwähnten geografischen und zeitlichen Bilanzräume hinweg zunächst einen Medianwert S_{50} von 10,18 Euro pro kg PTFE^{*}. Darüber hinaus beinhaltet der Verlauf der Summenfunktion eine vollständige Information über die Streuung der einzelnen Werte.

Charakteristische Anhaltspunkte zur Beschreibung von Normalverteilungen sind im allgemeinen die Summenfunktionswerte S_{16} und S_{84} , da sie Grenzpunkte $\mu - \sigma$ und $\mu + \sigma$ quantitativ kennzeichnen, die ein symmetrisches Intervall um den Erwartungswert μ mit einer Breite der doppelten Standardabweichung (2σ) einschließen. Anstelle von Normalverteilungen liegen bei Ergebnissen wie in Bild 4.8 diskrete Verteilungen vor. Dennoch stellen auch hier die Schnitte der Summenfunktion S_{16} und S_{84} unabhängig von der Verteilungsart gute Anhaltspunkte zur Einschätzung dar. Definitionsgemäß liegen zwischen ihnen 68 % aller Werte. Zu beachten ist dabei, dass die Teilintervalle $I_1 = \{S_{16}; S_{50}\}$ und $I_1^* = \{S_{50}; S_{84}\}$ aber verschieden breit sind und den Medianwert S_{50} somit asymmetrisch einschließen.

Im theoretischen Fall, dass sämtliche Einflussfaktoren auf die Preisgestaltung konstant blieben und dennoch die Zahl an verfügbaren Datenpunkten immer größer würde, könnten Histogramme wie in Bild 4.8 durch logarithmische Normalverteilungen angenähert werden. Da sich die

^{*} Der tiefgestellte Index bezeichnet den Anteil einer Stichprobe in %, der unter dem Wert liegt.

Randbedingungen der Märkte in der Realität aber dynamisch ändern, sind in MC-Analysen für Materialkosten in dieser Arbeit immer die originalen diskreten Verteilungen verwendet worden, ohne die realen Daten über Anpassungsparameter zusätzlich zu verändern.

Eine gute Erfassung der Randbereiche lässt sich schließlich auch bei diskreten Verteilungen realisieren, indem ergänzend auch die Werte von S_5 und S_{95} in die Darstellung eingehen. Hierdurch bleiben an den Rändern jeweils 5 % der Werte außen vor, die als wenig wahrscheinliche Extrema einzustufen sind. Somit folgt für den Beispielfall des PTFE folgende kompakte Charakterisierung der Datenverteilung, die einen schnellen Einblick in realistische Kostenbereiche einer bestimmten Produktgruppe von EUROPROMS ermöglicht :

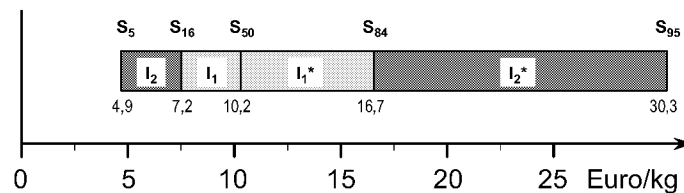


Bild 4.9 : Bereiche von 68 % und 90 % Wahrscheinlichkeit für PTFE-Handelspreise gemäß Bild 4.8

Bild 4.9 stellt nur noch einen Teilaspekt aus Bild 4.8 dar und dient im Wesentlichen der Orientierung. Ein Vergleich mit Tabelle 3.6 (Seite 42) zeigt, wie gut sich der dort zitierte Preis für PTFE in England von 9,9-19,8 US-\$(2002)/kg mit dem Spektrum deckt. Für die Durchführung einer MC-Analyse der Rohstoffkosten kommt die vollständige Summenfunktion wie in Bild 4.8 dargestellt zur Anwendung. Sie gibt die in Schritt 3 (Seite 56) benötigten Wahrscheinlichkeitsfunktionen der eingehenden Rohstoff-Materialkosten $k_{M,i}$ für Gleichung 4.16 genauer wieder.

4.5.3 Kombination von Modell und Rohstoffkosten-Verteilungen

Im Zuge der Monte-Carlo-Analyse kommt es nun zum Zusammenführen von Modell und Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eingangsgrößen (Schritt 4, Seite 56). Ein Ergebnis, wie es der vorangehende Abschnitt für PTFE geliefert hat, dient als Datenquelle für eine der vier Eingangsgrößen des Modells (Bild 4.5, Seite 57). Für E_2 , E_3 und E_4 sind entsprechende Informationen erforderlich. Aus dem Beispielmodell errechnet sich der Ausgangswert A in Bild 4.5 zu

$$A = 4 \cdot Z_1 + 3 \cdot Z_2 = 8 \cdot E_1 + 12 \cdot E_2 + 9 \cdot E_3 + 3 \cdot E_4 \quad (\text{Gl. 4.19})$$

Da sich eine Wahrscheinlichkeitsverteilung für A nicht analytisch aus Gleichung 4.19 und den Wahrscheinlichkeitsverteilungen von E_1 bis E_4 berechnen lässt, erfolgt eine hohe Anzahl statistischer Einzelexperimente. Für jedes erfolgt ein zufälliges Ziehen von je genau einem Wert für alle Eingangsparameter, was auf einen Eingangsvektor $EV_i = \{E_{1,i}; E_{2,i}; E_{3,i}; E_{4,i}\}$ führt. Hiermit lässt sich ein Einzelwert A_i für den Ausgang berechnen. Bei genügend hoher Anzahl an Experimenten i bildet sich eine aussagefähige Häufigkeitsverteilung der gesuchten Zielgröße A aus. Deren Auswertung (Schritt 5, Seite 56) erfolgt dann in klassischer Weise über das Erstellen eines Histogramms und die Ausgabe der Summenfunktion (Bild 4.8 und Bild 4.9). In Kapitel 6 kommt diese Art der Bestimmung von Rohstoffkosten für Polymermembranen intensiv zum Einsatz, wobei zunächst für die Ausgangskemikalien Daten aus EUROPROMS analysiert und dann mit den chemischen Syntheseketten als zugehörige Modelle verbunden werden.

4.6 Investkostenbewertung von Produktionsanlagen

Ein Blick zurück auf Gleichung 4.16 (Seite 54) bei der Modellentwicklung erinnert daran, dass neben Wertangaben für massenbezogene Materialkosten $k_{M,i}$ der einzelnen Einsatzstoffe auch Quantifizierungen der Prozesskosten $K_{F,j}$ eine Herausforderung darstellen. Kapitel 4.5 hat für die Einsatzstoffe einen neuartigen Lösungsansatz beschrieben. Der folgende Abschnitt stellt zunächst in der Literatur empfohlene Möglichkeiten der Kostenbewertung von Prozessen vor, um dann in 4.6.3 solche Verfahren zur Investkostenbewertung von PEFC-Stacks auszuwählen, die Gegebenheiten und Kenntnisstand bei den PEFC-Bauteilen entsprechen.

4.6.1 Literaturübersicht

Vorgehensweisen der entwicklungsbegleitenden Kalkulation, die sich in 4.1 für die strategische Kostenrechnung als zielführend zeigten, haben sich über die letzten Jahrzehnte in verschiedenen Bereichen unterschiedlich weiterentwickelt. Je nach Art des betrachteten Endprodukts empfehlen sich unterschiedliche Herangehensweisen. Tabelle 4.3 zeigt drei Gruppen von häufigen Fällen bei industriellen Erzeugnissen.

Tabelle 4.3 : Ziel von Kostenrechnungen bei verschiedenen Industrieerzeugnissen

montierte Endprodukte mit vielen Einzelteilen	kontinuierlich hergestellte Güter, industrielle Zwischenprodukte	Sonderfertigungen im Rahmen von Projekten
kostenoptimierte Konstruktion der Teile, geeigneter Automatisierungsgrad in Fertigung und Montage	produktmengenbezogene Kosten der Herstellung bei unterschiedlich komplexen Verfahren	projektbegleitendes Kostencontrolling
hoher Wiederholungsgrad	mittlerer Wiederholungsgrad	niedriger Wiederholungsgrad
hohe Variantenvielfalt bei kurzer Serienlaufzeit	limitierte Zahl an Alternativen, lange Abschreibungsdauer	individuelle Lösungen, Laufzeit unterschiedlich
Maschinen- und Fahrzeugbau, Elektro und Elektronik, ...	Chemie, Papier, Textil, Nahrungsmittel, Energie, ...	Schiffe, Gebäude, Satelliten, Großgeräte, ...

In Bereichen wie Maschinenbau oder Elektroindustrie (Tabelle 4.3 links) hat die Konstruktion der im Endprodukt enthaltenen Teile einen hohen Einfluss auf die späteren Fertigungskosten. Daher sind hier immer wieder schnelle teilebezogene Kosteninformationen an den Konstrukteur wichtig. Er wählt Design und Werkstoffe aus und legt damit zugleich auch entsprechende Fertigungs- und Montageverfahren fest [105, pp. 55-61]. Zur Unterstützung während der Konstruktionsphase existieren für klassische Fertigungsverfahren inzwischen Software-Programme, die bei festgelegter Geometrie und ausgewählten Werkstoffen Werte für die möglichen Stückkosten der Herstellung angeben [76, pp. 643-668]. Ferner spielt die Montage eine große Rolle, weswegen auch einer Reduktion der Teileanzahl solcher Enderzeugnisse ein hoher Stellenwert zukommt.

Bei Kostenkalkulationen zu kontinuierlich hergestellten Erzeugnissen (Tabelle 4.3 Mitte) steht hingegen weniger das Endprodukt, sondern mehr die zu seiner Herstellung erforderliche Anlage als ein Investitionsgut im Vordergrund. Die gewünschten Produkteigenschaften legen wesentliche Betriebsparameter bereits fest, aus denen dann in den einzelnen Verfahrensstufen ent-

sprechende einsatzfähige Apparate und Komponenten folgen. Die Umlage der Gesamt-Kapitalbindung auf die produzierte Menge an Produkt ergibt die Herstellkosten, meist in Euro pro kg. Diese Art der Produktkostenrechnung tritt speziell in verfahrenstechnischen Bereichen auf [89] [106] [107, pp. 445-459].

Bei Sonderanwendungen, die nicht selten industrielle Großprojekte darstellen, erfolgt ein projektbegleitendes Kostencontrolling (Tabelle 4.3 rechts). Im Vordergrund steht das Ziel, ein gesetztes komplexes Vorhaben mit möglichst geringen finanziellen Mitteln zu realisieren. Die Projekte haben hohen individuellen Charakter, sodass Übertragungen aus Vorprojekten nur bedingt möglich sind. Die tatsächlich entstehenden Aufwendungen sind dabei nicht selten höher als zu Beginn prognostiziert [108, pp. 253-259].

Der letztgenannte Aspekt beschreibt eine generelle Schwierigkeit entwicklungsbegleitender ökonomischer Analysen: In den frühen Phasen einer Produktentstehung sind zwar viele Möglichkeiten der Kostenbeeinflussung gegeben, das zur fundierten Kostenbeurteilung erforderliche Wissen steht aber noch nicht zur Verfügung [109, p. 6]. Dies hat zur Folge, dass frühe Angaben den Charakter von Schätzungen haben und ihre Qualität vor allem aus Erfahrungen ähnlicher Objekte in der Vergangenheit beziehen [108, pp. 252-260]. Genaue Parameter einer Produktionsanlage gehen erst aus der späteren konkreten technischen Entwicklung oder Konstruktion hervor und lassen sich dann nur noch eingeschränkt ändern.

Eine Auswertung abgeschlossener Projekte liefert belastbare Kostenangaben auf der Basis realer Zahlungen, deren sorgfältige Erfassung in Kosten-Datenbanken für die Bewertung zukünftiger Vorhaben von hoher Bedeutung ist. Somit stellen sie auch für die an Realisierungsprozessen beteiligten Unternehmen einen hohen Wert dar, was zwangsläufig dazu führt, dass diese realen Daten von ihnen häufig nicht publiziert, sondern nur firmenintern und in vertraulicher Weise kommuniziert werden [108, p. 261] [89, p. 41]. Es ist zu beobachten, dass Veröffentlichungen von Daten nur stattfinden, wenn Firmen hierdurch keine Beeinträchtigung ihrer Stellung am Markt durch die Konkurrenz erwarten. Beispiele hierfür sind [89] oder [110, p. iii].

4.6.2 Vorgehensweise der verfahrenstechnischen Kalkulation

In seiner Gesamtheit ist ein PEFC-Modul der linken Gruppe in Tabelle 4.3 zuzuordnen. Das montierte Endprodukt besteht aus mehreren Stacks mit jeweils vielen Zellen sowie peripheren Zusatzbauteilen, sodass die Gesamtzahl an Einzelteilen leicht über 100 oder auch 1.000 liegen kann. Im Zentrum dieser Arbeit steht allerdings zunächst die Produktion der beiden Zwischenprodukte Bipolarplatte und Ionormembran. Ein vorrangiges Nahziel bei der Entwicklung ist es, für sie zunächst kostengünstige, möglichst kontinuierliche Produktionsverfahren bereitzustellen. Deren Investitionskosten lassen sich am ehesten über Methoden der verfahrenstechnischen Kalkulation bewerten (Tabelle 4.3 Mitte), weswegen diese nun im Weiteren genauer erläutert werden.

Je nachdem, in welchem Planungsstadium ein Investitionsobjekt sich befindet, stehen unterschiedliche Qualitäten an Informationen zur Verfügung, was eine angepasste Methode der Kostenbewertung erfordert [107, p. 446] [89, p. 45]. Die Bezeichnung der Phasen ist in der Literatur uneinheitlich, geht jedoch prinzipiell von Überschlagsschätzungen über Näherungsmethoden und Studienschätzungen (beziehungsweise Zuschlagfaktormethoden) bis hin zu de-

taillierten Methoden (Genehmigungsschätzung)^{*}. Der Planungsgrad nimmt dabei von 0,1 auf 20 % der insgesamt nötigen Planungsarbeit stetig zu, und auch der finanzielle Aufwand für die Beurteilung kann zum Zeitpunkt der Investitionsentscheidung auf bis zu 3 % des Gesamtbudgets ansteigen [110, p. 15]. Dafür verbessert sich aber auch die Schätzgenauigkeit angesichts eines Mehr an bekannten Daten (zunächst etwa ± 50 %, später dann ± 10 %).

Erste Wirtschaftlichkeitsüberlegungen geschehen meist auf der Basis bekannter Investitionskosten vergleichbarer Anlagen. Degressionsexponenten können dabei eventuellen Kapazitätsunterschieden Rechnung tragen (Seite 39) [89]. Bei bestehenden Anlagen lassen sich Komplexität beziehungsweise Produktionstiefe über den Umschlagkoeffizienten des Anlagekapitals bewerten, der den Quotienten aus Jahresumsatz und Anlagenkapitalbedarf darstellt [89].

Eine alternative Methode der Vorkalkulation nimmt für organisch-chemische Großanlagen die je Zeiteinheit im Prozess dissipierte Energie als Basis und zeigt, dass der thermische Wirkungsgrad die Kernkosten eines Prozesses sowohl über die Rohstoff- als auch über die Investitionskosten beeinflusst. Dieser Ansatz erfuhr eine Validierung anhand von Kohleveredelungsanlagen [111].

Die sich anschließenden genaueren Bewertungssysteme (Studienschätzung, Zuschlagfaktormethode, *preliminary estimate*) orientieren sich insbesondere bei chemischen Anlagen an einem erweiterten Satz an Informationen :

- ◆ Nennkapazität (zur Deckung eines definierten Marktes)
- ◆ Material- und Energiebilanz für Roh-, Hilfs- und Betriebsstoffe (RHB)
- ◆ Verfahrensfließbild (mit Prozessstufen sowie den enthaltenen Apparaten)
- ◆ Betriebsparameter (Druck, Temperatur, Verweilzeiten, gegebenenfalls Reinheitsgrade)
- ◆ Konstruktionswerkstoffe (verträglich mit den Ausgangs-, Zwischen- und Endprodukten)

Je vollständiger dieser Datensatz für ein bestimmtes Verfahren zur Verfügung steht, desto höher wird die mögliche Qualität der Kostenaussage. Bestehen punktuell Informationslücken, so ist zu überlegen, wie diese sich durch Schätzungen schließen lassen. Die schrittweise Durchführung einer Ermittlung des Anlagenkapitalbedarfs ist in einigen Literaturquellen gut dokumentiert [107, pp. 447-454] [110, pp. 19-65].

Die Analyse beruht auf einer Summierung von Einzelschätzungen für die enthaltenen Apparate und Maschinen, die so genannten Hauptpositionen (HP). Ihre Kosteninformationen sind in Form einfacher Nomogramme abgelegt, und zwar als Funktion einer kennzeichnenden Größe für das Aggregat (Seite 39). Bei Wärmetauschern ist dies beispielsweise die Fläche, bei Kolonnen der Durchmesser, bei Elektromotoren die Bemessungsleistung [106, p. 892] [110, pp. 70-90] [86, pp. 255-308]. Eine Grundausslegung muss soweit erfolgt sein, dass diese kennzeichnenden Größen für alle enthaltenen Apparate quantifizierbar sind. Ist dies zu aufwändig, so kann der Kapitalbedarf alternativ über das Gewicht des Aggregats approximiert werden, sofern es zum einen leicht berechenbar ist und der Materialkostenanteil der Einrichtung hoch ist. Geometrie- und Werkstoff-Aspekte gehen über Zuschlagfaktoren ein. Für komplizierte Apparate wie Trockner, Filter, Zentrifugen, Pumpen und dergleichen ist das Verfahren jedoch zu ungenau und daher wenig gebräuchlich [107, p. 451].

^{*} englischsprachige Bezeichnungen in [110, p. 15]

Der Saldo der Hauptpositionen ergibt zunächst einen Gesamtbetrag, der dann mit einer Summe an Zuschlägen für direkte Nebenpositionen (DN) multipliziert wird. Eine analoge Summe wird für indirekte Nebenpositionen (IDN) gebildet und mit (HP+DN) multipliziert. Gleichung 4.20 zeigt die mathematische Darstellung hierfür. Die sich anschließende Tabelle enthält zudem relative Größenordnungen für die Nebenpositionen sowie deren Inhalte.

Kapitalbedarf = HP + DN + IDN

$$\begin{aligned}
 &= \sum_i HP_i + \sum_j DN_j \cdot \sum_i HP_i + \sum_k IDN_k \cdot \left(1 + \sum_j DN_j\right) \cdot \sum_i HP_i \quad (\text{Gl. 4.20}) \\
 &= \sum_i HP_i \cdot \left[1 + \sum_j DN_j + \sum_k IDN_k + \sum_j DN_j \cdot \sum_k IDN_k\right]
 \end{aligned}$$

Tabelle 4.4 : Hauptpositionen und Zuschlagfaktoren [107, p. 452]

Gruppe und Größenordnung	Kostenarten
Hauptpositionen (HP)	Apparate und Maschinen
Direkte Nebenpositionen DN = 1...3,8 · HP	Nebenanlagen, Rohre, Instrumentierung, Gebäude, Umweltschutzvorkehrungen
Indirekte Nebenpositionen IDN = 0,4...1,35 · (HP + DN)	Montage, Engineering, Projektierung, Inbetriebnahme, Baustelle, Projektverwaltung, Reserve

Vereinfacht wäre auch ein Bezug indirekter Nebenpositionen auf die Hauptpositionen möglich [89, Gl. 8]. Dies macht aber die Unterscheidung zwischen den Nebenpositionen überflüssig und führt zu inhaltlicher Ungenauigkeit, da sich indirekte Nebenpositionen auf Hauptpositionen *und* direkte Nebenpositionen beziehen. Der Effekt verstärkt sich, wenn die Hauptpositionen nur noch mit einem einzigen Globalfaktor multipliziert werden [89, Gl. 7]. Während sich bei additiven Methoden der relative Fehler mit zunehmender Anzahl n der Summanden proportional zu $1/\sqrt{n}$ verringert, so tritt hingegen bei multiplikativen Methoden eine direkte Fortpflanzung aller Einzelfehler auf [111, pp. 4-7]. Dies führt zur allgemeinen Empfehlung, nicht nur die Hauptpositionen, sondern auch Nebenpositionen so additiv wie möglich zu betrachten; auch dann, wenn in Einzelpunkten zunächst noch auf Schätzungen zurückgegriffen werden muss.

Der mit Gleichung 4.20 ermittelte Anlagenkapitalbedarf kann nun auf den Abschreibungszeitraum (bei Maschinen meist etwa sieben, bei Chemieanlagen in der Regel zehn Jahre) umgelegt werden und über die Jahresproduktion an verkäuflichem Produkt diesem zugerechnet werden. Somit ergibt sich dessen Beitrag zu K_F/M in Gleichung 4.16 (Seite 54). Gemäß Definition enthält K_F jedoch auch noch Anteile für Betriebspersonal, Energiekosten und dergleichen, die zusätzlich zu den Anlagenkosten separat abgeschätzt und diesen hinzu gerechnet werden müssen. Gemäß der Definition in Gleichung 4.13 (Seite 54) werden über K_F alle wichtigen Kostenarten auf das Produkt umgelegt. Hierzu zählen auch kalkulatorische Zinsen für den Kapitaleinsatz (K_Z) sowie indirekte Kosten (K_I), die sich durch Umlage sonstiger im Unternehmen angefallener Gemeinkosten ergeben.

4.6.3 Vorgehensweise bei PEFC-Stack-Komponenten

Bipolarplatten und -elemente

Bipolarelemente wie in 2.1 beschrieben lassen sich mit überschaubaren Produktionsanlagen herstellen. Pressen formen zunächst die Einzelteile, die gegebenenfalls in nachgeschalteten Schritten eine Nachbehandlung durchlaufen. Die kühlbaren Bipolarelemente (BPE) entstehen durch zusätzliches Fügen zweier Einzelplatten. Dichtungen lassen sich durch automatisiertes Spritzgießen in einer weiteren Maschine auf den Außenflächen hinzufügen.

Daten zum Kapitalbedarf für die entsprechenden Standardmaschinen sind über verschiedene Firmeninformationen zugänglich. Dort sind auch der Energiebedarf sowie weitere technische Daten vermerkt. Informationen zum Personaleinsatz im Schichtbetrieb sind von Herstellern oder Anwendern erhältlich. Anhand des Beispiels spritzgegossener Platten aus einer Kunststoff-Grafit-Mischung wird Kapitel 5 die Anwendung des in Abschnitt 4.4 entwickelten techno-ökonomischen Benchmarking-Modells veranschaulichen.

Protonenleitende Polymermembranen

Bei den Anlagen zur Herstellung protonenleitender Polymerfolien handelt es sich hingegen um komplexe Sonderanlagen der Chemie, die unterschiedlich viele chemische, mechanische und thermische Verfahrensschritte beinhalten. Ziel ist daher, ihre Kostenbetrachtung in Kapitel 6 an dafür in der Literatur beschriebenen Methoden auszurichten.

In Anbetracht der etwa 100 Haupt- und 120 Nebenpositionen, die insgesamt in den fünf untersuchten Polymersynthesen enthalten sind, wäre eine Grobdimensionierung für jeden Apparat zu ineffizient. Zudem bestünde in Ermangelung redundanter Ergebnisse hinterher keinerlei Möglichkeit einer vergleichenden Diskussion. Tabelle 4.5 zeigt daher fünf eigenständige Methoden zur Anlagenabschätzung, die anstelle von Einzeldimensionierungen eingesetzt wurden.

Diese Kalkulationsverfahren wurden eigens zum Zweck der Schätzung des Anlagenkapitalbedarfs in der chemischen Industrie entwickelt und gehen prinzipiell genauso vor wie im vorigen Abschnitt beschrieben (Seite 65).

Möglichst genaue Verfahrensfließbilder sind eine Grundvoraussetzung zur Beurteilung. Angesichts der hohen Datensensibilität sind Firmenanfragen nicht zielführend. Somit kommt der sorgfältigen Eigenkonzeption modellhafter Fließbilder auf der Basis publizierter Offenlegungsschriften eine hohe Bedeutung zu. Dabei ist großer Wert auf die verfahrenstechnische Sachrichtigkeit zu legen.

Die vollständigen Ergebnisse werden in Kapitel 6 entwickelt und diskutiert. Nach dem Vergleich der fünf Methoden, die auf jede Synthese angewandt werden, steht insbesondere eine Gegenüberstellung resultierender Werte für die Benchmarking-Kennzahlen im Mittelpunkt.

Die in Tabelle 4.5 genannten Vorgehensweisen sind im Kontext einer chronologischen Entwicklung während der 70er Jahre zu sehen, auf die nachfolgend kurz eingegangen werden soll. Die neueren Methoden haben ihre Vorgänger evaluiert und deren Schwachpunkte als Ansatzpunkt für Optimierungen verwendet.

Tabelle 4.5 : empirische Methoden zur Abschätzung des Anlagenkapitalbedarfs für Chemieanlagen

Autoren	Entstehung	eingehende Parameter	Lit.
Zevnik, F.C. Buchanan, R.L.	USA 1963	♦ Zahl der Funktionseinheiten ♦ Produktionskapazität ♦ Komplexitätsfaktor = $f(\text{Temperatur, Druck, Werkstoffen})$	[112]
Stallworthy, E.A.	GB 1970	♦ Anzahl an Haupt- und Nebenströmen S_i ♦ relatives Verhältnis der Ströme S_i zum Hauptstrom ♦ Zahl der Verfahrensschritte entlang S_i ♦ Druck-, Temperatur- und Werkstofffaktor für S_i ♦ Produktionskapazität	[113]
Wilson, G.T.	GB 1971	♦ mittlere Apparatelkosten = $f(\text{mittlerem Anlagendurchsatz})$ ♦ Investitionsfaktor = $f(\text{Apparatelkosten, Aggregatzustand})$ ♦ Anzahl an Apparaten, jedoch ohne Pumpen ♦ gemittelte Faktoren für Druck, Temperatur und Werkstoffe	[114]
Allen, D.H. Page, R.C.	GB 1975	♦ Anzahl aller Apparate, inklusive Pumpen ♦ Faktoren für max. Druck, max. Temperatur, Werkstoffe ♦ Gesamt-Feed in die Anlage ♦ mittlere Anzahl an Strömen in/aus einem Apparat ♦ Anteil an Apparaten mit gas-/dampfförmigen Fluiden ♦ Zuschlagfaktor für Nebenpositionen	[115]
Taylor, J.H.	GB 1977	♦ Anzahl an Verfahrensschritten (nicht Apparate) und Stoffen ♦ summarischer Komplexitätsexponent, mit Anteilen für : ♦ relativer Durchsatz (und Einfluss mehrflutiger Auslegungen) ♦ Verweil- beziehungsweise Lagerungszeit ♦ Druck (Max-Min), Temperatur (Max-Min) und Werkstoffe ♦ Besondere Bedingungen wie Explosivität, Giftigkeit, hohe Reinheit, Azeotropen-Trennung, Filmverdampfung	[116]

Der Ansatz von ZEVIK und BUCHANAN (1963) war der erste Versuch, Planern ein schnell einsetzbares Kalkulationsinstrument für grobe Abschätzungen verfügbar zu machen. Von nachfolgenden Publikationen sind jedoch zwei Aspekte kritisiert worden :

- ♦ Die Definition einer Funktionseinheit bleibt unklar und unterliegt der subjektiven Einschätzung des individuellen Anwenders
- ♦ Der durchgesetzte Massenstrom wird für alle Funktionseinheiten gleich dem Produktstrom gesetzt, wodurch Kuppelprodukte und innere Rückführungen (insbesondere von Lösungsmitteln) nicht erfasst werden.

Hinzu kommt, dass die Methode mittlerweile 40 Jahre alt ist. Folglich orientiert sich auch das Nomogramm, welches die Kosten einer Funktionseinheit in Abhängigkeit der Produktionskapazität darstellt, an einer anderen Art von chemischen Anlagen, als diese heute gebaut werden. Nebenanlagen zur Sicherheit und zum Umweltschutz waren Anfang der 60er in viel geringerem Umfang vorhanden als dies heute der Fall ist. Insgesamt lässt sich aus den genannten Nachteilen ein Trend zur Unterschätzung heutiger Kosten ableiten; wahrscheinlich um einen Faktor zwischen 2 und 3.

Der Ansatz von STALLWORTHY (1970) ist in mehreren Punkten methodisch verbessert :

- ◆ Anstelle der Funktionseinheiten sind nun Zahl und Stärke der Massenströme durch die Anlage die maßgebliche Basis. Sie werden bewertet und aufsummiert.
- ◆ Die einzelnen Verfahrensschritte der Anlage werden mit der durch sie relativ zum Hauptstrom durchgesetzten Menge gewichtet.
- ◆ Für das Kosten-Kapazität-Nomogramm kommen aktuellere Daten zum Einsatz.

Dementsprechend bescheinigen andere Quellen diesem Ansatz gute Ergebnisse beim Nachrechnen realisierter Anlagen, sofern der in der Originalliteratur falsch angegebene Faktor von 0,075 auf 0,0075 korrigiert ist [114, 115]. Dennoch wird zugleich erwähnt, dass die Definition von Haupt- und Nebenströmen unklar ist. Die relativen Ströme stellen mögliche Fehlerquellen bei Rückführungen dar. Schlussendlich auftretende Abweichungen bis zu einem Faktor 2 gelten als eher unbefriedigend.

WILSON (1971) publizierte kurz danach eine Methodik, die weder Funktionseinheiten noch Mengenströme, sondern vielmehr die in der praktischen Umsetzung benötigten Apparate als zentrale Bezugsgröße betrachtet. Der Ansatz ähnelt sehr dem von ZEVIK und BUCHANAN, wird bei WILSON aber auf alle Apparate einzeln angewandt, ehe eine arithmetische Mittelung für den Durchsatz und die Druck-, Temperatur- und Werkstofffaktoren erfolgt.

Allerdings führt die Veränderung zu keiner Verbesserung in der Ergebnisvorhersage, wie die mittleren Fehler von 90 beziehungsweise 60 % an anderer Stelle zeigen [115, 117]. Auffallend ist auch die nahezu ausschließliche Unterschätzung der tatsächlichen Kosten um einen Faktor 2 bis 3. Der Schwachpunkt liegt in der sehr ungenauen Approximation der zugrunde gelegten Anlagendaten begründet, die durchschnittliche Apparatelkosten als Funktion eines mittleren Durchsatzes annähert.

ALLEN und PAGE (1975) bauten auf diesen bestehenden Erfahrungen auf und übernahmen dabei zunächst den Bezug auf alle einzelnen Apparate der Anlage sowie die existierenden Zuschlagfaktoren für Temperatur, Druck und Konstruktionswerkstoffe. Ihr Anspruch war aber zugleich, die bis dahin erforderlichen vollständigen Massenbilanzen für alle Funktionseinheiten beziehungsweise Apparate zu umgehen.

- ◆ Es werden nur noch die insgesamt zuströmenden Mengen aufsummiert.
- ◆ Der Gesamt-Feed wird mit Korrekturfaktoren für die mittlere Anzahl an Zu-/Abflüssen eines Apparates sowie für den vorherrschenden Aggregatzustand in einen Durchsatz umgerechnet.
- ◆ Nicht Massen, sondern Stoffmengen sind die zentrale Bilanzierungsgröße, da die Autoren den Standpunkt vertreten, dass diese den für die Aggregatgrößen entscheidenden Volumendurchsatz besser widerspiegeln. Dies trifft vor allem auf Gase zu.
- ◆ Um WILSONS Fehler einer ungenauen Approximation von Anlagendaten zu vermeiden, ist der Kapazitätsexponent keine Konstante mehr. Er berechnet sich nun als wertgewichtetes Mittel individueller Exponenten für die Aggregate. Deren Bereich geht von 0,3 für Speichertanks bis 0,85 für Feuerungen oder Kompressoren mit Betriebsdrücken von ~ 70 bar.

Der letztgenannte Aspekt stellt mit Sicherheit eine Verbesserung dar. Er ermöglicht neben der Berechnung einer einzelnen Kosteninformation zudem die Angabe einer Verteilungsbreite, die aus den validierten Anlagen hervorgeht.

Der mit dem Umgehen von Massenbilanzen für Einzelaggregate verbundene Aufwand kompliziert das Verfahren und bringt andere Ungenauigkeiten mit sich, zum Beispiel über den Durchschnittswert der Zu- und Abflüsse eines Apparats (*flow factor*). Bilanzen sind einfach zugänglich, sobald die Summe der Eintrittsströme und das Verfahrensfliessbild bekannt sind.

Der gravierendste Nachteil der Methode von ALLEN UND PAGE ist jedoch der Bezug auf Stoffmengen anstelle von Massen. Es ermöglicht zwar eine Unterscheidung zwischen flüssigen und gasförmigen Fluiden, verfälscht aber die Bewertung von Flüssigkeiten untereinander. Wie sich in Kapitel 6 zeigen wird, kommt es zu einer starken Unterbewertung von Flüssigkeiten mit hohem Molekulargewicht – insbesondere relativ zu Wasser, das mit 18 g/mol stoffmengenbezogen eines der leichtesten Lösungsmittel ist^{*}. Hierdurch wird der Ansatz umso mehr zu einer Unterschätzung führen, je höher der Anteil flüssiger Fluide ist, und zwar speziell solcher mit hohem Molekulargewicht. Eine derartige Einschränkung erfolgte von Autorensseite jedoch nicht.

TAYLOR (1977) stellt mit dem *process step scoring* wohl die überzeugendste Methode zur Abschätzung des Anlagenkapitalbedarfs bereit [116]. Sie orientiert sich an klar definierten und abgegrenzten Verfahrensschritten. Parallel zu diesen gehen auch Lagerung und Handhabung der involvierten Edukte, Intermediate und Produkte mit in die Bewertung ein. Wie aus Tabelle 4.5 erkennbar ist, umfasst die Analyse zudem erweiterte Betriebsbedingungen. Erstmals gehen Reaktions- beziehungsweise Verweilzeiten als zusätzliche Parameter mit ein. Auch besondere Schwierigkeiten im Anlagenbetrieb erfahren eine Berücksichtigung.

TAYLOR selbst gibt die Präzision der Ergebnisse mit 15 % Standardabweichung sowie einem 95 %igen Vertrauensintervall zwischen -25 und +35 % an. Die Methode orientiert sich am technologischen Stand 15 Jahre nach dem ersten Ansatz von ZEVNIK UND BUCHANAN. Somit ähneln auch die Vergleichsanlagen am ehesten den heute existierenden.

Die Kalibrierung der mit den fünf Vorgehensweisen errechneten Beträgen für das Investitionskapital ist aufgrund ihres unterschiedlichen Alters unabdingbar. Ergebnisse in englischen Pfund Sterling werden hierbei zunächst mit ihrem damaligen Kurswert in US-amerikanische Dollar konvertiert. Diese erhalten dann in einem zweiten Schritt einen Zuschlagfaktor in Höhe des Quotienten der Indexwerte von Bezugs- und Basisjahr.

Als Index kommt hier aber nicht der bereits in Bild 3.6 gezeigte *Producer Price Index*, sondern der speziell für den chemischen Anlagenbau gebildete US-amerikanische *Chemical Engineering Plant Cost Index* (CEPCI) zum Einsatz, der die tatsächliche Kostenentwicklung in den USA viel genauer wiedergeben kann. Bild 4.10 zeigt seinen Verlauf zwischen 1960 und 2002.

^{*} Zwei identische Massenströme von Wasser (18 g/mol) und Diphenylsulfon (218 g/mol), die beispielsweise eine Pumpe durchlaufen, werden mit einem Faktor 12 unterschiedlich bewertet.

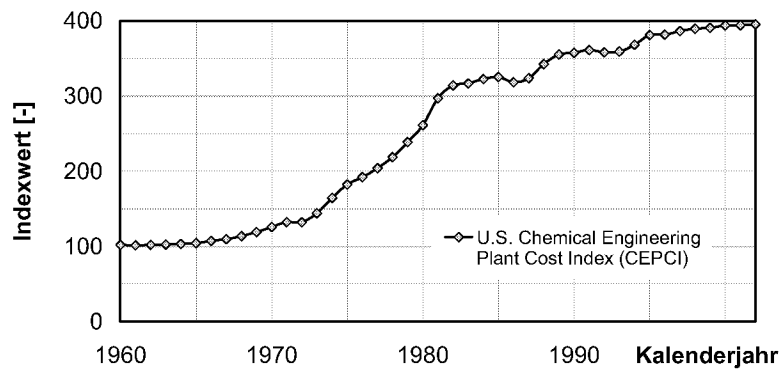


Bild 4.10 : Kostenindex für den chemischen Anlagenbau in den USA zwischen 1960 und 2002 [118]

Der Vollständigkeit wegen sei abschließend noch erwähnt, dass in dieser Arbeit keine Berücksichtigung so genannter Länderfaktoren stattfindet. Da alle vier neueren Methoden aus Großbritannien stammen, stellt dies keine Fehlerquelle dar. Anlagen- und Betriebskosten in anderen Ländern können jedoch stark von den hier generierten Werten für "Chemieanlagen in Großbritannien, ausgedrückt in US-\$(2002)" differieren.

Katalysator-Materialien

Die Produktion von Katalysator-Suspension (Bild 2.7) müsste für genaue Aussagen ebenso über Verfahrensfleißbilder, Betriebsbedingungen und dergleichen untersucht werden, allerdings dominiert hier sicherlich der Wert des eingesetzten Edelmetalls die Herstellkosten, solange keine Alternativen zu Platin gefunden sind.

Aus diesem Grund verzichtet die vorliegende Arbeit auf eine ähnlich genaue Prozessanalyse wie im Fall der protonenleitenden Membranmaterialien und beschränkt sich anstelle dessen auf eine kurze Analyse der Edelmetallpreise (Anhang 8.11). Sie lassen sich bei Bedarf überschlägig mit einem Zuschlag für die Wandlung des Reinmetalls in Katalysatormaterial belegen, wie dies bereits die in 3.2.1 diskutierte Studie des U.S. Department of Energy getan hat^{*}. Eine solche Abschätzung schließt aber eine detailliertere Analyse von Herstellprozessen für Katalysatoren in aufbauenden Arbeiten nicht aus.

Gasdiffusionslagen

Gasdiffusionsmaterialien (2.4, Seite 26) sind in dieser Arbeit noch nicht explizit auf ihre Produktion hin untersucht worden, da sie kein vorrangiges kostenkritisches Bauteil der Stacks darstellen (Bild 1.1 beziehungsweise Abschnitt 3.4). Dennoch empfiehlt es sich, dies in aufbauenden Arbeiten genauer zu hinterfragen.

^{*} Arthur D. Little ging von 15 % Zuschlag auf den Platinpreis am London Metal Exchange aus.

4.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel ist die Bereitstellung eines neuen, allgemein anwendbaren techno-ökonomischen Modells für PEFC-Module erfolgt. Es ermöglicht für bekannte oder zukünftige technologische Lösungen der Stack-Komponenten entwicklungsbegleitende Analysen der Herstellkosten, die ein Bestandteil strategischer Kostenrechnungsverfahren sind. Material- und Fertigungskosten werden unabhängig voneinander betrachtet und sind einzeln diskutierbar.

Grundlage der Betrachtung ist die systematische Anpassung der Benchmarking-Methodik an PEFC-Stacks. Anders als bisherige Studien nutzt diese erstmalig einen allgemein anwendbaren Ansatz, der kontinuierlich verfolgt werden kann und verschiedene technische Varianten über ein Kennzahlssystem vergleichbar macht. Durch die Objektvergleiche treten schließlich aussichtsreiche *best practices* in nachvollziehbarer Weise hervor.

Zur Erfassung der Bauteile als Einzelobjekte der Analyse ist zunächst ein geometrisches Modell eines PEFC-Moduls erstellt worden, das die Architektur der enthaltenen Stacks der kW-Klasse mit seiner typischen Serienschaltung repetitiver Einzelzellen aus BPEs und MEAs beschreibt (Bild 2.1, Seite 9).

Drei Problembereiche folgen aus bisherigen Arbeiten: Produktionskosten, Aggregatleistung und Stack-Lebensdauer. Demnach setzt das Kennzahlssystem für das Benchmarking hier an, definiert den virtuellen Benchmark B als Minimum des Quotienten Herstellkosten / (elektrische Leistung · Lebensdauer) und macht so den Grad der Zielerreichung bei der Optimierung messbar. Eine geeignete Schreibweise des Ausdrucks für B trennt die Parameter zur Beschreibung von Material, Design und Herstellung einer betrachteten Komponente von Faktoren, die das Leistungsvermögen im Betrieb charakterisieren (Gleichung 4.10, Seite 52).

Das Ermitteln der massenbezogenen Herstellkosten (HK/M) stellt eine Schlüsselaufgabe dar. Herstellkosten teilen sich in eine Summe aus Materialkosten K_M und Fertigungskosten K_F auf, wobei die Abschnitte 4.5 und 4.6 die zur Bestimmung dieser Kostenanteile eingesetzten Vorgehensweisen erläutern.

Ein Monte-Carlo-Verfahren gibt Erwartungswerte und Konfidenzintervalle für Materialkosten der Komponenten an, wobei eine Datenbank des europäischen statistischen Amtes EUROSTAT als Quelle von Wert- und Mengendaten der enthaltenen Rohstoffe dient. Diese neuartige Vorgehensweise bietet die Vorteile, makroökonomisch (und damit firmenunabhängig), realitätsnah sowie zudem objektiv zu sein. Das Prinzip ist nicht Brennstoffzellen-spezifisch und kann auch auf andere technische Untersuchungsobjekte ausgedehnt werden.

Mit den Fertigungskosten beschäftigt sich Abschnitt 4.6. Für das Primärziel der Analyse von Bipolarplatten-, Membran- und Katalysatorherstellung bietet sich ein Vorgehen gemäß Kostenstudien für den verfahrenstechnischen Anlagenbau an, da es sich um kontinuierlich gefertigte industrielle Zwischenprodukte handelt. Der Kapitalbedarf einer Produktionsanlage errechnet sich auf der Basis von Verfahrensfließbild, geforderter Kapazität und Betriebsbedingungen. Diese Kapitalkosten bilden die Basis für die Beurteilung von Fertigungskosten der Anlage.

Kapitel 5 und 6 wenden das Modell auf die Produktion von Bipolarplatten und Membranen an. Anhang 8.11 stellt ergänzende Betrachtungen zu den Mindestkosten von Edelmetall-Katalysatoren an, die ergänzend zu Vergleichszwecken dienen.

5 Analyse von Composit-Bipolarplatten

Nach der Entwicklung eines geometrischen Stackmodells und der Beschreibung der notwendigen Methoden für die Analyse von Material- und Fertigungskosten der Bauteile ist nun die Anwendung auf aussichtsreiche Technologien Gegenstand der Kapitel 5 und 6. Für Bipolarplatten erscheinen bisher drei wesentliche Optionen als technisch sinnvoll, die in Abschnitt 2.1 bereits beschrieben worden sind :

- ♦ Ein Spritzprägeprozess vollzieht die Formgebung von Platten aus einem Compound mit duroplastischem Harz und einer Grafitmischung unterschiedlicher Korngrößen.
- ♦ Zwei Folien aus porösem, expandiertem Naturgrafit werden mit einer gasdichten Zwischenlage verpresst, wobei zusätzlich profilierte Strömungsfelder eingepreßt werden.
- ♦ Dünne Metallbleche werden ausgestanzt und durch Prägen profiliert. Dann erfolgt eine Oberflächenbehandlung als Korrosionsschutz und zur Verringerung des elektrischen Übergangswiderstandes an der Oberfläche.

5.1 Klassifikation möglicher Abhängigkeiten

Herstellkosten von Bipolarplatten lassen sich in der Praxis durch eine Vielzahl von variierbaren Parametern beeinflussen. Beginnend mit einer Auswahl für Design der Platte und zu verwendende Materialien ergeben sich daraus gleichzeitig Konsequenzen für die entsprechende Fertigung und das Verhalten des Bauteils im Betrieb. Eine Übersicht hierzu gibt Bild 5.1 :

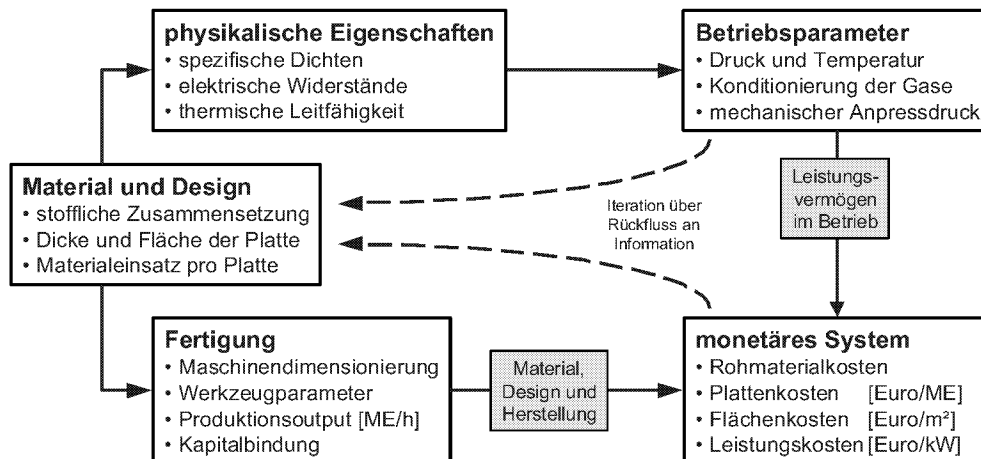


Bild 5.1 : Übersicht von Struktur-Wirkungsbeziehungen bei Bipolarplatten mit Auswahl an Parametern

Der Auslegungsprozess für einen Stack mit vorgegebener elektrischer Bruttoleistung beginnt üblicherweise mit der Festlegung charakteristischer Abmaße. Dies sind Länge und Breite, die die Querschnittsfläche F ergeben, sowie hierin vorgesehene Bereiche für die senkrecht durch

alle Platten verlaufenden Sammelkanäle und entsprechende Dichtungen, wodurch sich die mögliche Aktivfläche A auf einen Wert $\alpha \cdot F$ reduziert (Gleichung 4.8, Seite 52). Je nach Technologie erfolgt eine bestimmte Materialauswahl, woraus Werte für realisierbare Dicken D der Bipolarplatten resultieren.

Wie Bild 5.1 zeigt, haben die Festlegungen von Material und Design unmittelbar Auswirkungen auf physikalische Eigenschaften der zu produzierenden Platte sowie deren Fertigung. Beide Aspekte beeinflussen auf ihre Weise die sich ergebende Kostensituation :

- ◆ Die physikalischen Eigenschaften interagieren mit späteren Betriebsparametern des Stacks und bestimmen so dessen Leistungsvermögen im Betrieb.
- ◆ Der Fertigungsprozess wird auf Material und Design abgestimmt und ermöglicht dann die Bestimmung der Herstellkosten je Platte.

Hiermit geschieht die Anknüpfung an die Modellgleichung 4.10: Material, Design und Fertigung (in Bild 5.1 links unten) entsprechen dem Kenngrößenprodukt $HK/M \cdot \rho \cdot D/\alpha$, während physikalische Eigenschaften und Betriebsparameter (in Bild 5.1 oben) das Leistungsvermögen im Betrieb beeinflussen. Wie in Kapitel 4.4 bereits erwähnt, konzentriert sich die nachfolgende Analyse auf Alternativen für die Fertigung und somit auf den unteren Zweig in Bild 5.1. Angenommene Werte für das Leistungsvermögen im Betrieb dienen abschließend dazu, nach der Berechnung der Stück- und Flächenkosten auf die Konsequenzen für die Leistungskosten (Euro/kW) zu schließen.

5.2 Composit-Platten aus Kunststoff und Grafit

Die neu entwickelte Kennzahlmethodik soll in Bezug auf die Bipolarplatten und -elemente anhand einer der drei eingangs des Kapitels genannten Technologien exemplarisch gezeigt werden. Dies lässt zwar noch keinen Vergleich der Alternativen Metallplatte, Compositplatte und Grafitfolie im Sinn eines Benchmarkings zu, zeigt aber die schrittweise Entstehung der Ergebnisse für die einzelnen Kennzahlen. Für diese Arbeit ist die Spritzgießtechnologie für Platten aus Grafit-Kunststoff-Mischungen ausgewählt worden, weil das prinzipielle Verfahren zum Erreichen gewünschten Produkteigenschaften in PEFC-Stacks einer starken technologischen Weiterentwicklung bedarf. Ob dies auch aus ökonomischer Sicht zielführend ist, soll die weitere Analyse in diesem Kapitel untersuchen.

Um für Vergleiche unterschiedlicher Produktionsverfahren eine gemeinsame Basis zu schaffen, geht die Betrachtung im Weiteren von einem Design mit festen Außenabmessungen (also fester Querschnittsfläche F) aus. Das Referenzdesign eines Stacks der kW-Klasse zeigt Bild 5.2 :

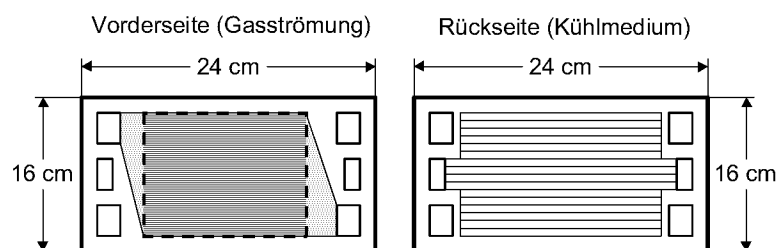


Bild 5.2 : Abmessungen und Strömungen einer Bipolarplatte (gestrichelt: Aktivfläche A)

Länge und Breite führen auf eine Querschnittsfläche F von 384 cm^2 . Die Aktivfläche A umfasst im Basisfall 307 cm^2 ($\alpha = 0,8$). Bild 5.3 zeigt einen möglichen Schnitt durch die Platte entlang ihrer Querachse. Für den Verlauf des Strömungsfeldes braucht zu Beginn keine definitive Geometrie festgelegt zu werden. Relevant sind nur Breiten, Tiefen und Gesamtlängen der Gas- und Kühlkanäle sowie der Dichtungsnuten. Gemeinsam mit der Plattendicke D definieren sie das Volumen des Vollmaterials und damit auch das Einsatzgewicht des Bauteils. Bild 5.3 zeigt zur Veranschaulichung in hellgrauer Farbe auch die zweite Platte, die dann zu einem kompletten kühlbaren Bipolarelement führt. Stellt ein Klebprozess die Verbindung her, so sollten keine Dichtungsnuten auf der Kühlseite mehr erforderlich sein.

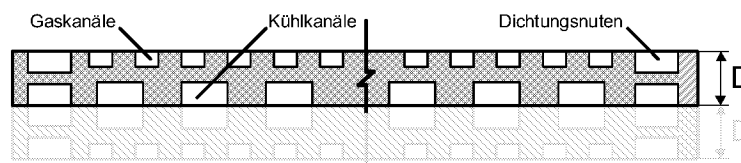


Bild 5.3 : Querschnitt einer Bipolarplatte beziehungsweise eines Bipolarelements

Falls die anoden- und kathodenseitigen Strömungsfelder für die Fluide identisch sind und die Geometrie auf der Kühlseite zudem punktsymmetrisch zum Zentrum der Platte ist, so kann ein Bipolarelement (BPE) aus zwei gleichen Bipolarplatten (BPP) entstehen. Andernfalls sind zwei verschiedene Platten nötig. Bipolarplatten ohne Kühlfunktion bestehen nur aus *einem* Teil und haben entsprechend auf beiden Seiten Strömungsfelder für Gase, da sie sich später direkt zwischen einer Anode und einer Kathode befinden.

Die Ursachen für die recht hohen Mindestwerte der Dicke einer Compositplatte kamen bereits in Kapitel 2.1.2 zur Sprache (Seite 14). Der Basisfall der Rechnungen geht zunächst von 0,6 mm Tiefe für Gas- und Kühlkanäle sowie 0,8 mm Stegbreite aus. Dies führt zu einer Dicke D von 2 mm für eine BPP beziehungsweise 4 mm für ein kühlbares BPE. In der Parameterstudie wird der Effekt reduzierter Dicken untersucht, wobei Minimalwerte von 0,5 mm für Gaskanäle, 0,3 mm für Kühlkanäle und 0,7 mm für Stegbreiten angesetzt wurden. Speziell der letzte Wert stellt jedoch für das mit $24 \times 16 \text{ cm}$ große Plattenformat bereits sehr hohe Anforderungen an den Fertigungsprozess und liegt eventuell bereits nahe der Grenze des technisch Möglichen. Dennoch wären dann Dicken von 3 mm für ein BPE und 1,7 mm für eine BPP erreichbar.

Der Anteil von Grafit in der Kunststoff-Matrix stellt aus mehreren Gründen einen Hauptparameter in der Kostenuntersuchung dar :

- ♦ Die Ziele "einfache Fertigung" und "hohe elektrische Leitfähigkeit" liegen einander diametral gegenüber: Die Produktion der Platten ist mit reinen Kunststoffen am einfachsten, die Leitfähigkeit der Platte ist hingegen für reinen Grafit am besten.
- ♦ Eine konzertierte Entwicklung zueinander passender Kombinationen aus Compositen, Maschinen und Werkzeugen steht noch am Anfang. Aus der Beobachtung der derzeitigen Situation in Industrie und Forschung lässt sich die Lage eines akzeptablen Kompromiss-Wertes für die Zukunft nicht angeben.
- ♦ Die eingesetzte Menge an Grafit hat einen signifikanten Einfluss sowohl auf das Bauteilgewicht als auch auf die Rohmaterialkosten.

Füllgrade bis zu 30 Vol.-% sind technischer Standard. Für das Pulverspritzgießen, bei dem Keramiken mit einem Kunststoffbinder zu Grünlingen gepresst und anschließend gesintert werden, liegt der Anteil fester Partikel bei 60 Vol.-% [17, pp. 646-650]. In der vorliegenden Analyse ist der Grafitanteil zwischen 60 und 90 Vol.-% variiert worden. Je nach Kunststoff entspricht dies verschiedenen Massenanteilen, deren Werte für ideales Mischungsverhalten aus Tabelle 5.1 erkennbar sind. Außerdem ergeben sich für das binäre Gemisch Kunststoff-Grafit je nach Volumenanteil unterschiedliche Mischungsdichten (Tabelle 5.2). Mit ihnen lässt sich das Plattengewicht für ein aus der geometrischen Auslegung bekanntes Formteilvervolumen direkt berechnen.

Tabelle 5.1 : Massenanteile des Grafits bei verschiedenen Volumenanteilen (in %)

Volumenanteil Grafit (Dichte 2,2 g/cm ³)	60 %	65 %	70 %	75 %	80 %	85 %	90 %
Massenanteil Grafit in Phenolharz (1,4)	70,2	74,5	78,6	82,5	86,3	89,9	93,4
Massenanteil Grafit in Epoxidharz (2,1)	61,1	66,1	71,0	75,9	80,7	85,6	90,4
Massenanteil Grafit in Polyprop. (0,9)	78,6	81,9	85,1	88,0	90,7	93,3	95,7

Tabelle 5.2 : spezifische Dichten idealer binärer Gemische aus Grafit und Kunststoff (in g/cm³)

Volumenanteil Grafit (Dichte 2,2 g/cm ³)	60 %	65 %	70 %	75 %	80 %	85 %	90 %
Mischung mit Phenolharz (1,4 g/cm ³)	1,88	1,92	1,96	2,00	2,04	2,08	2,12
Mischung mit Epoxidharz (2,1 g/cm ³)	2,16	2,17	2,17	2,18	2,18	2,19	2,19
Mischung mit Polypropylen (0,9 g/cm ³)	1,68	1,75	1,81	1,88	1,94	2,01	2,07

Die Bindematrix muss aus einem Kunststoff bestehen, der der thermischen Belastung im Betrieb der Brennstoffzelle schadlos standhält. Daher kommen zunächst duroplastische Materialien zum Einsatz, zumal sie im Spritzprägeprozess (auch "Spritzpressen") leichter zu verarbeiten sind [17, p. 417-426]. Der Kunststoff tritt als vorgewärmte, noch härtbare Formmasse in das Werkzeug ein und reagiert dann in der heißen Kavität chemisch aus. Dies erfordert entsprechend angepasste Verarbeitungsdaten: Für Phenolharze (PF) liegen die Werkzeugtemperaturen bei 155 - 190 °C, für Epoxidharze bei 180 - 220 °C. In der Extrudiereinheit ist das Compound nur auf etwa 50 - 85 °C temperiert [17, p. 176].

Von der Automobilindustrie werden 120 °C als Betriebstemperatur einer Brennstoffzelle angestrebt, was für thermoplastische Binder wie Polypropylen (PP) in Bipolarplatten bereits einer Obergrenze gleichkommt [17, p. 76]. Dennoch ist ihre Verwendung aufgrund der geringen spezifischen Dichte interessant. Hinzu kommt, dass Thermoplaste ohne chemische Reaktion verfestigen. Es genügt die Injektion der heißen Masse in eine Kavität, deren Temperatur unter der Glasübergangstemperatur des Kunststoffs liegt. Speziell bei dünnen Wandstärken tritt eine schnelle Erstarrung ein, was die Herstellung vieler Platten innerhalb kurzer Zykluszeiten begünstigt. Ein wichtiger Materialvorteil ist seine Rezyklierbarkeit, da Ausschuss und entstehende Angusskanäle beim Füllen der Form hier wieder verarbeitet werden können. Bei Duroplasten stellen diese Anteile Verluste dar.

Abschließend zeigen die folgenden Tabellen die aus dem beschriebenen Design resultierenden Plattengewichte bei 2 mm und 1,5 mm Dicke (entsprechendes Formteilvervolumen 55,0 beziehungsweise 41,9 cm³) als Funktion des Grafitanteils.

Tabelle 5.3 : resultierende Plattengewichte [g] bei 2 mm Dicke (55 cm³ Formvolumen)

Volumenanteil Grafit	60 %	65 %	70 %	75 %	80 %	85 %	90 %
Grafit und Phenolharz	103	106	108	110	112	114	117
Grafit und Epoxidharz	119	119	119	120	120	120	120
Grafit und Polypropylen	92,4	96,3	99,6	103	107	111	114

Tabelle 5.4 : resultierende Plattengewichte [g] bei 1,5 mm Dicke (41,9 cm³ Formvolumen)

Volumenanteil Grafit	60 %	65 %	70 %	75 %	80 %	85 %	90 %
Grafit und Phenolharz	78,8	80,4	82,1	83,8	85,5	87,1	88,8
Grafit und Epoxidharz	90,5	90,9	90,9	91,3	91,3	91,7	91,7
Grafit und Polypropylen	70,4	73,3	75,8	78,8	81,3	84,2	86,7

Tabelle 8.4 und Tabelle 8.5 im Anhang zeigen entsprechende leistungsbezogene Gewichte, die sich hieraus ergeben (Seite 167). Sie liegen für Harze zwischen 1,1 und 1,6 kg/kW_{el} und für PP zwischen 0,9 und 1,5 - sofern man eine Leistung je Zelle von etwa 150 Watt unterstellt.

5.3 Auswahl der Maschine

Die Maschinenauswahl wird von zahlreichen Aspekten beeinflusst [17, p. 662]. Eine zentrale Auslegungsgröße zur Bestimmung der erforderlichen Maschinengröße ist zunächst jedoch die von ihr aufzubringende Schließkraft. Diese hat auch nach wie vor einen dominierenden Einfluss auf den Maschinenpreis, zumal weitere Auslegungsdaten an ihr ausgerichtet werden [17, pp. 864-869]. Es gilt zunächst

$$F_S \geq 1,1 \cdot F_A = 1,1 \cdot n_{Kav} \cdot \int_{A_{proj}} p_i dA_{proj} = 1,1 \cdot n_{Kav} \cdot \bar{p}_i \cdot A_{proj} \quad (\text{Gl. 5.1})$$

Die Schließkraft F_S sollte mindestens 10 % über der Auftreibkraft F_A liegen, die sich während des Füllvorgangs entwickelt [17, p. 312]. F_A entsteht aus dem Werkzeuginnendruck p_i und der aus der Geometrie ersichtlichen Projektionsfläche des Formteils auf der Trennebene des Werkzeugs. Üblicherweise werden je nach Material mittlere Werkzeuginnendrucke angenommen, die dann mit der projizierten Fläche multipliziert werden. Sind mehrere Kavitäten nebeneinander enthalten, so geht deren Anzahl n_{Kav} als Faktor mit ein. Genaue Ausführungen zu den Aspekten bei der Bestimmung von n_{Kav} siehe [17, p. 1108-1111]. Die Berechnungen dieses Abschnitts gehen von einem doppelflutigen Werkzeug aus ($n_{Kav} = 2$).

Eine Berechnung des sich ausbildenden mittleren Innendrucks ist an dieser Stelle nicht möglich, da keine rheologischen Daten der betrachteten Grafit-Composit-Mischungen zur Verfügung stehen. Ansonsten könnte aus benötigter Fließlänge und im Design verbleibender Stegbreite (siehe Bild 2.4, Seite 14) auf den nötigen Einspritzdruck zur vollständigen Füllung der Form geschlossen werden [17, pp. 149, 702-705]. Tabelle 5.5 zeigt Bereiche erforderlicher Einspritzdrücke für die ausgewählten Kunststoffe.

Tabelle 5.5 : benötigte Einspritzdrücke in bar [17, p. 704]

Kunststoff	leicht fließend	mittel fließend	schwer fließend	Dünnwandtechnik
Polypropylen (PP)	800 - 1.000	1.000 - 1.300	1.300 - 1.500	1.800
Duroplaste	1.000 - 1.400	1.400 - 1.750	1.750 - 2.300	> 2.300

Durch den hohen Füllstoffanteil verschlechtert sich das Fließverhalten der Massen. Im vorliegenden Fall ist daher einerseits mit schwer fließenden Massen zu rechnen; zudem erhöht sich die Fertigungskomplexität durch die angestrebten dünnen Wandstärken. Beide Effekte führen zu höheren Einspritz- und damit auch Werkzeuginnendrücken.

Für die Auslegung ist aus den genannten Gründen mit Innendruckwerten nahe dem technisch üblichen Maximum zu rechnen. Bedingt durch Druckverluste in Düse und Anguss sowie partieller Erstarrung sind gemittelte Werkzeuginnendrücke deutlich niedriger. In Ermangelung genauer rheologischer Daten ist nach Rücksprache mit verschiedenen Entwicklern ein Referenzwert von 1000 bar angesetzt worden. Eine Variation untersucht auch Konsequenzen von 1200 bar mittlerem Forminnendruck.

Aussparungen der Sammelkanäle (Bild 5.2) würden beim Füllen der Form zu Bindenähten führen^{*}. Da deren Bildung für die mechanische Stabilität kritisch ist, stellen lediglich Nuten die Umrandungen der Sammelkanäle dar, aus denen nach der Formgebung das Material ausgestanzt wird. Für die Projektionsfläche bedeutet dies, dass der mittlere Werkzeuginnendruck auf die komplette Querschnittsfläche F einwirkt. Tabelle 5.6 gibt die benötigten Schließkräfte an. Bild 5.4 zeigt eine Auswahl entsprechender Maschinen verschiedener Hersteller.

Tabelle 5.6 : erforderliche Schließkräfte der Maschinen (nach Gleichung 5.1)

384 cm ² Fläche	1.000 bar Innendruck	1.200 bar Innendruck
bei 1 Kavität :	4.225 kN	5.070 kN
bei 2 Kavitäten :	8.450 kN	10.140 kN

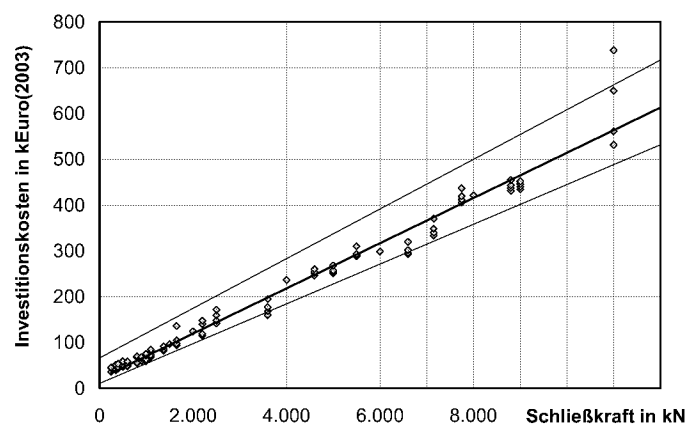


Bild 5.4 : Investitionskosten von Spritzgussmaschinen als Funktion ihrer Schließkraft [119]

^{*} Bindenähte entstehen dort, wo zwei Fließfronten nach Umströmen eines Kerns zusammenlaufen

Mit der Information aus Bild 5.4 lassen sich den in Tabelle 5.6 berechneten Schließkräften auch Intervalle für die zu erwartenden Investitionskosten angeben.

Tabelle 5.7 : zugehörige Investkosten von Spritzmaschinen gemäß Tabelle 5.6

384 cm ² Fläche	1.000 bar Innendruck	1.200 bar Innendruck	
bei 1 Kavität	190...230...260	230...270...330	kEuro(2003)
bei 2 Kavitäten	380...440...520	460...520...610	kEuro(2003)

Mit der Auswahl einer Maschine geeigneter Schließkraft kommt es neben der Investition auch zur Festlegung des Platzbedarfs sowie der installierten elektrischen Leistung für Antriebe und Heizungen. Da sie ebenfalls kostenrelevant sind, enthält Anhang 8.7 hierzu die Bild 5.4 entsprechenden Maschinendaten.

5.4 Kosten des Gießwerkzeugs

Je nach Geometrie und geforderten Toleranzmaßen der über den Prozess hergestellten Bauteile entstehen bei der Fertigung der Spritzwerkzeuge unterschiedlich hohe Kosten. Die detaillierte Auslegung für das gewählte Design der Bipolarplatten ist in Anhang 8.7 enthalten. Aus ihr ergeben sich für eine beziehungsweise zwei Kavitäten im Werkzeug Investitionskosten K_W , wie sie die nachstehende Tabelle 5.8 zeigt. Sie liegen bei gut 30 beziehungsweise knapp 50 kEuro. Infolge der hohen Abrasionswirkung der Partikel ist mit einer relativ geringen Standzeit der Kavitäten zu rechnen, die zwischen einigen Monaten und einem Jahr liegt.

Tabelle 5.8 : zu erwartende Gesamtinvestition in das Formwerkzeug

	$K_{W,B}$ Euro(2001)	$K_{W,K}$ Euro(2001)	$2 \cdot K_{W,K}$ Euro(2001)	K_W Euro(2001)
bei 1 Kavität	7.560	11.560	23.120	30.680
bei 2 Kavitäten	11.570	18.780	37.560	49.130

5.5 Materialkosten

Für das auf Seite 74 beschriebene Design ergeben sich als Funktion der Plattendicke sowie der Mischungsverhältnisse unterschiedliche Materialkosten je produzierter Platte. Sie enthalten auch Material, das durch den Ausschuss verloren geht. Zudem hängen die Materialausgaben auch von den Preisspannen für Grafit und Kunststoff ab, die aus Bild 5.5 ersichtlich sind und aus einer Analyse entsprechender EUROSTAT-Daten hervorgehen. Die zugehörigen Summenfunktionen der einzelnen Materialien sind in detaillierter Form in Anhang 8.7 enthalten.

Für Composit-Mischungen mit einem volumetrischen Anteil von 60 % Grafit ergeben sich nach einer Monte-Carlo-Simulation mit 30.000 Zufallsexperimenten die darunter gezeigten Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Zwei weitere Diagramme für 70 und 80 Vol.-% Grafit enthält ebenfalls der Anhang 8.7.

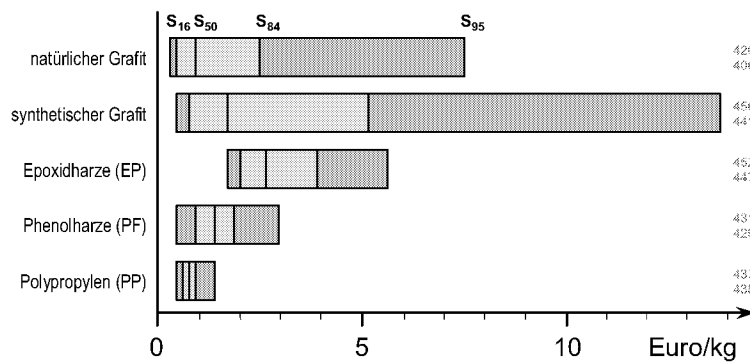


Bild 5.5 : Preise für Grafit und Kunststoffe (Quelle EUROPROMS, zur Art der Darstellung siehe Bild 4.9) *

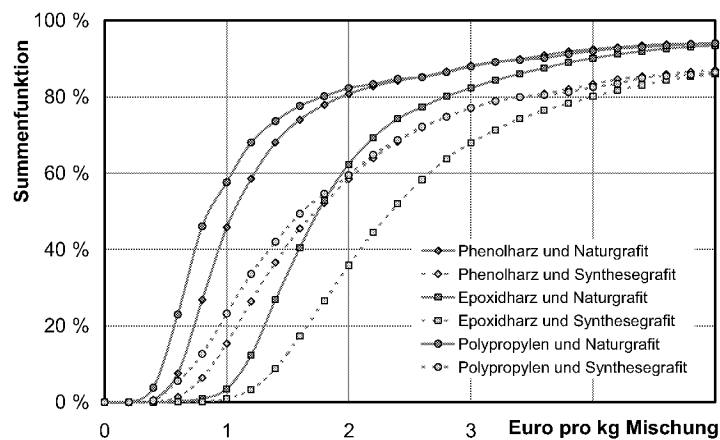


Bild 5.6 : Kosten von Mischungen mit 60 Vol.-% Grafit (EUROSTAT-Daten, MC-Analyse)

Der hohe Medianwert (S_{50}) von Epoxidharz sowie die ebenfalls hohe Grenze S_{16} führen dazu, dass ihre Beimischung zum Grafit die Composite merklich verteuert. Für Spritzprägeprozesse mit Duroplasten sind Phenolharze mit 50 % geringeren Kosten deutlich preiswerter. Der Einsatz eines Thermoplasts wie Polypropylen (PP) wäre zwar am günstigsten, ist jedoch mit verstärkten fertigungstechnischen Schwierigkeiten verbunden.

Auf Basis der EUROSTAT-Daten betragen die Compositkosten mit über 84 %iger Wahrscheinlichkeit weniger als 5 Euro je kg. Die Schwelle S_{95} liegt bei Naturgrafit unter 7 Euro, bei Synthesegrafit unter 13 Euro je kg Mischung.

Die Materialkosten je Platte hängen zusätzlich von den in Tabelle 5.2 bereits angeführten spezifischen Dichten der Mischung ab. Bei gleichem Design entstehen somit je nach Compound-Zusammensetzung unterschiedliche Plattengewichte, wie die Tabellen auf Seite 77 schon gezeigt haben.

* Angaben am Ende informieren oben über die Gesamtzahl verfügbarer Datenpunkte in der Datenbank und unten über die Zahl der verwendeten Datenpunkte nach der Konsistenzprüfung (Anhang 8.6)

Der Brutto-Materialaufwand liegt bei Duroplasten höher, da das Material anders als ein Thermoplast nicht recyclingfähig ist. Der Angusskanal vor der Kavität besitzt ein Volumen von zirka 15 cm^3 , entsteht bei jeder Füllung der Form und kann nicht wieder verwendet werden. Auch die Ausbrüche für die Manifold-Durchgänge sowie die zu erwartenden 10 % Ausschuss der Qualitätskontrolle müssen für duroplastische Mischungen zum Volumen der Kavität hinzugerechnet werden. Die Rechnung für Polypropylen enthält keinerlei Aufschläge, weil entstehender Ausschuss bei Thermoplasten problemlos erneut extrudierbar ist. Anhang 8.7 enthält zwei Tabellen, die den Brutto-Materialbedarf für Platten mit 2 mm und 1,5 mm Dicke als Funktion der Compound-Zusammensetzung zeigen. Der Übersichtlichkeit halber zeigen die folgenden Abbildungen nur die daraus resultierenden Materialkosten je Platte.

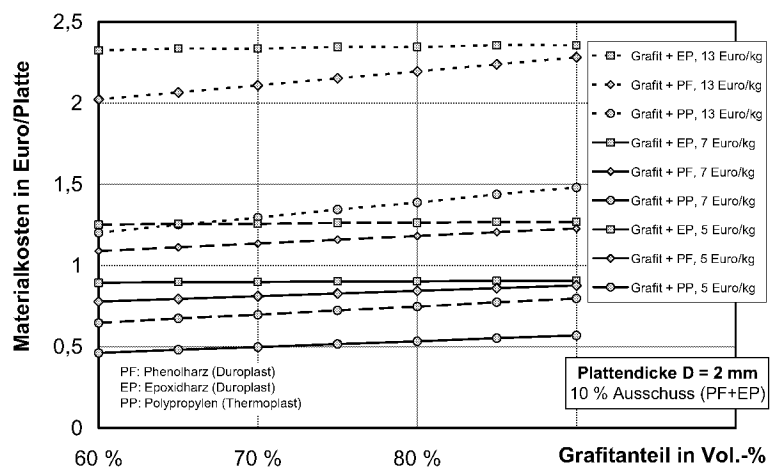


Bild 5.7 : Materialaufwand, abhängig von Zusammensetzung und Preisen je kg Mischung (D = 2 mm)

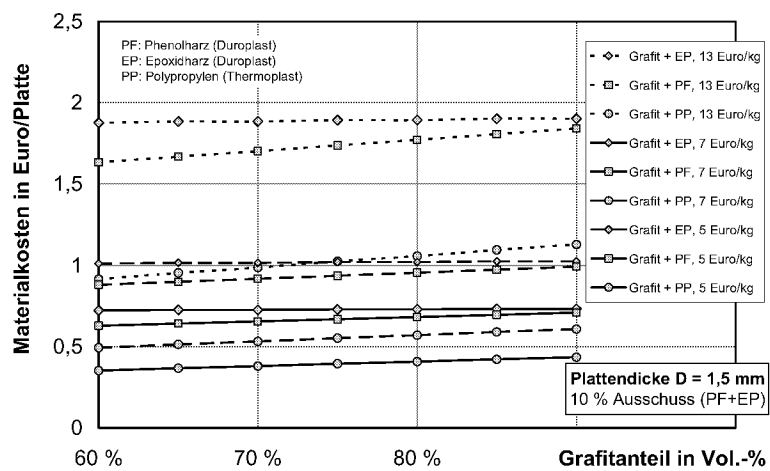


Bild 5.8 : Materialaufwand, abhängig von Zusammensetzung und Preisen je kg Mischung (D = 1,5 mm)

Wie eben gesagt, liegen alle Materialmischungen bei 5 Euro je kg Compound bereits über der Schwelle S_{84} . Dies ist auch für höhere Grafitgehalte der Fall (Bild 8.5, Bild 8.6, Seite 165), sodass sich dieser Zahlenwert vereinfachend für alle Mischungsarten ansetzen lässt. Eine weitere Betrachtung der Daten ergibt ferner

- ♦ $S_{95} < 7$ Euro je kg Compound für alle Kunststoffe, gemischt mit Naturgrafit
- ♦ $S_{95} < 13$ Euro je kg Compound für alle Kunststoffe, gemischt mit Synthesegrafit

Somit liegt der Preis für die Mischungen mit 95 %iger Wahrscheinlichkeit unter diesen genannten Werten. Zu sehen ist hiermit in Bild 5.7 und Bild 5.8, dass die Materialkosten folglich bei 2 mm dicken Platten zwischen knapp 0,5 und 2,4 Euro pro Stück liegen (1,5 mm: 0,4 bis 1,9).

Klare Kostenvorteile zwischen 30 und 50 % kann der Einsatz eines direkt recyclingfähigen Thermoplast-Compositen bringen, dessen Einsatz aber zumindest bei heutigem Stand der Technik noch nicht beherrscht wird. Bei Mischungen auf Duroplastbasis empfiehlt sich speziell bei niedrigen Füllgraden Phenolharz angesichts seiner geringeren Kosten relativ zu Epoxidharz. Der Vorteil wird jedoch mit zunehmendem Grafitanteil geringer. In naher Zukunft sind bei Mischungen aus Grafit und PF (mit Preisen von etwa 5 Euro je kg Compound) Materialkosten von 0,78 bis 0,88 Euro je 2-mm-Platte zu erwarten (1,5 mm: 0,63 bis 0,71 Euro).

Für Bipolarelemente, die aus zwei Einzelplatten bestehen, verdoppeln sich die Kostenanteile entsprechend*. In einer kurzen Vorüberlegung führt dies unter der Annahme einer Aktivfläche A von 300 cm^2 und einer dort realisierten Leistungsdichte von $0,5 \text{ W/cm}^2$ auf Materialkosten für das Bipolarelement zwischen 8,4 und 11,7 Euro pro kW_{el} .

5.6 Fertigungskosten

In Kapitel 4.4 (Seite 54) ergab sich gemäß Definition bereits folgender Ausdruck :

$$\text{Fertigungskosten } K_F = \sum_{\text{Prozesse } j} K_{F,j} = \sum_{\text{Prozesse } j} (K_P + K_E + K_K + K_Z + K_I)_j \quad (\text{Gl. 4.13})$$

Da es sich beim Spritzgießen oder -prägen um einen 1-Schritt-Prozess handelt, gilt zunächst $j = 1$. Zu bestimmen bleiben nachfolgend die zugehörigen Kapitalkosten K_K für Maschine und Werkzeug (inklusive kalkulatorischer Zinsen K_Z), der finanzielle Personalaufwand K_P sowie die Energiekosten K_E , die aus den Stromkosten für Antriebe und Heizungen hervorgehen.

Mit Bezug auf Gleichung 4.16 (Seite 54) besteht das naheliegende Ziel in der Umlage der oben genannten Kostenarten auf die produzierten Platten (Stückkosten der Fertigung). Indirekte Kosten K_I erfahren erst in Abschnitt 5.7 Berücksichtigung.

Die Analyse betrachtet hierbei zunächst einen Referenzbetrieb unter den in Tabelle 5.9 aufgeführten Bedingungen (Basisfall). Parametervariationen untersuchen im Anschluss einzelne Änderungen in Bezug auf ihre Sensitivität.

* Der für das Fügen nötige Klebstoff sei an dieser Stelle vernachlässigbar.

Tabelle 5.9 : BPP-Produktion - Konstanten und zentrale Betriebsparameter im Basisfall

Parameter	Wert	Variation
Platzkosten	100 Euro / m ² · a	-
Stromkosten	0,1 Euro / kWh	-
Kalkulatorischer Zinssatz	8 % p.a.	-
Personalbedarf	0,25 Personen / Schicht	-
Betriebszeit	2.000 h / Schicht · a	-
Abschreibung Maschine / Basis	10 a	-
Lebensdauer von Kavitäten	150.000 Zyklen	-
Zahl der Schichten	3	1 ... 2 (Bild 5.9)
Mittlerer Forminnendruck	1.000 bar	1.200 bar (Bild 5.9)
Auslastungsgrad	80 %	70 ... 90 % (Bild 5.11)
Zykluszeit	90 s	60 ... 120 s (Bild 5.11)
Ausschuss	10 % im Produkt	5 ... 20 % (Bild 5.11)

Der kontinuierliche Betrieb lässt sich mit einem geringen Netto-Personalbedarf von 0,25 Personen durchführen. Die Betriebszeit je Schicht wurde mit 250 Tagen à 8 h = 2.000 h p.a. veranschlagt.

Die Absetzung für Abnutzung (AfA) der Maschine ist auf 10 Jahre fixiert. Das externe Rechnungswesen sieht für Gießwerkzeuge eine Zeit von 4 Jahren vor. Allerdings weist eine Werkzeugbasis in der Praxis deutlich längere Haltbarkeiten von 10, 15 oder noch mehr Jahren auf. Deshalb geht sie im vorliegenden Fall analog zur Maschine mit einer kalkulatorischen Abschreibung von 10 Jahren in die Kostenrechnung ein.

Für die Kavitäten ist hingegen infolge Verschleiß und Präzisionsverlust mit deutlich geringeren Nutzungszeiträumen zu rechnen. Entsprechend anzusetzende Zeiträume folgen aus der Lebensdauer in Zyklen, der Zykluszeit sowie der Anzahl an Schichten, während deren produziert wird. Das Schichtmodell wirkt sich darüber hinaus noch auf weitere Faktoren aus, wie aus Tabelle 5.10 hervorgeht :

Tabelle 5.10 : BPP-Produktion - vom Schichtmodell abhängige Betriebsparameter

Parameter	1-Schicht	2-Schicht	3-Schicht
AfA Kavitäten (UV), 90 s Zyklus	~ 2,4 a	~ 1,2 a	~ 0,8 a
Maschinenstunden	2.000 h	4.000 h	6.000 h
Lohnkosten (brutto)	60 kEuro / PJ	60 kEuro / PJ	75 kEuro / PJ
Instandhaltung (% der Investkosten)	3 % p.a.	4 % p.a.	5 % p.a.

Zur Potenzialabschätzung geht die Rechnung im Basisfall von einer 3-Schicht-Produktion aus. Für eine solche durchgehende Produktion werden in der Praxis vier Schichten benötigt (3 Produktion + 1 Urlaub oder Krankheit), weswegen die Rechnung dann in Summe ein Personenjahr (PJ) ansetzt. Bei 3-Schicht-Betrieb beträgt der finanzielle Bruttoaufwand ferner infolge Zulagen statt 60 etwa 75 kEuro (Stand 2003). Nicht zuletzt steigen auch Aufwendungen für die Instandhaltung der Anlage mit einer zunehmenden Produktionsintensität an.

Um noch eine Auftragsflexibilität nach oben zu gewährleisten, liegt der Auslastungsgrad im Basisfall bei 80 %. Als Wert für die Dauer eines gesamten Zyklus erscheint eine Zeit von 90 Sekunden technisch machbar. Bereits die Härtezeit von Duroplasten beträgt mindestens 15 Sekunden [17, p. 176]. Mit Thermoplasten sind prinzipiell bei geringeren Plattendicken über eine schnelle Abkühlung auch kürzere Zyklen realisierbar. Bedarf es allerdings hoher Einspritzdrücke, so erfolgt über das Compound wiederum ein hoher Energieeintrag in die Form, der über einen längeren Zeitraum hinweg aus dem Werkzeug abgeführt werden muss.

In der Praxis entstehen meist Ausschussraten von ungefähr 10 % im Produkt. Während der Anfangsphase der Kommerzialisierung könnten diese jedoch auch bei 20 % liegen. Ein erreichbares Ziel ist eine Reduktion auf 5 % bei eingefahrener Serienproduktion.

Produktionskosten im Basisfall bei 1-, 2- und 3-Schichtbetrieb

Mit einer Zykluszeit von 90 Sekunden und 2 Kavitäten produziert die Anlage im Basisfall jährlich 115-, 230- oder 345-Tausend Platten; je nach Zahl der Schichten. Bei nur einer Kavität halbieren sich die Mengen entsprechend.

Bild 5.9 zeigt die Fertigungskosten je Platte für Prozesse mit einer beziehungsweise zwei Kavitäten in den drei Schichtsystemen. In allen Fällen verringert der Übergang von der 1-Teil- auf die 2-Teil-Produktion je Zyklus die stückbezogenen Kosten erheblich, und zwar um knapp 20 bis 30 %. Dabei fallen sowohl Werkzeug- als auch Maschinenkosten, wenn auch nicht im gleichen Maß.

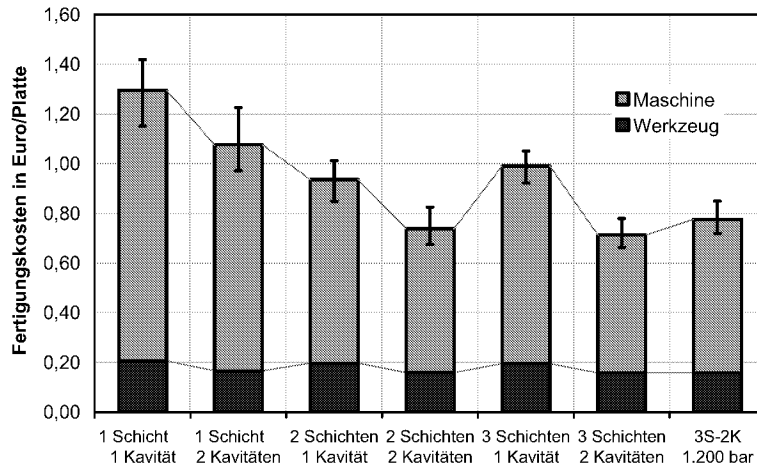


Bild 5.9 : BPP-Produktion - Fertigungskosten je Platte, mit Annahmen aus Tabelle 5.9 und 5.10

Der Übergang vom 1- auf das 2-Schicht-System ist (bei gleicher Kavitätenzahl) mit Einsparungen um 30 % verbunden, allerdings können durch einen Wechsel von 2- auf 3-Schichtbetrieb bei 2 Kavitäten nur noch 3 % eingespart werden. Bei nur einer Kavität würde dieser Wechsel gar zu einer Erhöhung der Fertigungskosten um 6 % führen. Dies ist insbesondere eine unmittelbare Folge der stark zunehmenden Personalkosten, die sich von 30 auf 75 kEuro mehr als

verdoppeln. Vor diesem Hintergrund ist auch verständlich, dass ein Wechsel vom 2-Schicht-Modus mit 2 Kavitäten auf einen 3-Schicht-Modus mit einer Kavität gar mit Mehrkosten von fast 35 % einhergeht. Abschließend würde ein höherer mittlerer Forminnendruck von 1.200 bar, der eventuell für große Flächen benötigt wird, die Fertigungskosten je Platte um gut 11 % erhöhen, wie die Säule rechts außen zeigt.

Die Grafik enthält zudem Konfidenzintervalle für die Maschinenkosten. Für die unteren Grenzen sind Minimalwerte in Anschaffungspreis, installierter Leistung und Platzbedarf unterstellt worden (Bild 5.4, Bild 8.1 und Bild 8.2) - für die oberen Grenzen entsprechende Maximalwerte. Die Schwankungen liegen meist zwischen -13 und +16 %.

In den weiteren Betrachtungen soll ausschließlich der 3-Schicht-Betrieb mit 2 Kavitäten weiter analysiert werden, da er zum geringsten Erwartungswert für die Fertigungskosten pro Compositplatte führt. Der Effekt eines gegebenenfalls verringerten Ausschusses bei kontinuierlicher 3-Schicht-Produktion, der sich aus einer viel geringeren Zahl von An- und Abfahrvorgängen ergäbe, ist nicht im Detail untersucht worden. Aber auch dieser Aspekt spricht klar für den kontinuierlichen Betrieb der Plattenspritzanlage.

Die Anteile der einzelnen Kostenarten im Basisfall (3 Schichten, 2 Kavitäten, 1.000 bar Innendruck) schlüsselt Bild 5.10 auf. Fast ein Drittel der Fertigungskosten entfällt auf die Personalressourcen. Ihr Bedarf sollte realistisch angesetzt werden, lässt sich jedoch fast nicht beeinflussen. Der zu erwartende Verschleiß der Kavitäten führt zu kurzen Nutzungsintervallen von weniger als 10 Monaten und demnach zu hohen Abschreibungen, die ein Fünftel der Produktionskosten ausmachen. Dies lässt dem Ziel einer hohen Lebensdauer der Gießeinsätze beachtliche Bedeutung zukommen. Abschreibungen auf die Anlage selbst stellen mit 18 % den drittgrößten Anteil. Energie- und Wartungskosten sowie kalkulatorische Zinsen bleiben mit jeweils rund 10 % vergleichsweise gering.

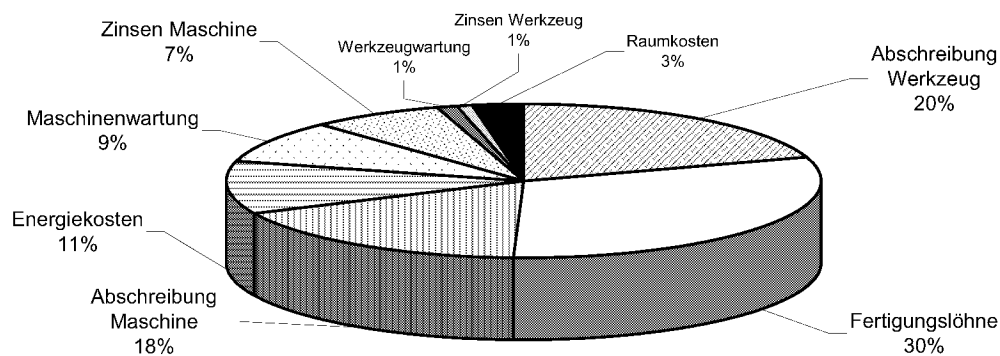


Bild 5.10 : Anteile der einzelnen Kostenarten an den Fertigungskosten im Basisfall

Die Auswirkungen der in Tabelle 5.9 erwähnten Änderungen der Parameter Zykluszeit, Maschinenauslastung und Ausschussrate zeigt die nächste Grafik, bei der dem Basisfall die Varianten mit 90-Sekunden-Zyklus, 80 % Auslastung und 10 % Ausschuss gegenübergestellt sind.

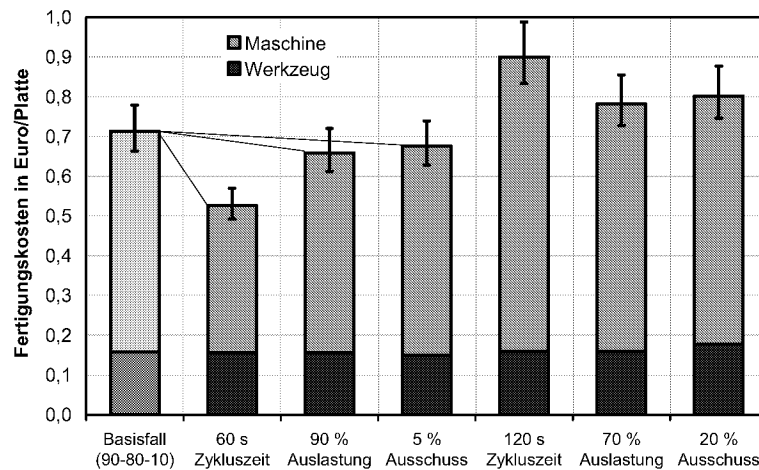


Bild 5.11 : Variation der Einflussgrößen Zykluszeit, Auslastungsgrad und Ausschuss

Die Auswirkungen veränderter Zykluszeiten sind am deutlichsten, da diese sich unmittelbar in höheren oder geringeren produzierbaren Stückzahlen niederschlagen. Bei identischen Kosten für Maschine und Werkzeug würde ein doppelt so schneller Prozess in erster Näherung auf halbierte Fertigungsstückkosten führen, sofern verkürzte Abschreibungszeiträume zunächst außer Acht blieben (doppelt so viele Produktzyklen in gleicher Zeit).

Beträgt die Dauer eines Zyklus beispielsweise durch Einsatz eines schnell erstarrenden Thermoplasten statt 90 nur 60 Sekunden, so verringern sich die Produktionskosten je Stück um 26 %. Umgekehrt führt ein Anstieg auf 120 Sekunden zu einer Kostenerhöhung um 26 %.

Die Abhängigkeit der Kosten je Stück vom Auslastungsgrad der Anlage ist prinzipiell identisch. Allerdings ist die zu erwartende Änderung geringer als bei den Zykluszeiten. Angestrebt werden etwa 80 %. Auch ein hoher Auslastungsgrad von 90 % läge nur ein Achtel über dem Betriebspunkt und würde die Produktionsstückkosten um etwa 10 % reduzieren.

Bezogen auf die Ausschussrate sind die Fertigungskosten je Stück nur mäßig sensitiv. Die Variation zwischen 5 und 20 % verändert die Kosten der Produktion um -5 % beziehungsweise +13 %. Hieraus lässt sich zunächst der Schluss ziehen, dass es lohnend ist, die Zykluszeit notfalls auch zu Lasten des Ausschusses zu verkürzen. Bei Duroplasten ist in der Gesamtbeurteilung aber wegen des steigenden Materialverlusts Vorsicht geboten. Die Recyclingfähigkeit eines Thermoplasten erlaubt hier ein breites Betriebsfenster, was die Ausschussquote angeht.

5.7 Herstellkosten und Beitrag zu möglichen PEFC-Stackkosten

Abschließend kommt es nun zur gemeinsamen Betrachtung von Material- und Fertigungskosten sowie deren massen- und leistungsspezifischen Darstellung. Die Grundlage hierfür bilden die Materialkosten je Platte (Bild 5.7 und Bild 5.8) und die Produktionskosten je Platte (Bild 5.9 und Bild 5.11). Es sei eine Fertigung im eben beschriebenen Basisfall unterstellt: 3-Schicht-Produktion bei 2 Kavitäten, 1.000 bar Forminnendruck, 90-s-Zyklus, 80 % Auslastung sowie 10 % Ausschuss. Das Compound enthält dabei einen Grafitanteil von 80 Vol.-%.

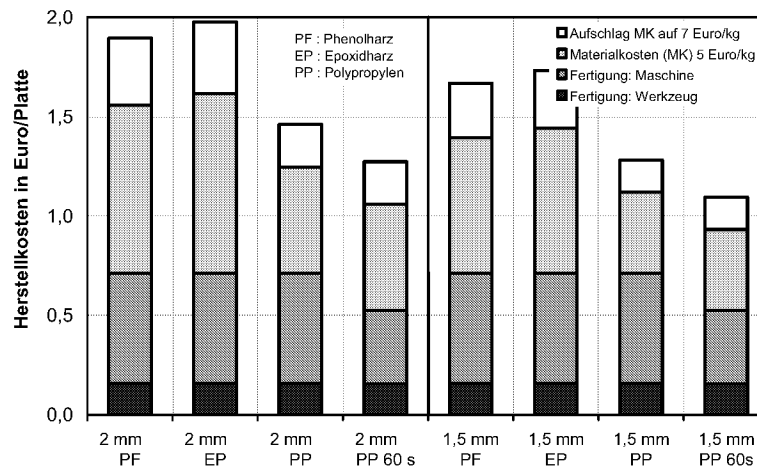


Bild 5.12 : Herstellkosten von BPP aus Grafit-Kunststoff-Compounds, je Stück

Aus Bild 5.12 lässt sich ablesen, dass die Materialkosten bereits mit 5 Euro/kg einen beträchtlichen Teil der Herstellkosten ausmachen (bei Duroplast-Compositen 50-55 %, bei PP-Compositen 35-50 %). Kosten für das Compound haben demnach maßgeblichen Einfluss, weswegen sie in der Abbildung oben gestaffelt dargestellt sind: Steht die Grafit-Kunststoff-Mischung zu einem Preis von unter 5 Euro zur Verfügung, so liegen die Plattenkosten unter dem Wert, den die drei grauen Säulenabschnitte gemeinsam bilden. Liegen die Compound-Kosten bei 7 Euro je Kilogramm, wie dies die Diskussion der S_{95} -Werte auf Seite 80 angedeutet hat, so steigen die Fertigungskosten entsprechend um den in weiß ergänzten Aufschlag.

Spritzgeprägte Duroplast-Platten mit 2 mm Dicke kosten in der Produktion etwa 1,60 Euro; bei Dicken von nur 1,5 mm rund 1,40 Euro. Der Umstieg auf Spritzgießen mit einem Thermoplasten wie Polypropylen führt zu spürbaren Kostenreduktionen des Materials (Preisvorteil sowie Möglichkeit des Recyclings). Die Herstellkosten solcher Platten fallen damit je nach Dicke auf 1,12 beziehungsweise 1,24 Euro. Eine zusätzliche Verkürzung des Zyklus auf 60 statt 90 Sekunden ergibt Zahlen von 0,93 und 1,06 Euro (bei 1,5 beziehungsweise 2 mm Plattendicke).

Abschließend sei daran erinnert, dass der angesetzte Compound-Wert von 5 Euro/kg auf den S_{84} -Schwellwert zurückgeht. Nimmt man stattdessen ausgehend von Bild 8.5 im Anhang (80 Vol.-% Grafit, Seite 165) den Medianwert S_{50} als Basis, so liegt dieser mit Ausnahme der Kombination EP-Synthesegrafit unter 1,80 Euro/kg Mischung. Prinzipiell ließen sich die Basis-kosten für das Material (weiße Säulen in Bild 5.12) damit um 60 % senken. Jedoch wird auch das homogene Mischen der beiden Komponenten in einem Doppelschnecken-Extruder zu Mehrkosten führen. Daher sind 5 Euro pro kg Compound durchaus eine realistische Annahme für die Materialkosten. Bei Großmengenproduktion sind unter Umständen auch Werte unter 5 Euro pro kg denkbar.

Als Ergänzung zu den in Bild 5.12 gezeigten Herstellkosten je BPP zeigt Bild 5.13 noch die analoge Darstellung der Kosten bezogen auf das *Gewicht* der jeweiligen Platten. Die Zahlen in den Säulen nennen das Plattengewicht in Gramm.

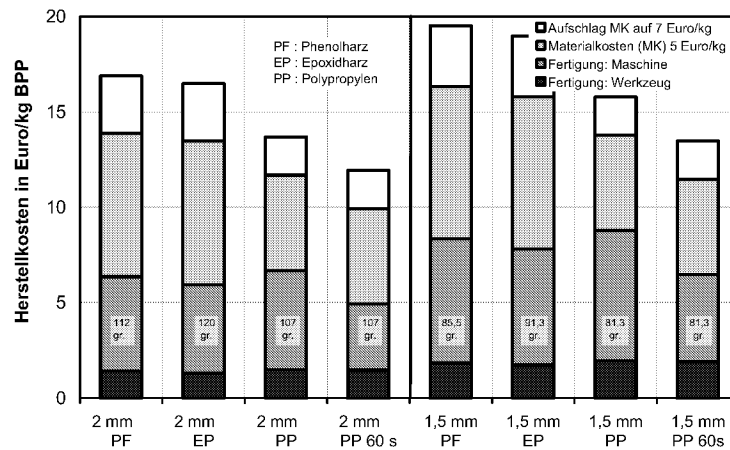


Bild 5.13 : Herstellkosten von BPP je kg Gewicht der Platten

Die Grafik bestätigt das Ergebnis der Diskussion von Gleichung 4.17 (Seite 54). Herstellkosten dünnerer Platten liegen zwangsläufig höher, da an einem Kilogramm Compound mehr Fertigungsaufwand geleistet wird (Produktion einer höheren Plattenanzahl). Dies schlägt sich in höheren Fertigungskosten je kg Materialmischung nieder, während die Materialkosten in einem Kilogramm BPP wie erwartet quasi konstant bleiben. Kleine Veränderungen bei Duroplasten folgen aus den Angussverlusten. Bild 5.13 ist eine klare Bestätigung der Schlussfolgerung, dass massenspezifische Kosten eines Formteils alleine *kein* Minimierungskriterium sind.

Jährlich pro Maschine verarbeitete Compound-Mengen zeigt Bild 8.7 auf Seite 167 im Anhang. Im 90-Sekunden-Zyklus betragen sie mit Duroplasten 50-70 t p.a. und mit PP 30-40 t p.a.

Beitrag zu möglichen PEFC-Stackkosten

An dieser Stelle ist es nun möglich, einen Bogen zu spannen zurück auf Gleichung 4.16 in Kapitel 4.4 (Seite 54). Es wird klar, dass die bisherige Analyse alle Faktoren betrachtet hat, die den virtuellen Benchmark B (Gleichung 4.10, Seite 52) über Materialien, Design und Herstellprozess beeinflussen. Um nun auch eine Kostenaussage in Bezug auf die generierte elektrische Bruttoleistung treffen zu können, ist für das untersuchte Design ein Wert für den Flächennutzungsgrad α festzulegen (Gleichung 4.8). Er möge im Modellfall 80 % betragen, was einem anspruchsvollen Wert für effiziente Strömungsfelder entspricht. Ferner sei angenommen, dass es sich um einen Stack mit dem Kühlvektor (1,0) handelt. Gemäß der Konvention bedeutet dies, dass alle Zellen kühlbar sind und der Stapel somit überall Bipolarelemente enthält (Seite 50). Über der Aktivfläche A sei eine durchschnittliche Leistungsdichte von 5 kW/m^2 ($0,5 \text{ W/cm}^2$) angenommen. Jede Zelle besitzt also zwei Bipolarplatten und hat eine elektrische Leistung von 154 Watt ($\alpha = 0,8$). Unter den getroffenen Annahmen lassen sich die resultierenden Herstellkosten für Bipolarplatten je kW_{el} wie folgt berechnen :

$$\frac{\text{Herstellkosten K}}{\text{el. Leistung P}} = \frac{\text{Herstellkosten K}}{\text{BPP}} \cdot \frac{\text{BPP}}{\text{Zelle}} \cdot \frac{\text{Zellen}}{\text{el. Leistung P}} \quad (\text{Gl. 5.2})$$

Das folgende Diagramm entspricht Bild 5.12, jedoch nun mit einer in "Herstellkosten pro elektrisch nutzbare Leistung" umgerechnete Ordinate.

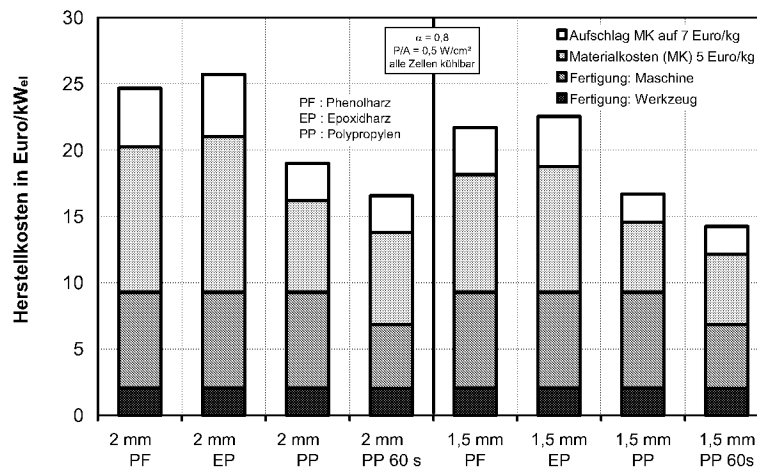


Bild 5.14 : Herstellkosten von BPP aus Grafit-Kunststoff-Compounds, je kW elektrischer Leistung

Erkennbar ist, dass Platten aus Duroplast-Grafit-Mischungen, die über Spritzgussverfahren hergestellt werden, auch in Großmengen nur dann Kostenanteile unter 20 Euro je kW elektrischer Bruttoleistung erreichen können, wenn ihre Dicke 2 mm unterschreitet - und sofern sie mit leistungsstarken MEAs kombiniert werden (5 kW/m^2). Nur der Wechsel auf eine Thermoplast-basierte Spritzgießtechnologie kann zu einer Senkung der Herstellkosten auf ~ 15 Euro je kW_{el} und gegebenenfalls darunter führen. Letzteres aber nur bei gleichzeitig verkürzter Zykluszeit.

Um die Systematik aus Sicht der Kostenrechnung einzuhalten, schließt eine Planungsrechnung zu Vollkosten die Analyse ab. Problematisch sind hierbei jedoch zwei Aspekte :

- ◆ Gemeinkosten wie Verwaltung, Vertrieb, Forschung, Versicherung und dergleichen können in ihren Absolutbeträgen von Firma zu Firma stark differieren.
- ◆ Im Bereich des internen Rechnungswesens besitzen die Unternehmen gewisse Freiheiten bei der Umlage verschiedener Gemeinkosten auf ihre Kostenträger. Je nachdem, welche Schlüssel zum Einsatz kommen, kommen unterschiedliche Ergebnisse zustande.

Daher kann eine derartige Gesamtkostenrechnung lediglich repräsentativen Charakter haben. Der Einzelfall in der Praxis eines Unternehmens wird leicht verändert aussehen. Das hier gezeigte Grundbeispiel orientiert sich an durchschnittlichen Zuschlägen, wie sie aus der Kostenstruktur für das produzierende Gewerbe im Bereich Gummi- und Kunststoffwaren hervorgehen (Bild 5.15). Da die bisherigen Kalkulationen bereits Abschreibungen, Reparatur und Zinsen, Energiekosten sowie direkte Personalkosten beinhalten, fanden nur noch folgende Informationen aus Bild 5.15 in ergänzender Weise Anwendung :

- ◆ Zuschlag für Handelsware auf den Stoffverbrauch rund 26 %
- ◆ Zuschlag für Verwaltung, Vertrieb und Recht rund 12 % auf übrige Herstellkosten
- ◆ Zuschlag für sonstige Kosten rund 8 % auf übrige Herstellkosten

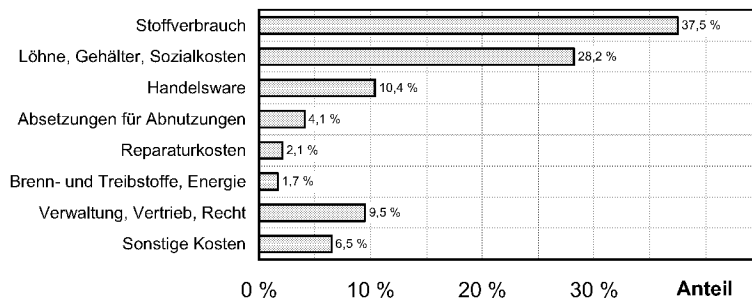


Bild 5.15 : Anteile der Kostenarten am Bruttoproduktionswert, deutsche Kunststoffverarbeitung 2001 [120]

Ferner gehen folgende Annahmen ein :

- ◆ 4 % der Materialeinzelkosten für Hilfs- und Betriebsstoffe
- ◆ 20 % der Fertigungseinzelkosten (FEK) für Forschung und Entwicklung
- ◆ 30 % der FEK für Personalgemeinkosten (wie bei direkten Lohnkosten, siehe Bild 5.10)
- ◆ 10 % der Selbstkosten als Gewinnaufschlag
- ◆ 3 % der Selbstkosten für Rabatte oder Skonto

Entscheidend ist der in Tabelle 5.11 gezeigte leistungsbezogene Nettoverkaufspreis. Er liegt für Duroplast-BPP bei mindestens 35 Euro je Kilowatt Brennstoffzellenleistung. Thermoplastische Bipolarplatten liegen bei ~ 30 Euro/kW, wobei sich auch unter günstigen Produktionsbedingungen beim Spritzgießen mit normalen Pressen 23 Euro/kW kaum unterschreiten lassen.

Tabelle 5.11 : Planungsrechnung auf Vollkostenbasis für BPP, mit resultierenden Nettoverkaufspreisen

	2 mm PF	1,5 mm PF	2 mm PP	1,5 mm PP	1,5 mm PP / 60 s	
Materialeinzelkosten (MEK)	11	8,9	6,9	5,3	5,3	[Euro/kW]
MGK (4 % der MEK) Hilfs- und Betriebsstoffe	0,4	0,4	0,3	0,2	0,2	dto.
MGK (26 % der MEK) Handelsware	2,9	2,3	1,8	1,4	1,4	dto.
Fertigungseinzelkosten (FEK)	9,3	9,3	9,3	9,3	6,8	dto.
FGK (30 % der FEK) Personalgemeinkosten	2,8	2,8	2,8	2,8	2,0	dto.
SoKF (20 % der FEK) Forschung, Entwicklung	1,9	1,9	1,9	1,9	1,4	dto.
Herstellkosten (HK)	28	26	23	21	17	dto.
Verwaltung, Vertrieb, Recht (12 % der HK)	3,4	3,1	2,8	2,5	2,1	dto.
Sonstige Gemeinkosten (8 % der HK)	2,3	2,0	1,8	1,7	1,4	dto.
Selbstkosten (SK)	34	31	28	25	21	dto.
Gewinn (10 % der SK)	3,4	3,1	2,8	2,5	2,1	dto.
Skonto und Rabatte (3 % der SK)	1,0	0,9	0,8	0,8	0,6	dto.
Nettoverkaufspreis, leistungsbezogen	38	35	31	28	23	[Euro/kW]
Gewicht eines Bipolarelements	224	171	214	163	163	[g]
Nettoverkaufspreis, massebezogen	26	31	22	27	22	[Euro/kg]

Die zu Grunde gelegte Jahresproduktion der Anlage von 172.800 Bipolarelementen bei einem 90-Sekunden-Zyklus entspräche einer produzierten elektrischen Stackleistung von 26,5 MW_{el} oder 380 Stacks à 70 kW_{el,brutto}. Über den Abschreibungszeitraum einer Maschine würde die zehnfache Menge produziert (AfA = 10 a), also 3.800 Stacks. Für einen 60-Sekunden-Zyklus lägen die Zahlenwerte entsprechend bei 2,6·10⁵ BPEs, 40 MW_{el} und 570 Stacks.

5.8 Zusammenfassung

In Kapitel 5 erfolgt eine quantitative Analyse möglicher Herstell- und Gesamtkosten für die Produktion von Composit-Bipolarelementen, die als eine neue und aussichtsreiche Technologie für PEFC-Brennstoffzellen gilt.

Die Analyse setzt das in Kapitel 4.4 neu entwickelte ökonomische Modell zur Kostenbetrachtung von Komponenten eines PEFC-Stacks ein, welches Schlüsselkennzahlen für ein Benchmarking bereitstellt. Somit erfolgt eine erste beispielhafte Anwendung dieser Systematik auf eine der Realisierungsmöglichkeiten für das Funktionselement Bipolarplatte.

Eine Strukturierung der Abhängigkeiten macht klar, dass Materialmischung und Design die späteren Fertigungsbedingungen bestimmen und daher als erstes festzulegen sind. Gegenstand der Analyse sind dünne Platten von nur 2 oder 1,5 mm Dicke mit großen Außenabmessungen von 16 x 24 cm. 80 % ihrer Querschnittsfläche können als Aktivfläche zur Stromerzeugung genutzt werden. Die Materialmischung besteht aus Grafit mit Volumenanteilen zwischen 60 und 90 %, wobei im restlichen Raum eine Bindematrix aus Phenolharz, Epoxidharz oder Polypropylen vorliegt. Die Herstellkostenanalyse geht von 80 Vol.-% Grafit aus.

Materialkosten für die Mischung ergeben sich aus der Monte-Carlo-Analyse auf Basis von EUROSTAT-Daten. Aus ihr folgt, dass ein Wert um 5 Euro je kg Compound realistisch ist. Nur mit geringer Wahrscheinlichkeit < 5 % könnten die Materialkosten 7 Euro je kg übersteigen. Somit liegen sie für eine 2 mm dicke Bipolarplatte zwischen 50 und 90 Eurocent (1,5 mm: 35 bis 75 Eurocent).

Für Auslegung und wirtschaftliche Bewertung der Fertigung ist die von der Maschine geforderte Schließkraft der Presse entscheidend. Hier erforderliche Pressen besitzen je nach Innendruck (1.000 - 1.200 bar) und Zahl gleichzeitig hergestellter Platten (1 oder 2 Stück à 384 cm²) zwischen 40 und 100 Tonnen Schließkraft. Sie führt zu Investitionskosten von 200 bis 600 kEuro. Werkzeugkosten betragen rund 30 bis 50 kEuro. Mit einigen weiteren Annahmen (Tabelle 5.9) zeigt sich, dass sich die Fertigungskosten im Mehrschichtbetrieb auf etwa 70 Eurocent je Platte senken lassen. Eine Verkürzung der Zykluszeit von 90 auf 60 Sekunden birgt ein zusätzliches Kostensenkungspotenzial (auf rund 55 Eurocent), ist aber aus fertigungstechnischen Gründen zunächst noch eine Herausforderung.

Projiziert man die genannten Zahlen auf eine angenommene Leistungsdichte von 5 kW/m², so liegen die Herstellkosten der untersuchten Varianten zwischen 15 und 25 Euro je kW Brennstoffzellenleistung, wie Abschnitt 5.7 gezeigt hat. Eine exemplarische Plankostenrechnung zu Vollkosten deutet an, dass die zukünftigen Nettoverkaufspreise von Compositplatten auf Basis dieses Produktionsverfahrens wohl Werte von 30 Euro/kW (bei Duroplasten wie Phenol- oder Epoxidharz) beziehungsweise 23 Euro/kW (mit thermoplastischem Polypropylen) übersteigen.

Compound-Kosten decken sich mit Literaturangaben (Seite 39), liefern aber hier über die Wahrscheinlichkeitsverteilungen genauere Aussagen. Die US-Quelle liefert für Material- wie Fertigungskosten etwa 20 % niedrigere Werte als der günstigste Fall hier, dies aber auch für eine etwa vierfache Ausbringungsmenge [19]. Sowohl Wechselkursschwankungen als auch Degressionseffekte liegen hier im Bereich der Beurteilungsungenauigkeit. Allerdings fehlt in der Literatur eine Vollkostenrechnung, wie sie mit dieser Arbeit dargelegt worden ist.

6 Analyse und Benchmarking von Membranpolymeren

Als zweiter essenzieller Kostenträger von PEFC-Stacks soll das in Kapitel 4.4 bereitgestellte Modell neben den in Kapitel 5 analysierten Composit-Bipolarplatten nun auf ausgewählte protonenleitende Ionomermembranen angewendet werden. Anders als zuvor handelt es sich hier bei dem Produkt zunächst nicht um Einzelteile, sondern um eine kontinuierlich als Rollenware aufgewickelte dünne Folie. Hinzu kommt, dass die Anlagen zur chemischen Synthese inklusive der erforderlichen Trenn- und Reinigungseinheiten hohe Ansprüche an die Verfahrenstechnik darstellen. Beteiligte Reagenzien können gegebenenfalls in unterschiedlicher Weise die Konstruktionswerkstoffe angreifen oder eine Gesundheitsgefährdung beziehungsweise ein Sicherheitsrisiko für Mitarbeiter darstellen. Die Produktion der fünf in Bild 2.5 (Seite 21) dargestellten Polymere wird gemäß der folgenden Systematik untersucht :

1. Darstellung der chemischen Synthesekette
Basischemikalien → Monomere → Polyreaktion → Funktionalisierung zum Protonenleiter
2. Verfahrenstechnische Umsetzung
Reaktionsbedingungen, Stoffeigenschaften, Umsätze, Ausbeuten, Nebenprodukte
3. Materialkosten für das Ionomer
Mengenbilanz und Rohstoffkosten → Monte-Carlo-Analysen der Ionomer-Materialkosten
4. Investkosten der Produktionsanlage
Näherungsrechnungen für die Kapitalkosten und Umlage auf die Produktmenge

Zunächst führen Patentanalysen auf den wahrscheinlichen chemischen Syntheseweg, mit dessen Hilfe sich die einzelnen Reaktionen sowie die benötigten Randbedingungen beschreiben lassen. Dies dient als Grundlage für ein genaues konzeptionelles Verfahrensbild. Eine Materialbilanz ausgehend von kommerziellen Standardchemikalien macht die Untersuchung der Rohstoffkosten möglich (Abschnitt 4.5.3). Die Produktionskosten folgen mit Hilfe der bereit gestellten verfahrenstechnischen Information über Näherungsverfahren (Abschnitt 4.6.3).

Der letzte Teilschritt erfordert die Auswahl einer geeigneten Anlagenkapazität, wie sich bei der Diskussion von Bild 3.5 (Seite 41) schon gezeigt hat: Chemieanlagen tendieren bei Größenskalierungen zu einem Degressionsexponenten von etwa 0,6 - bedingt durch die Steigerung der Apparate-Oberflächen in der zweiten Potenz relativ zur Erhöhung der Apparate-Volumina in dritter Potenz zu einer charakteristischen Länge.

Der Vergleich unterschiedlicher Polymere möge im weiteren Verlauf anhand einer für den PEFC-Absatz "hinreichend großen Anlagenkapazität" geschehen, um zu einer Aussage hinsichtlich eines Sockelbeitrags der Produktionskosten zu gelangen (Bild 6.1). Genaue Aussagen zur Art der Kostendegression bei niedrigen Produktionsmengen erfordern sehr detaillierte Prozesskenntnis und gegebenenfalls mehrere Auslegungsfälle. Dies könnte aus der Sicht von

Nischenmärkten der Brennstoffzelle interessant sein, steht aber zunächst nicht im Zentrum der vorliegenden Analyse.

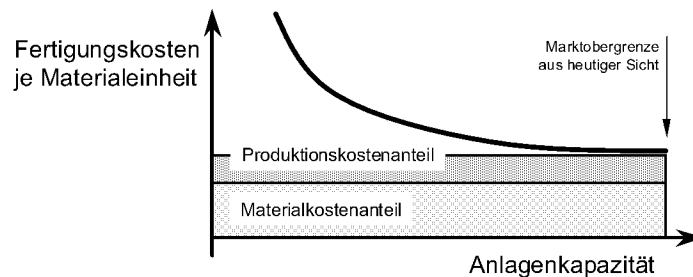


Bild 6.1 : Residualer Produktionskostenanteil bei hoher Anlagenkapazität

Die Berechnung einer oberen Absatzgrenze für Ionermembranen greift auf den Automobilantrieb als Applikation mit dem größten potenziellen Marktvolumen zurück. Andere kleinere Märkte wie Nischenanwendungen (kurzfristige Umsetzung) oder stationäre Stromerzeugung (mittelfristige Umsetzung) mögen zu früheren Zeitpunkten das Erreichen der langfristigen Obergrenze unterstützen.

Der Pkw-Sektor setzt weltweit jährlich fast 60 Mio. Fahrzeuge ab. Bei einem Substitutionspotenzial von 25 % entsteht somit langfristig ein Bedarf von etwa 15 Mio. Antriebsträngen per annum [121]. Mit der Forderung nach 80 kW elektrischer Bruttoleistung je Aggregat entspricht dies einer Jahresproduktion von $1,2 \cdot 10^{12} \text{ W}_{el}$ in Form von Brennstoffzellen-Stacks. Hieraus ergibt sich bei 5 kW/m^2 durchschnittlicher Leistungsdichte für serientaugliche Module dann ein jährlicher Bedarf von $2,4 \cdot 10^8 \text{ m}^2$ Membranfläche. Dünne Membranen, wie sie für den Fahrzeugantrieb favorisiert werden, besitzen höchstens flächenspezifische Gewichte von circa 100 g/m^2 . Inklusive eines Materialaufschlags von 25 % für Verschnitt und sonstige Verluste ergibt sich ein Jahresbedarf an Ionomer von rund 30.000 Tonnen.

Innerhalb eines Anbieter-Oligopols verteilt sich dieses weltweite Marktpotenzial zwangsläufig auf mehrere Produzenten mit mehreren Fabriken, weswegen kaum mehr als ungefähr 2.500 Tonnen Jahreskapazität je Anlage zu erwarten sind.

6.1 Nafion®

Eine Einführung zum Material selbst enthält bereits Abschnitt 2.2.3 (Seite 19). Ergänzend sei darauf hingewiesen, dass das Polymer bereits 1966 in den USA patentiert worden ist [122]. Der patentrechtliche Schutz ist somit für das Produkt wie für die meisten Vorstufen heute abgelaufen. Eine in den 90er-Jahren nachgereichte Modifikation kommt angeblich nicht in der Produktion zum Einsatz, die im Werk Fayetteville / North Carolina erfolgt [123, 124].

6.1.1 Nafion® – Darstellung der chemischen Synthesekette

Die Herstellung von Nafion basiert auf der Polymerisationsreaktion von Tetrafluorethen (TFE) und einem Co-Monomer, das mit PSEPVE abgekürzt wird.

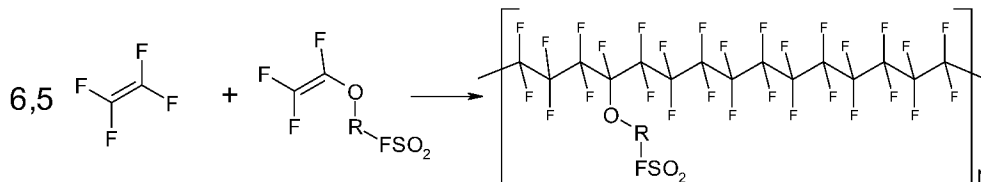
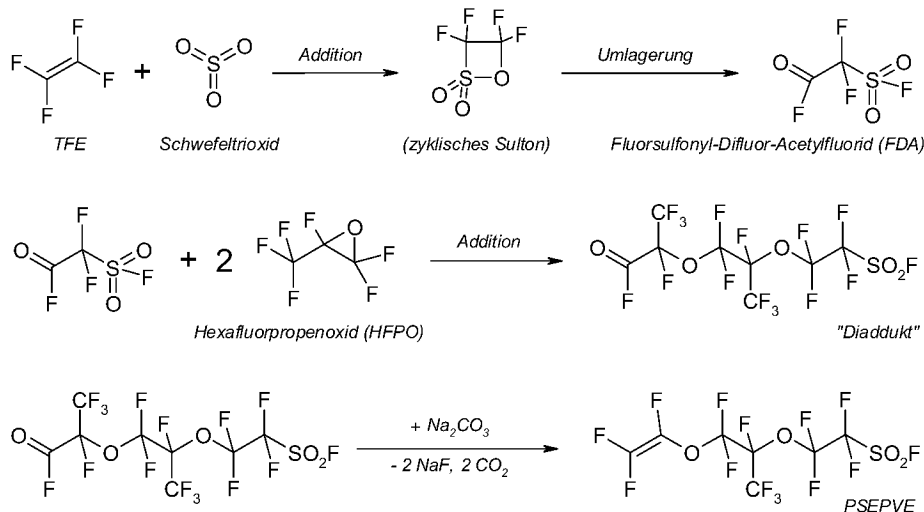


Bild 6.2 : Nafion - Polymerisation aus TFE und dem Co-Monomer PSEPVE [122, Ex. XVII]

Die vorangehende Gleichung zeigt die bei der Polymerisation zu Nafion 1100 ablaufende Reaktion, bei der im statistischen Mittel 6,5 Moleküle TFE mit einem Molekül des Co-Monomers PSEPVE reagieren. Während das Gas Tetrafluorethen zwar in der Handhabung gefährlich ist, jedoch für die Teflon-Produktion bereits eine Basischemikalie darstellt, handelt es sich bei PSEPVE um ein Sondermolekül mit vergleichsweise aufwändiger Synthese. Details zu Eigenschaften und Herstellung von TFE aus CHClF_2 finden sich in [125, 4.1].

Die nächsten Reaktionsgleichungen zeigen den Weg, auf dem PSEPVE aus TFE, SO_3 und Hexafluorpropenoxid (HFPO) entsteht. Dabei ist auch die Struktur des Rests R mit der Summenformel $\text{C}_5\text{F}_{10}\text{O}$ zu erkennen [126, 127, 128].

Bild 6.3 : Nafion - Darstellung des Co-Monomers PSEPVE aus TFE, SO_3 und HFPO

In der Darstellung dieses Co-Monomers liegt eine Haupt-Schwierigkeit der Nafion®-Produktion begründet. Wie sich im nächsten Schritt zeigen wird, entstehen hierbei Nebenprodukte, die nicht wieder verwertbar sind und folglich entsorgt werden müssen. Für das eingesetzte HFPO sind sowohl die Oxidation von Hexafluorpropen (HFP) mit reinem Sauerstoff [129] als auch mit NaOCl [130] dokumentiert, wobei in der Berechnung die letztgenannte Variante Anwendung findet, da dieser Weg einfachere Reaktionsbedingungen besitzt und auf höhere Ausbeuten führt [131]. Ferner erwähnt auch der Hersteller selbst eine Oxidation mit alkalischer H_2O_2 -Lösung, demnach dient auch hier ein flüssiger O_2 -Träger als Oxidans [127, c. 1].

Die Funktionalisierung zum Protonenleiter geschieht nach Abschluss der Polymerisation durch alkalische Hydrolyse mit NaOH sowie Überführen in die Säureform mit HCl :

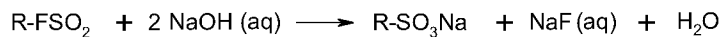


Bild 6.4 : Nafion - Funktionalisierung der protonenleitenden Gruppe [122, Ex. V]

Der formgebende Schritt kann dabei in unterschiedlichen Stadien und mit zwei verschiedenen Prozessformen erfolgen :

- ♦ Extrudieren und Folienziehen des Polymers in der FSO₂-Form [122, Ex. XII]
- ♦ Extrudieren und Folienziehen des Polymers in der SO₃Na-Form [122, Ex. XI]
- ♦ Gießen einer kolloidalen Lösung der SO₃Na-Form [132, Ex. 1]
- ♦ Gießen einer kolloidalen Lösung der SO₃H-Form [132, Ex. 2 und 3]

Der Standardweg der Membranherstellung war zunächst die Schmelzextrusion des FSO₂-Polymers mit anschließendem Filmziehen und abschließendem Überführen in die ionische Form gemäß Bild 6.4 [132, c. 1]. Mittlerweile hat der Hersteller eigens eine kommerzielle Membranfertigung über einen Gießprozess der kolloidalen SO₃H-Polymersuspension vorgestellt, der zu verbesserten Materialeigenschaften führt und zudem die Einbindung von Trärgeweben oder Füllstoffen auf sehr einfache Weise ermöglicht [87, 133].

6.1.2 Nafion® – Verfahrenstechnische Umsetzung

Im folgenden Teil sind die Teilschritte der Synthese kurz erklärt und mit Informationen versehen, die aus der Bewertung der entsprechenden Patente hervorgehen. Meist bleiben diese unvollständig, sodass auf Basis der verfügbaren Angaben zu Reaktionsbedingungen, Umsatzgraden, Ausbeuten und dergleichen im Bedarfsfall weitere Annahmen zu treffen sind. In der Regel enthalten die Dokumente mehrere Fallbeispiele mit variierten Ausgangszuständen, aus denen jeweils das zielführendste im Hinblick auf eine hohe Ausbeute oder Produktqualität für die Analyse ausgewählt worden ist. Bild 6.5 zeigt die FDA-Synthese (vergleiche Bild 6.3) mit den in der Quelle genannten Reaktionsbedingungen [126].

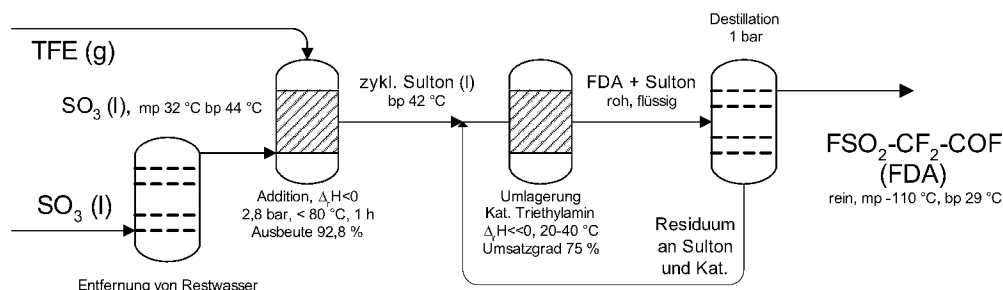


Bild 6.5 : Nafion - Verfahrensschema der Synthese von FDA, nach [126]

Der erste Schritt befreit SO₃ destillativ von enthaltenem Restwasser, da es die Ausbeute stark beeinträchtigt (nur ~ 50 % statt 92,8 %). Dann reagiert Schwefeltrioxid in flüssiger Form laut

Patentangaben innerhalb einer Stunde mit TFE, wobei die Temperatur durch Kühlung unter 80 °C verbleibt [126, Ex. 1 Part A]. Im zweiten, stark exothermen Reaktionsschritt kommt es durch Einwirken eines Katalysators zur Ringöffnung. Nach der Destillation verbleiben laut Patent 75 % der theoretisch möglichen Ausbeute [126, Ex. 1 Part B]. Da die Bildung von Nebenprodukten jedoch unwahrscheinlich ist, besteht in einem großtechnischen Verfahren wohl die Möglichkeit, nicht umgesetztes Sulton nach der Abtrennung des FDA zurückzuführen. Die Bereitstellung von Hexafluorpropenoxid (HFPO, Reaktionspartner des FDA) läuft wie folgt ab :

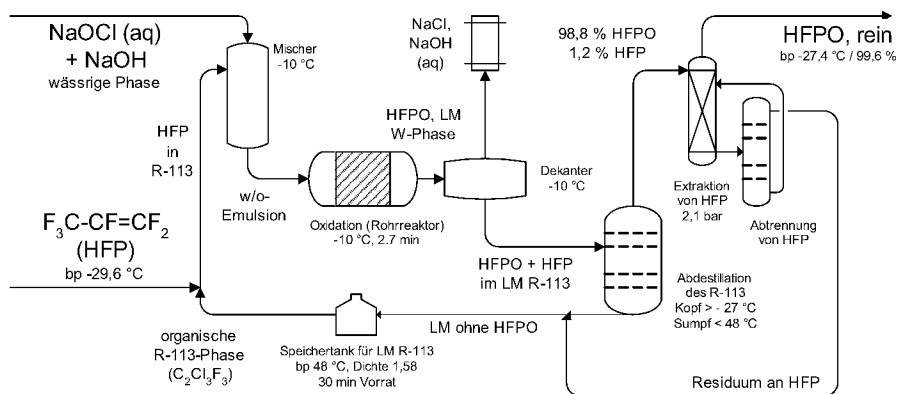


Bild 6.6 : Nafion - Verfahrensschema der Synthese von reinem HFPO, nach [130, 134]

Die Oxidation findet in der Grenzschicht zweier flüssiger Phasen statt. Das organische Hexafluorpropen (HFP) löst sich in R-113 und wird dann mit der wässrigen Phase emulgiert. Nach einer kurzen Reaktionszeit von unter 5 Minuten trennen sich die Flüssigkeiten in einem Dekanter wieder. Die alkalische Kochsalzlösung wird aufbereitet und entsorgt. Die sehr flüchtigen Moleküle HFPO und HFP verlassen das Lösungsmittel am Kopf einer Rektifizierkolonne. Die beschriebenen Prozesse laufen (mit Ausnahme der Destillation) bei etwa -10 °C ab, weil das Produkt HFPO mit steigender Temperatur immer stärker zur Zersetzung in CF_2 und $\text{F}_3\text{C-COF}$ neigt. Bei 165 °C beträgt die Halbwertszeit des Moleküls nur noch 6 Stunden [135]. Der Umsatz von HFP beträgt den angegebenen Werten zufolge 99,1 Mol-%; die Ausbeute an HFPO 77,1 Mol-%.

Wegen der sehr eng beieinander liegenden Siedepunkte der Reinstoffe HFP (-29,6 °C) und HFPO (-27,4 °C) ist eine destillative Trennung sehr aufwändig. Daher erfolgt sie stattdessen extraktiv [134]. Das Lösungsmittel 1,2-Dichlorethan löst bevorzugt HFP und führt auf eine relative Volatilität von bis zu 3,3. So entsteht im beschriebenen Fall HFPO mit einer Reinheit von 99,6 Mol-% [134, Ex. 1]. Aus den Angaben ergibt sich dabei rechnerisch eine Ausbeute von 96,9 Mol-% HFPO im Reinigungsprozess. Auf eine weitere Feinreinigung, die aus zwei Wäschen mit KOH und CaH_2 besteht, wird an dieser Stelle der Übersichtlichkeit halber nicht weiter eingegangen, da der Materialverbrauch hierbei minimal ist. Details finden sich in [136].

Wie in Bild 6.3 (Mitte) gezeigt, erfolgt zur PSEPVE-Synthese als nächstes die Addition von 2 Molekülen HFPO an ein Molekül FDA, wodurch das so genannte "Diaddukt" entsteht. Die Gas-Flüssig-Reaktion läuft im Oligoether Diglyme als Lösungsmittel (LM) ab. HFPO strömt bei leichtem Überdruck von etwa 1,3 bar in den Reaktionsraum und nach rund einer halben Stunde

ist nahezu vollständiger Umsatz der Edukte erreicht. Dabei entsteht allerdings eine Mischung aller Addukte zwischen 1 und etwa 12 eingebauten HFPO-Einheiten, deren Verteilung vor allem vom molaren Verhältnis FDA : HFPO abhängt.

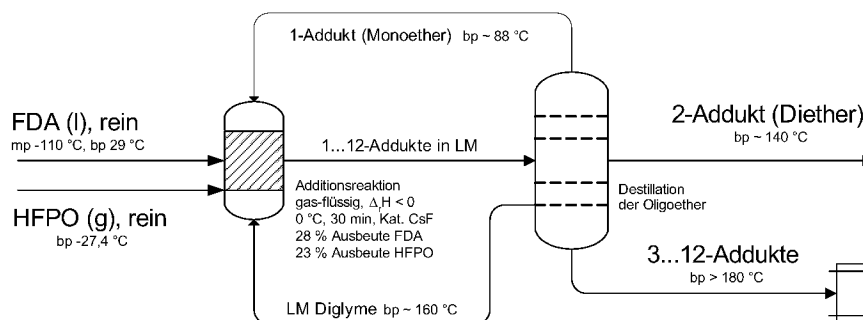


Bild 6.7 : Nafion - Verfahrensschema der Synthese und Isolierung des Diaddukts, nach [127]

Die Mischung der gebildeten Oligo-Addukte durchläuft die Rektifiziereinheit, aus der das Monoaddukt am Kolonnenkopf abgezogen und zur Weiterreaktion rezykliert werden kann. Das Diaddukt reichert sich zwischen Kopf und Lösungsmittelfraktion an, verlässt dort den Verfahrensschritt und durchläuft gegebenenfalls eine Feinreinigung. Wie das 1-Addukt, so läuft auch das LM Diglyme zwischen Trennkolonne und Reaktor im Kreislauf. Die oberhalb von 180 °C siedenden, länger-kettigen Addukte können nicht mehr in das Zielprodukt PSEPVE überführt werden und bedürfen daher der Entsorgung. Dies senkt zwangsläufig die Ausbeute der Edukte im Diaddukt in bedeutender Weise. Sie liegt auf Basis des zugänglichen Patents für FDA und HFPO bei 28 % beziehungsweise 23 % [127, Ex. II].

Prinzipiell ist es denkbar, dass sich der in die Rektifiziereinheit mitströmende Katalysator Cäsiumfluorid dort im Sumpf ansammelt. In diesem Fall ist entweder das sich verbrauchende CsF als Rohstoff zu betrachten oder muss im Inneren der Anlage rezykliert werden. Das Patent selbst liefert hierzu keine weitere Information.

Bei der Eliminierungsreaktion, die zur endständigen Trifluorvinylgruppe des PSEPVE führt, tritt das Problem der Isomerbildung auf. Gebildet wird zwar vorrangig, aber nicht ausschließlich das in Bild 6.3 gezeigte Produkt. Es entsteht zusätzlich auch ein gewisser Anteil an iso-PSEPVE :

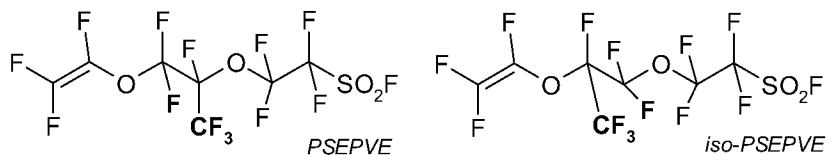


Bild 6.8 : Nafion - Vergleich der Isomere PSEPVE und iso-PSEPVE

Iso-PSEPVE muss aus der Mischung eliminiert werden, da es bei der sich anschließenden Polymerisation (Bild 6.2) als Kettenüberträger aktiv ist und so zu niedermolekularem Polymer führt. Dieser Umstand hat zur Einführung einer zusätzlichen selektiven Pyrolyse geführt mit nachfolgender Abtrennung des aus iso-PSEPVE entstehenden Oligoethers [128, c. 3]. Nach der 8-stündigen Eliminierungsreaktion mit nachfolgender Wäsche und Destillation ergeben sich

knapp 67 % Ausbeute an Diaddukt, da Nebenreaktionen zu weiteren, meist höhermolekularen Produkten führen, die als öliger Rückstand abgetrennt werden müssen [128, Ex. 1]. Es schließt sich ein Verfahrensschritt zur bereits beschriebenen Entfernung des iso-PSEPVE an, der gemäß der Patentveröffentlichung mit etwa 15 % Verlust an PSEPVE verbunden ist [128, Ex. 7]. Bild 6.9 stellt die beschriebenen Schritte im Fließbild dar :

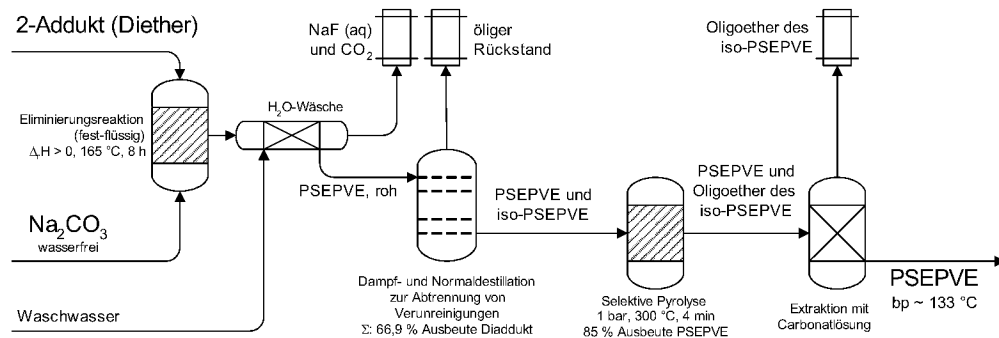


Bild 6.9 : Nafion - Verfahrensschema der Synthese und Isolierung von PSEPVE, nach [128]

Mit dem auf diesem Weg hergestellten PSEPVE findet nun die Co-Polymerisation mit TFE zum eigentlichen Polymer statt (Bild 6.2, Seite 94).

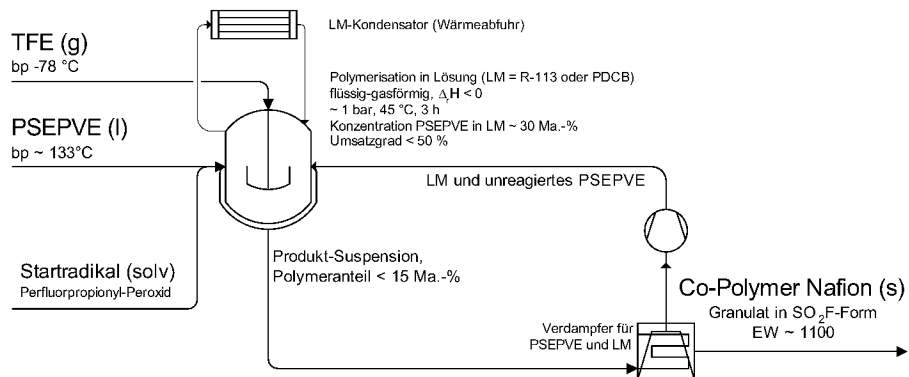


Bild 6.10 : Nafion - Verfahrensschema der Polymerisation, nach [123], [128, Ex. 4], [122, Ex. VIII]

PSEPVE befindet sich in Lösung mit dem FKW PDCB (Dimer des HFP, C₆F₁₂), das mittlerweile gegenüber dem FCKW R-113 bevorzugt wird [123, c. 4]. Der Massenanteil PSEPVE in der Mischung beträgt rund 30 %. Die Konzentration von TFE ist über den Druck der Gasphase regelbar. Die bei der exothermen Reaktion entstehende Wärme kann über einen Kondensator abgeführt werden, wodurch dem Lösungsmittel neben der Verdünnungsfunktion für PSEPVE auch noch die Rolle eines Wärmeträgers zukommt.

Die Temperatur ist so ausgewählt, dass sie zu einer optimierten Freisetzungsrates an Starter-radikalen für die Reaktion führt. Versuchsdauern sind bei 45 °C mit 3 Stunden angegeben. Das produzierte Polymer muss ein großes Molekulargewicht (also lange Ketten) besitzen und zudem das angestrebte hohe molare Mischungsverhältnis von TFE:PSEPVE = 6,5 erreichen. Diesen Zielen kann man über Anpassung verschiedener unabhängig voneinander einstellbarer

Reaktionsparameter wie Gasdruck, Flüssigkeitszusammensetzung, Lösungsmittelauswahl, Rührgeschwindigkeit und dergleichen zwar nahekomen, jedoch lässt sich nicht vermeiden, dass verschieden lange Polymerketten den Reaktor als Rohprodukt verlassen. Ein Vorteil radikalischer Polymerisationen ist, dass die Lebensdauer aktiver Radikale mit wenigen Sekunden deutlich unter der Verweilzeit im Reaktor liegt. Hierdurch sinkt der Einfluss der Verweilzeit auf die Molekülmassen-Verteilung [137, p. 414].

Dennoch bleibt es schwierig, realistische Werte für die Ausbeute an nutzbarem Produkt anzugeben. Die erste Erwähnung aus dem Jahr 1966 lässt auf etwa 35 Ma.-% schließen [122, Ex. VIII], wohingegen ein weiteres Beispiel von 1978 indirekt auf eine sehr niedrige Ausbeute an PSEPVE von nur 5,8 Ma.-% hindeutet [128, Ex. 4] :

$$\frac{1.040 \text{ g Produkt} \cdot 40,56 \text{ Ma.} - \% \text{ PSEPVE}}{13.342 \text{ g Flüssigkeit} \cdot 54,2 \text{ Ma.} - \% \text{ PSEPVE}} = 5,8 \%$$

Die aktuellste Erwähnung (1994) sagt in der Versuchsdurchführung zwar, dass das Produkt gewogen worden ist, gibt die Werte aber nicht an. Da eine verlässliche Angabe der Ausbeute an PSEPVE somit nicht erfolgen kann, muss die folgende Materialkostenanalyse diese wichtige Größe zunächst als Parameter ansehen und exemplarisch verschiedene Fälle betrachten.

6.1.3 Nafion® – Mengenbilanzierung und Materialkostenanalyse

Die Mengenbilanzierung ist in Anhang 8.9 detailliert ausgeführt und zeigt daher zur besseren Orientierung hier nur Ergebnisse für die drei Fälle mit 10, 50 und 90 % Ausbeute bei der Polymerisation. Die Angaben enthalten auf zwei zählende Ziffern gerundete Werte.

Tabelle 6.1 : Nafion - erforderliche Rohstoffmengen je nach Ausbeute bei der Polymerisation

Ausbeute	mol je mol Nafion® 1100			kg je kg Nafion® 1100 (SO ₃ H-Form)		
	90 %	50 %	10 %	90 %	50 %	10 %
TFE	15	27	130	1,3	2,4	12
SO ₃	7,5	13	67	0,5	1,0	4,9
NaOCl	44	79	400	3,0	5,4	27
NaOH	18	32	160	0,6	1,2	5,8
HFP	23	42	210	3,2	5,7	28
Summe	[-]	[-]	[-]	8,7	16	78

Die folgende Materialkostenanalyse verwendet ungerundete Zwischenwerte als Basis. Für die 5 Haupt-Ausgangssubstanzen des Nafion® gilt es nun, mit der in Abschnitt 4.5 eingeführten Methodik Verteilungsfunktionen für deren Handelspreise zu bestimmen.

TFE wird nach oben durch die EUROSTAT-Gruppe "PTFE in Primärformen" (24.16.30.60) abgeschätzt, da es die Rohstoffkosten von Teflon nahezu ausschließlich determiniert. Die TFE-Synthese läuft in vier Reaktionsschritten mit der folgenden Bruttogleichung ab :

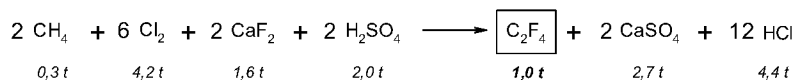


Bild 6.11 : Gewinnung von TFE aus Methan, Chlor, Flußspat und Schwefelsäure [138, p. 25]

Dasselbe Prinzip der Abschätzung nach oben ist auch bei SO_3 benutzt worden, einem Vorprodukt der Schwefelsäure (24.13.14.33). Zu beachten ist, dass Säuren von EUROSTAT in der Form ihrer Anhydride erfasst werden, was in der Regel Umrechnungen erforderlich macht. Natriumhydroxid wird als Natronlauge direkt aufgezeichnet (24.13.15.27). Für Hexafluorpropen, das auch in perfluorierten Hochtemperaturkunststoffen zum Einsatz kommt, dient die Gruppe "Andere fluorierte Polymere" (24.16.30.70) als Vergleich, die trotz einer gewissen Unsicherheit mögliche HFP-Kosten realistisch wiedergibt. Hinzu kommt, dass HFP auf einem ähnlichen Weg wie TFE oder auch aus TFE selbst hergestellt wird [138, p. 27, 139, p. 113]. Jedoch sind auch andere Synthesewege für eine industrielle Umsetzung denkbar [140, 141, 142].

Eine Schwierigkeit ergibt sich im Fall des Natriumhypochlorits (NaOCl), für das weder eine eigene noch eine nahe liegende Vergleichsgruppe existiert. Demnach bedarf in diesem Fall einer Modellverteilung, wie sie bereits Bild 4.7 (Seite 58) gezeigt hat. Eine einfache und häufig realitätsnahe Abschätzung besteht darin, von Katalogpreisen für Laborchemikalien aus zu extrapolieren, da sie eine breite Vielfalt an Substanzen abdecken. Eine Anfrage nach 25 Litern NaOCl (aq) ergab einen Nettopreis von 84,10 Euro. Bei einem Gehalt von 13 Ma.-% aktivem Chlor (also 327,6 g NaOCl je Liter) folgt hieraus ein Preis von 10,26 Euro je kg NaOCl im Chemikalienhandel. Ein Zehntel dieses Preises stellt erfahrungsgemäß einen ungefähren Erwartungswert bei industriellen Großmengen dar. Eine spezielle Art der Dreieckverteilung, die dann in den Rechnungen benutzt wird, zeigt das folgende Diagramm.

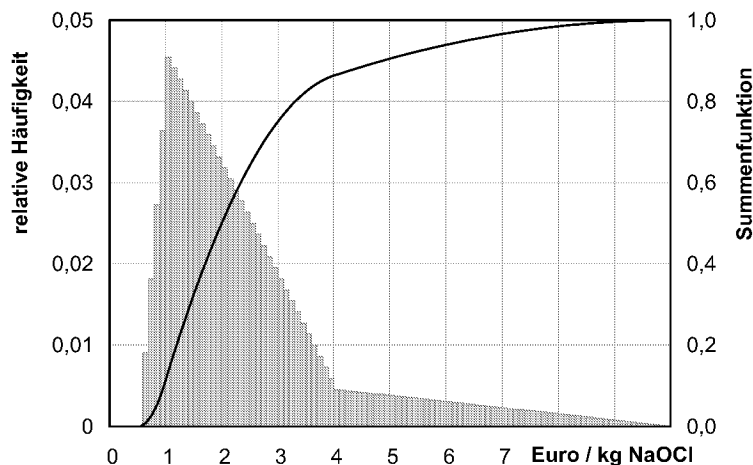


Bild 6.12 : modellierte Wahrscheinlichkeitsverteilung für NaOCl

Der besagte Wert von 10,26 Euro/kg stellt das obere Limit der Verteilung dar, 5 % dieser Zahl entsprechend die untere Schranke. Der Erwartungswert mit maximaler relativer Häufigkeit liegt bei 10 %. Er möge bis auf 40 % des Maximalwertes steil und danach flacher absinken. Unter Einbeziehung dieses Modells für Natriumhypochlorit ergeben sich für die Kosten von Ausgangsstoffen des Nafion®-Polymers folgende Wahrscheinlichkeitsverteilungen :

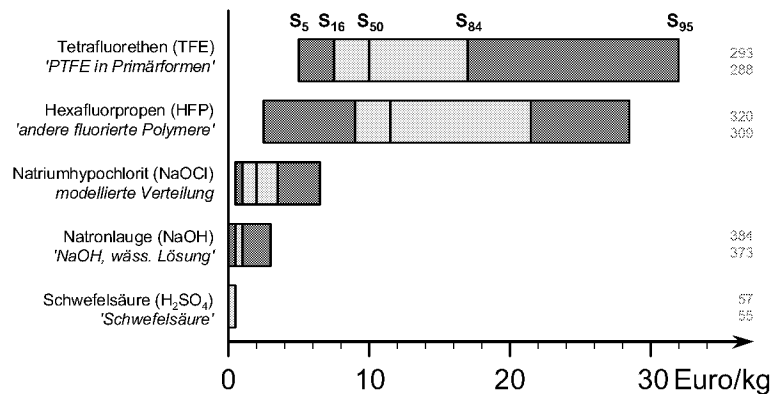


Bild 6.13 : Preise wichtiger Nafion®-Chemikalien (Quelle EUROPROMS*, zur Darstellung siehe Bild 4.9)

Die Darstellung entspricht Bild 5.5 (Seite 80), das Materialien für Composit-BPPs zeigte. Die kostenintensivsten Rohstoffe sind der Auswertung zufolge die perfluorierten Monomere TFE und HFP, relativ zu denen die anorganische Chemikalien offenbar nur von untergeordneter Kostenrelevanz sind.

Nun können die in Tabelle 6.1 gezeigten erforderlichen Mengen an Rohchemikalien sowie die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen ihrer Preise mit einem einfachen linearen Monte-Carlo-Modell zusammengeführt und analysiert werden: Für die Fälle möglicher Monomer-Ausbeuten bei der Polymerisation (90 %, 50 % beziehungsweise 10 %) sind 60.000 statistische Einzelexperimente durchgeführt worden. Diese ziehen jeweils einen Zufallswert für die Eduktkosten aus den oben gezeigten Intervallen und multiplizieren ihn dann mit der sich aus der chemischen Synthesekette ergebenden nötigen Eduktmenge. Die Addition der fünf Chemikalien ergibt dann je Experiment einen errechneten möglichen Zufallswert für die Materialkosten in Nafion® 1100. Analog zu Bild 4.5 (Seite 57) sieht dies grafisch folgendermaßen aus :

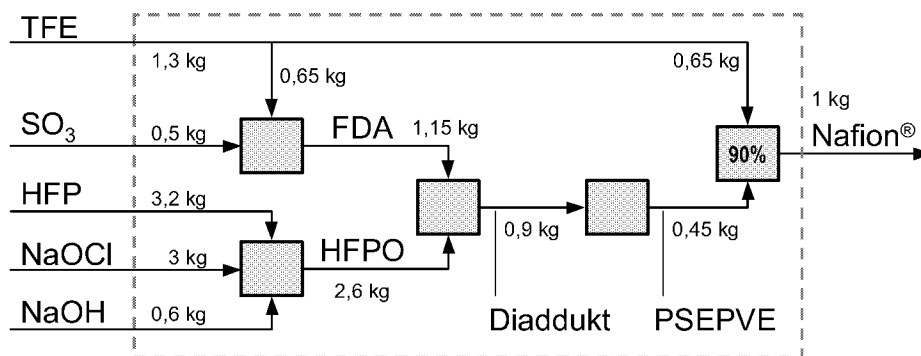


Bild 6.14 : Monte-Carlo-Modell für die Nafion®-Synthese, ohne Nebenprodukte

* Angaben am Ende informieren oben über die Gesamtzahl verfügbarer Datenpunkte in der Datenbank und unten über die Zahl der verwendeten Datenpunkte nach der Konsistenzprüfung (Anhang 8.6)

Die genannten Massen unterstellen den Fall von 90 % Produktausbeute während des Polymerisationsschrittes, der im weiteren Verlauf auch als der wahrscheinlichste angesehen wird. Hierfür ergeben sich dann als Ergebnis der MC-Analyse folgende Summenverteilungen für die Edukte und Produkt :

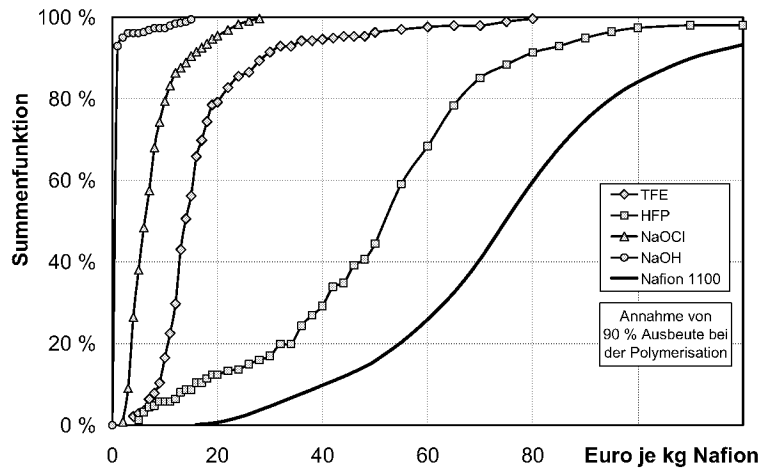


Bild 6.15 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von Nafion® 1100 und Anteile der Edukte

Die Gesamtsumme liegt überwiegend in einem Bereich zwischen 15 und 100 Euro je kg Polymer. Der höchste Kostenfaktor ist hierbei das Hexafluorpropen. Die zunächst noch vergleichsweise geringen Mehrkosten je kg verglichen mit TFE (Bild 6.13) werden durch den über doppelt so hohen Bedarf an HFP noch verstärkt, sodass die Ausgaben für TFE nur bei rund einem Drittel der HFP-Kosten liegen. NaOCl, das Oxidationsmittel für HFP, trägt nur mit rund 10 % zu den Materialkosten für Nafion® bei.

Bezieht man dessen S_{84} -Wert von 100 Euro pro kg auf die daraus produzierbare Membranfläche von 10 bis 20 m² (*), so ergeben sich Materialkosten zwischen 5 und 10 Euro je m², was im Rückblick auf Tabelle 3.5 (Seite 40) primär positiv zu bewerten ist: Bei einer Produktion von 2 Mio. m² p.a. würden die Materialkosten einen Anteil von ~ 20 % des Verkaufspreises stellen, was ein realistischer Wert ist und die Qualität der Materialkostenanalyse bestätigt.

Halbiert sich durch ein Absinken der Polymerisationsausbeute auf 50 % die Effizienz der Anlage nahezu, so ist mit Materialkosten um 200 Euro pro kg, also 10 bis 20 Euro je m² zu rechnen. Gleichzeitig erhöhen sich auch die Fertigungskosten je kg, da die Anlage zum Erreichen der gleichen Ausbringungsmenge um einen Faktor 1,8 größer sein muss ($= 0,9/0,5$).

Betrüge die Ausbeute während der Polymerisation von TFE und PSEPVE tatsächlich nur 10 %, so verneunfachte sich der Verbrauch an Rohstoffen, was auf Materialkosten von bis zu 1.000 Euro je kg Nafion® führen würde (50 bis 100 Euro pro m²). Dies läge dann aber im Widerspruch zu den in Tabelle 3.5 genannten Preisen für Nafion® bei größeren Produktionsmengen von 100 bis 200 Tonnen pro Jahr.

* bei einem flächenbezogenen Membrangewicht von 50 beziehungsweise 100 g/m²

6.1.4 Nafion® – Investkosten der Produktionsanlage

Am Ende der Einführung in Kapitel 6 hat sich gezeigt, dass auch ein Massenmarkt der Brennstoffzelle, wie es zum Beispiel der Automobilmarkt in einigen Dekaden sein kann, nicht auf ähnlich große Produktionsmengen an Membranpolymeren wie an Massenkunststoffen führen wird. Auch Großanlagen werden kaum eine Jahreskapazität von etwa 2.500 Tonnen überschreiten (Seite 93). Der bei einer solchen Größe verbleibende Aufschlag für die Fertigungskosten des Ionomers beziehungsweise der Membran soll mit den verschiedenen Methoden aus Abschnitt 4.6 nun näherungsweise ermittelt werden.

Auch dabei dient zunächst wieder die Bilanzierung der Synthesekette als Grundlage, um die Mengenströme an Chemikalien zu bestimmen, die die einzelnen Baugruppen der Chemieranlage passieren. Die Produktion der 2.500 Tonnen p.a. möge während einer Jahresbetriebsdauer von 7.000 Stunden erbracht werden, was knapp 80 % des gesamten Jahres entspricht. Bild 6.16 zeigt die sich daraus für eine Nafion®-Anlage ergebenden Stoffströme in den einzelnen Anlagenteilen.

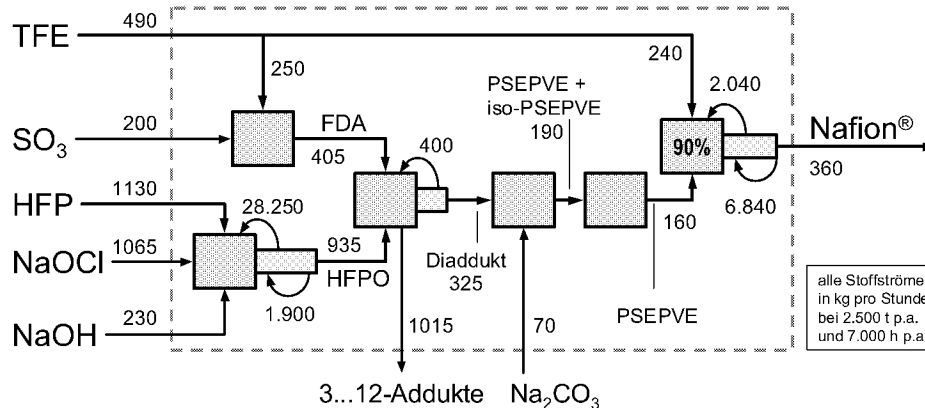


Bild 6.16 : Nafion - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion

Die Reaktionszeiten in den einzelnen Stufen belaufen sich in Summe auf etwa 10 bis 15 Stunden, wobei noch Verweildauern in den Reinigungseinheiten hinzukommen (FDA-Synthese ~ 1 h, HFP-Oxidation ~ 10 min, Addition zum Diaddukt ~ 30 min, Eliminierung zu Roh-PSEPVE ~ 8 h, selektive Pyrolyse ~ 5 min).

Die Analyse des direkten Kapitalbedarfs für die Nafion®-Produktion nach den fünf in Abschnitt 4.6.3 beschriebenen Vorgehensweisen lässt sich anhand von Anhang 8.10 nachvollziehen. An dieser Stelle zeigt Bild 6.17 deren Ergebnis, und zwar bereits inklusive der während einer Abschreibungsdauer von zehn Jahren anfallenden Kapitalkosten. Die Zahlen stehen für einen Neubau "auf der grünen Wiese" (*grass-roots investment*). Sie enthalten neben den direkten und indirekten Nebenkosten, die auf die eigentlichen Anlagenkosten führen (*battery plant limit*), auch noch Zuschläge für Anteile an allgemein erforderlichen Serviceeinheiten für Elektrizität, Dampfbereitstellung, Kühlwasser, Lagertanks, Werkstätten, Analyselabore und dergleichen (auch als *off-sites* bezeichnet) [143, p. 46].

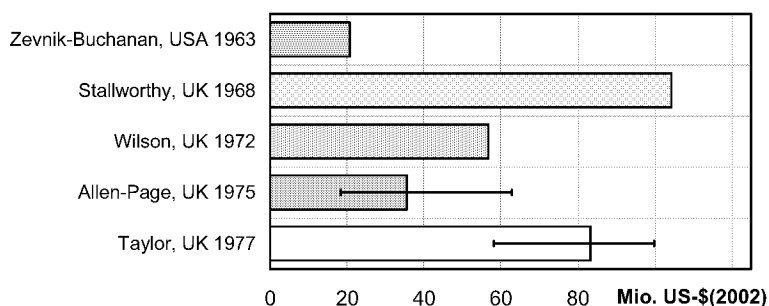


Bild 6.17 : Nafion - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkul. Zins)

Die Vor- und Nachteile der einzelnen Ansätze wurden in Abschnitt 4.6.3 bereits diskutiert. Die dort angesprochenen Aspekte erfahren in der Anwendung auf die Nafion®-Synthese Bestätigung (Seite 68). ZEVIK UND BUCHANANs Methode vereinfacht zu stark und ist zudem inzwischen veraltet. Eine Multiplikation mit einem Faktor von ungefähr 3 würde das Ergebnis näher an die heutige Realität im Chemieanlagenbau heranbringen.

STALLWORTHY erfasst die hohen Ströme in den Rückführungen bei der HFPO-Produktion und in der Membran-Gießanlage besser und schätzt den Kapitalbedarf auf rund 100 Mio. US-\$(2002). Unsicherheiten bei der Anwendung seiner Methode sind jedoch gegeben. Das Ergebnis von WILSON liegt im Mittelfeld der fünf Berechnungen. Jedoch ist seine Tendenz zu Unterschätzungen in der Literatur bestätigt [115, 117], weswegen eher mit höheren Werten zu rechnen ist. Die Vorgehensweise von ALLEN UND PAGE ist detailliert, jedoch besteht Gefahr in der hohen Unsicherheit infolge der Betrachtung von Stoffmengen- statt Massenströmen. Die drei von der Masse her beträchtlichen Rückführungen organischer Lösungsmittel gehen nur wenig in die Bilanzierung ein, insbesondere im Vergleich zu Strömen auf Wasserbasis. Das Stoffmengenverhältnis beträgt 2,8 : 14,8 - das Massenverhältnis in Wahrheit aber 32,5 : 20,0 (*).

Die systematische und umfassendere Methode von TAYLOR führt auf ein ähnlich hohes Ergebnis wie das von STALLWORTHY, sofern man die Toleranz nach oben mit berücksichtigt. Unter Einbezug der Schwachpunkte der anderen Ansätze lässt sich erkennen, dass sein Ansatz zu einem glaubwürdigen Resultat führt. Sinnvoller als eine pauschale Mittelung aller Methoden scheint daher eine Orientierung am Ergebnis von TAYLOR, wobei die Kalkulationen von STALLWORTHY ergänzend als eine Abschätzung nach oben mit zu berücksichtigen sind.

Eine vergleichende Diskussion der Fertigungskosten mit den anderen vier Polymervarianten wird Abschnitt 6.5 führen (Seite 134). Daher geht das folgende Unterkapitel nun zur Analyse zweier Varianten des BAM-3G (Ballard Advanced Materials, dritte Generation) über.

* Die Angaben sind in $[10^6 \text{ lb-mol/a}]$ beziehungsweise $[\text{t/h}]$

6.2 BAM-3G

Der strukturelle Aufbau der Ballard-Membranen mit perfluorierter Hauptkette und arylischen Substituenten R kam schon auf Seite 19 kurz zur Sprache. Im folgenden Teil erfolgt zunächst wieder die Analyse der chemischen Darstellung der Monomere sowie deren technischer Umsetzung in einer Chemieranlage.

6.2.1 BAM-3G – Darstellung der chemischen Synthesekette

Aus den Beispielen mehrerer Offenlegungsschriften von Ballard Advanced Materials aus den 90er-Jahren geht hervor, dass drei Monomere eine besonders wichtige Rolle in der Polymer-synthese spielen. Dies sind α,α,β -Trifluorstyrol (TFS) sowie meta-Trifluormethyl- α,α,β -Trifluorstyrol (mCF_3 -TFS) und para-Fluorsulfonyl- α,α,β -Trifluorstyrol ($pFSO_2$ -TFS) [144]. Zwei Polymer-varianten werden in unterschiedlichen Variationen in mechanisch tragende PE- und PTFE-Gewebe gegossen - ein sulfoniertes Copolymer (SC) sowie ein hydrolysiertes Terpolymer (HT), deren chemischer Aufbau wie folgt aussieht :

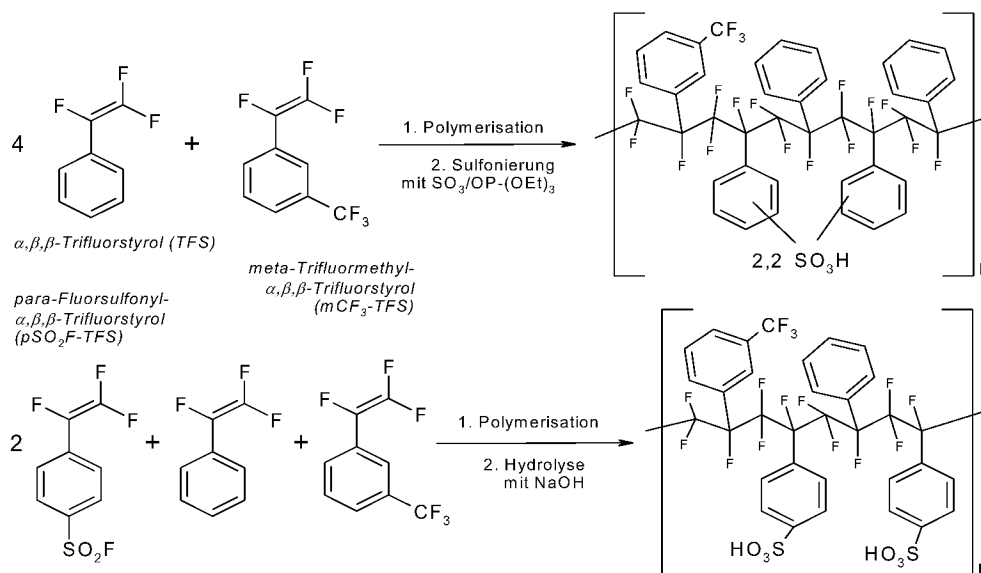


Bild 6.18 : BAM3G - Polyreaktion von sulfoniertem Copolymer (SC) und hydrolysiertem Terpolymer (HT)

Die Synthese der Trifluorvinyl-Derivate erfolgt aus den entsprechenden Iod-Derivaten und geschah zunächst mit metallorganischen Reaktanden wie $F_2C=CF(Zn)Br$ oder $F_2C=CF(Zn)I$ in Anwesenheit einer Palladiumverbindung [145]. Nach schwierigen Tieftemperatursynthesen in früheren Jahren avancierte dieser Weg zum Mittel der Wahl. Eine 2002 publizierte Verbesserung stabilisiert das organometallische Intermediat über einen *in situ* entstehenden Komplexbildner, erhöht die Ausbeute, läuft bei Raumtemperatur ab und verwendet vor allem R-134a als Ausgangsstoff, ein preiswertes Standard-Kältemittel [146]. Diese Vorgehensweise ist auch der nachfolgenden Materialbilanzierung und Anlagenauslegung zu Grunde gelegt :

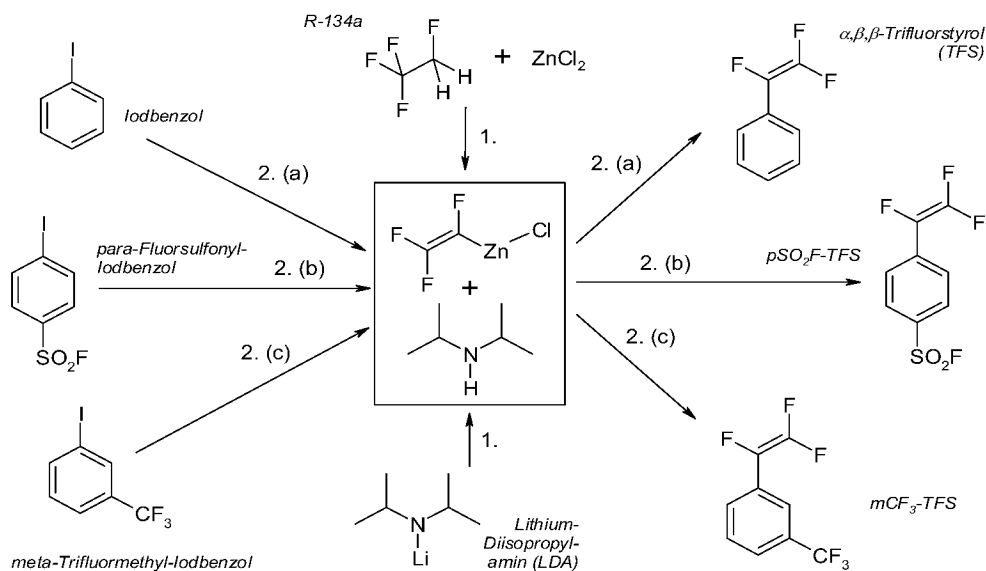
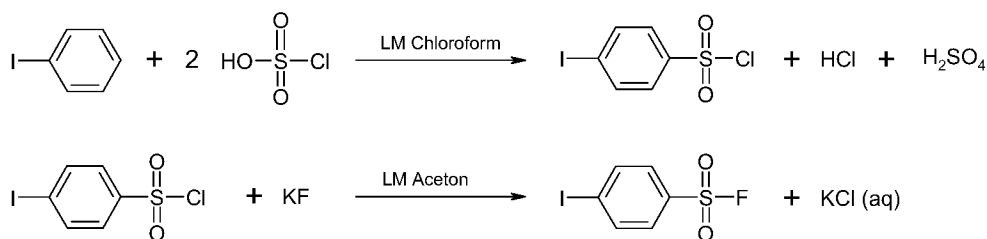


Bild 6.19 : BAM3G - Darstellung der Monomere aus ihren Iod-Derivaten [146]

Iodobenzol, das als Basischemikalie zur Herstellung von TFS und $p\text{SO}_2\text{F-TFS}$ dient, kann mit rund 95-98 % Ausbeute durch Reaktion von Iod und Benzol in der Gasphase hergestellt werden, wobei nur etwa 2-5 % an 1,2-Diiodbenzol als Nebenprodukt entstehen [147]. Die Temperatur liegt bei annähernd 400 °C, da die Reaktion stark endotherm und Iodradikale selbst nur wenig reaktiv sind [148, p. 111].

Die Weiterreaktion zu $\text{para-Fluorsulfonyl-iodobenzol}$ geschieht über Sulfochlorierung mit nachfolgendem Austausch des Halogenatoms [149] :

Bild 6.20 : BAM3G - Synthese von $\text{para-Fluorsulfonyl-iodobenzol}$

Die Ausbeute an Iodobenzol im ersten Schritt ist nahezu quantitativ und liegt für Chlorsulfonsäure entsprechend bei knapp 50 %. Die sich anschließende Umhalogenierung überführt nach Quellenangaben etwa 90 % des Sulfonylchlorids in das entsprechende Fluorid.

Am schwierigsten gestaltet sich die Darstellung des in Bild 6.19 links unten gezeigten, in meta-Position trifluormethylierten Iodobenzols. Theoretisch führen zunächst 2 Wege auf dieses disubstituierte Benzol: Entweder die Iodierung von α,α,α -Trifluortoluol (Benzotrifluorid) oder die Trifluormethylierung von Iodobenzol. Letztere scheitert bereits daran, dass Halogenatome ein am Ring angreifendes Elektrophil in ortho- und para-, aber nicht in meta-Position dirigieren [150,

Ex. 10]. Halogenierungen von Benzotrichlorid oder -fluorid führen zwar zu gewünschten meta-Substitutionen, dies allerdings nur mit Chlor [151] oder Brom [152], nicht aber mit Iod.

Übereinstimmend empfehlen deutsche wie amerikanische Quellen für Iodierungen von Benzolderivaten den Weg über entsprechende Diazoniumionen [153, p. 736-751] [154, p. 1175]. Im vorliegenden Fall würde dies ihre Darstellung aus meta-Trifluormethylanilin und HNO_2 erfordern, die jedoch in der Literatur so nicht dokumentiert ist.

Eine britische Offenlegungsschrift zeigt 1971 einen Weg zur Überführung von Benzotrifluorid in die gesuchte Verbindung, allerdings erst nach fast 100 h bei 70 °C und mit einer Ausbeute von unter 50 % [155]. Erfolgreicher ist ein 1998 zugelassenes Patent, das Iodfluorid (IF) als Agens verwendet [156]. Dieses bildet sich *in situ* aus Iod und einem Gasgemisch aus N_2 und etwa 10 Vol.-% Fluor, da IF selbst oberhalb von -14 °C in Iod und IF_5 disproportioniert [166, pp. 465-466]. Somit ergibt sich für meta-Trifluormethyl-Iodbenzol die folgende Umwandlungskette :

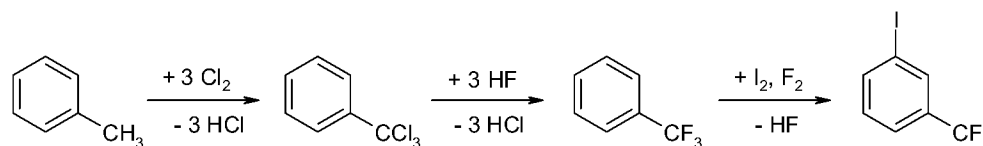


Bild 6.21 : BAM3G - Darstellung des Intermediats meta-Trifluormethyl-Iodobenzol

Chlorgas überführt Toluol in Benzotrichlorid, welches dann von HF zu Benzotrifluorid umhalogeniert wird [157, 158]. Letzteres reagiert wie oben beschrieben mit IF zum Zielprodukt. Das meta-Produkt bildet sich mit hoher Ausbeute von über 80 %, da die CF_3 -Gruppe bei elektrophiler Substitution in diese Position dirigiert.

Wie bereits in Bild 6.18 gezeigt, erfolgt zunächst eine radikalische Polymerisation in wässriger Emulsion, die für BAM3G-SC nach 72 Stunden auf knapp 85 % Ausbeute an Polymer führt [159, Ex. 4]. Bei der nachfolgenden Sulfonierung mit einem SO_3 -Komplex in Chloroform beeinflusst die SO_3 -Konzentration das spätere Äquivalenzgewicht [159, Ex. 14-20]. Elektrochemisch leistungsfähige BAM3G-Membranen sind alleine nicht formstabil. Sie werden daher in DMF oder Alkoholen gelöst und dann in PTFE-Trärgewebe gegossen. Ihre Äquivalenzgewichte liegen zwischen 360 und 430 g/mol für -SC und 480 g/mol für -HT [144, Ex. 1-5].

Für das Hydrolysierte Terpolymer (HT) entfällt die Sulfonierung. An ihre Stelle tritt nach Polymerisation und Formgebung die alkalische Hydrolyse der SO_2F -Gruppen im Polymer mit rund 6-molarer Kalilauge. Die Ausbeute der Monomere liegt bei über 80 % [149, Ex. 2 und 5].

6.2.2 BAM-3G – Verfahrenstechnische Umsetzung

Im folgenden Teil sind die Teilschritte der Synthese kurz erklärt und mit den Informationen versehen, die aus der Bewertung der entsprechenden Patente hervorgehen. Meist liefern diese nur Teilinformationen, sodass auf Basis der verfügbaren Angaben zu Reaktionsbedingungen, Umsatzgraden, Ausbeuten und dergleichen im Bedarfsfall weitere Annahmen zu treffen sind. In der Regel enthalten die Dokumente mehrere Fallbeispiele mit variierten Ausgangszuständen, aus denen jeweils das zielführendste im Hinblick auf eine hohe Ausbeute und Produktqualität für die Material- und Produktionskostenanalyse ausgewählt worden ist.

Für die direkte Iodierung von Benzol in der Gasphase an Zeolith-Katalysator ist 1986 ein Schutzrecht erteilt worden, demzufolge die Synthese wie folgt abläuft :

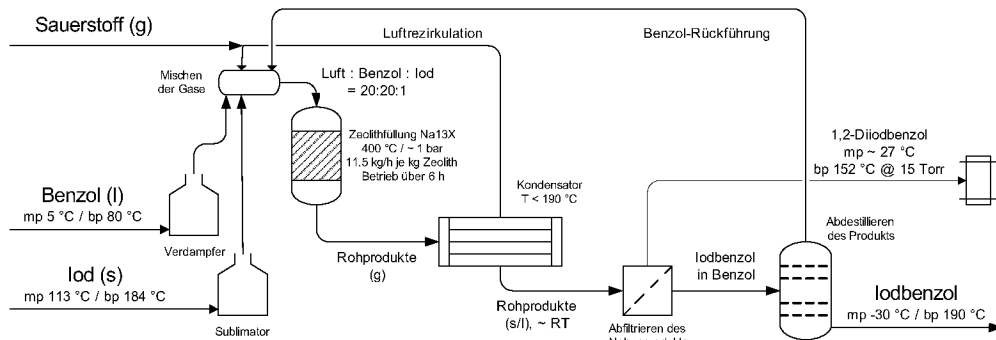


Bild 6.22 : BAM3G - Synthese von Iodobenzol aus Benzol, Iod und Luft, nach [147]

Bei einer Temperatur von etwa 400 °C kommt es zu einer Mischung von Benzol, Iod und Luft in der Gasphase, wobei die Reaktionspartner des Iods in 20-fachem Überschuss vorliegen. An der Oberfläche des Katalysators kommt es im Reaktor zur Substitution, bei der sich Iodobenzol mit wenig Diiodbenzol bilden. Luftsauerstoff bildet mit den substituierten H-Atomen Wasserdampf. Nach Abkühlen und Auftrennen des Produktstroms kehrt der Benzolüberschuss zurück in die Vormischzone.

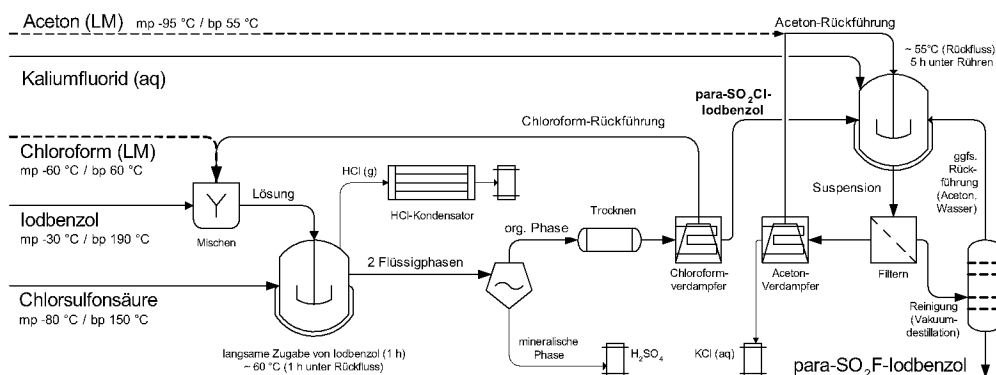


Bild 6.23 : BAM3G - Synthese von para-Fluorsulfonyl-Iodobenzol, nach [149, Ex. 1]

Die Umwandlung von Iodobenzol verläuft in zwei Stufen, wobei sich zunächst Chlorsulfonsäure unter Rückfluss von Chloroform an den Benzolring anlagert. Die räumliche Größe des Iodatoms unterbindet das Entstehen von ortho-Nebenprodukten, sodass sich eine annähernd quantitative Ausbeute des para-Chlorsulfonyl-Iodobenzols einstellt. Dieses durchläuft dann im zweiten Reaktionsschritt eine Umhalogenierung mit Kaliumfluorid und geht während der fünfstündigen Verweilzeit in einem Rückfluss von Aceton in para-Fluorsulfonyl-Iodobenzol über.

Die Produktion des dritten wichtigen Monomers, meta-Trifluormethyl-Iodobenzol, kann über die Iodierung von Benzotrifluorid ($C_6H_5-CF_3$) durch *in situ* gebildetes IF erfolgen :

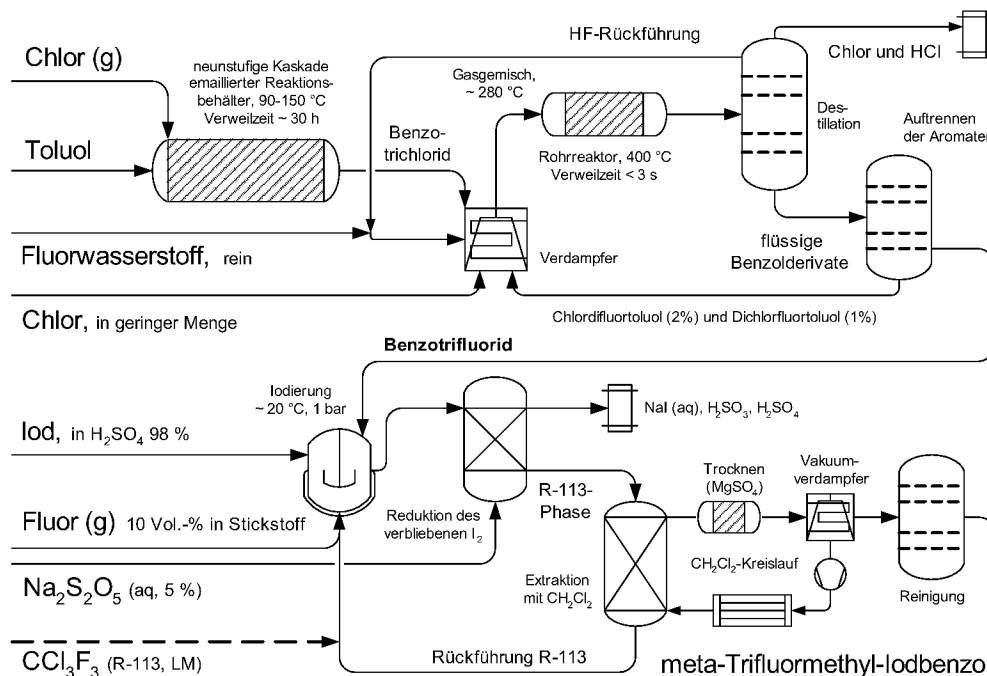


Bild 6.24 : BAM3G - Synthese von meta-Trifluormethyl-iodobenzol, nach [156,157,158]

Im oberen Teil ist die Produktion von Benzotrifluorid aus Toluol, Chlor und Fluorwasserstoff zu erkennen, bei der zunächst Benzotrichlorid als Intermediat auftritt. Dies durchläuft dann in einer schnellen Reaktion eine Umhalogenierung zum entsprechenden Fluorid, bei der weiteres HCl als Nebenprodukt entsteht.

Im zweiten Teil der Synthese kommt es zur Zweitsubstitution am Benzolring, in dem das aus Iod und Fluor direkt gebildete IF das Benzotrifluorid in meta-Position iodiert*. Der Aromat ist dabei die Unterschuskomponente. Natriumbisulfit reduziert im Anschluss überschüssiges Iod und entfernt dieses mit der mineralischen Phase. Benzolderivate verbleiben in der organischen Phase des Lösungsmittels R-113, welches wegen seiner Klimarelevanz im Kreislauf verbleiben muss. Nach Extraktion und Trocknung in einem Dichlormethan-Kreislauf mit anschließender Reinigung kann meta-Trifluormethyl-iodobenzol als Produkt isoliert und der Trifluorvinylierung zugeführt werden.

Für die Analyse der Trifluorvinylierung wird im Folgenden vom schon erwähnten Verfahren mit R-134a und Lithium-Diisopropylamid (LDA) ausgegangen (Bild 6.19, Seite 106) :

* Das eingesetzte Gasgemisch aus 10 Vol.-% Fluor und 90 Vol.-% Stickstoff ist kommerziell verfügbar und findet bereits Einsatz in der Automobilindustrie, wo es zum Abdichten von Benzintanks benutzt wird.

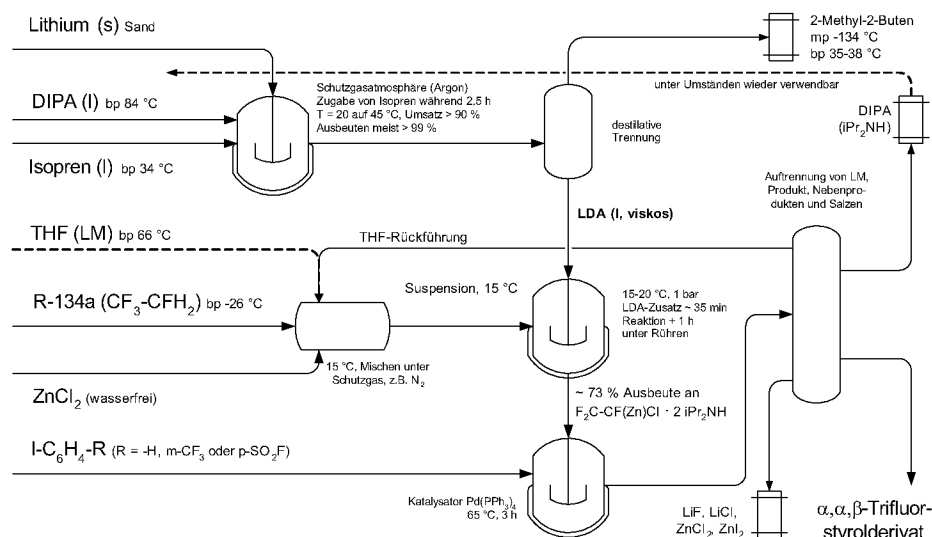


Bild 6.25 : BAM3G - Trifluorvinylierung der Iodbenzol-Derivate, nach [146, 160]

Die Darstellung des LDA erfolgt im vorliegenden Fall in Anlehnung an einen lösemittelfreies Verfahren, auf das in den USA im Jahr 2001 ein Schutzrecht erteilt worden ist [160]. Es verzichtet im Gegensatz zu einem älteren Prozess aus dem Jahr 1986 darauf, Diisopropylamin (DIPA) und Isopropen zunächst in Tetrahydrofuran (THF) zu lösen, ehe diese mit Lithiumpulver reagieren [161]. Da es sich bei DIPA und Lithium um pyrophore Substanzen handelt, ist Sauerstoffausschluss durch ein Inertgas sicherzustellen. Nach Abtrennung des aus dem Elektronendonator Isopren gebildeten Nebenprodukts kann das LDA dem nächsten Reaktionsschritt zugeführt werden. Dort bildet es gemeinsam mit R-134a^{*} und Zinkchlorid die instabile metallorganische Aktivsubstanz $F_2C=CF(Zn)Cl$, die via Komplexbildung mit dem bei der Reaktion rückgebildeten DIPA eine Stabilisierung erfährt.

Bei der abschließenden Kopplung mit den Iod-substituierten Benzolderivaten bewirkt die mit knapp 73-%iger Ausbeute entstandene Aktivsubstanz dann die gewünschte Trifluorvinylierung unter Abspaltung der zugehörigen Zinkhalogenide. Diese sind ebenso wie bereits zuvor entstandenes Lithiumfluorid und -chlorid aus der THF-Phase abzutrennen und als Kuppelprodukte zu entsorgen. Wieder zurückgebildetes DIPA kann eventuell in der LDA-Synthese erneut eingesetzt werden. Das Lösungsmittel THF kehrt zur weiteren Mischung mit R-134a und $ZnCl_2$ zum Ausgangspunkt der Trifluorvinylierung zurück.

Die im Labormaßstab erreichten und publizierten Ausbeuten für die Reaktionen mit Iodbenzol oder meta-Trifluormethyl-Iodbenzol betragen 69 % beziehungsweise 67 % [146]. Das Fehlen eines entsprechenden Wertes mit para-Sulfonylfluorid-Iodbenzol wurde auf Nachfragen hin vom Verfasser damit begründet, dass "Ballard (Advanced Materials) diese Reaktion bereits untersucht habe und sie deshalb nicht durchgeführt worden sei" [162].

^{*} R-134a ist das Standard-Kältemittel für Klimaanlage in Kraftfahrzeugen. Die Jahresproduktion liegt im Bereich mehrerer 10.000 Tonnen.

Abschließend zeigen die folgenden Darstellungen zwei mögliche Polymerisationsprozesse, die auf das sulfonierte Copolymer (SC) und das hydrolysierte Terpolymer (HT) führen.

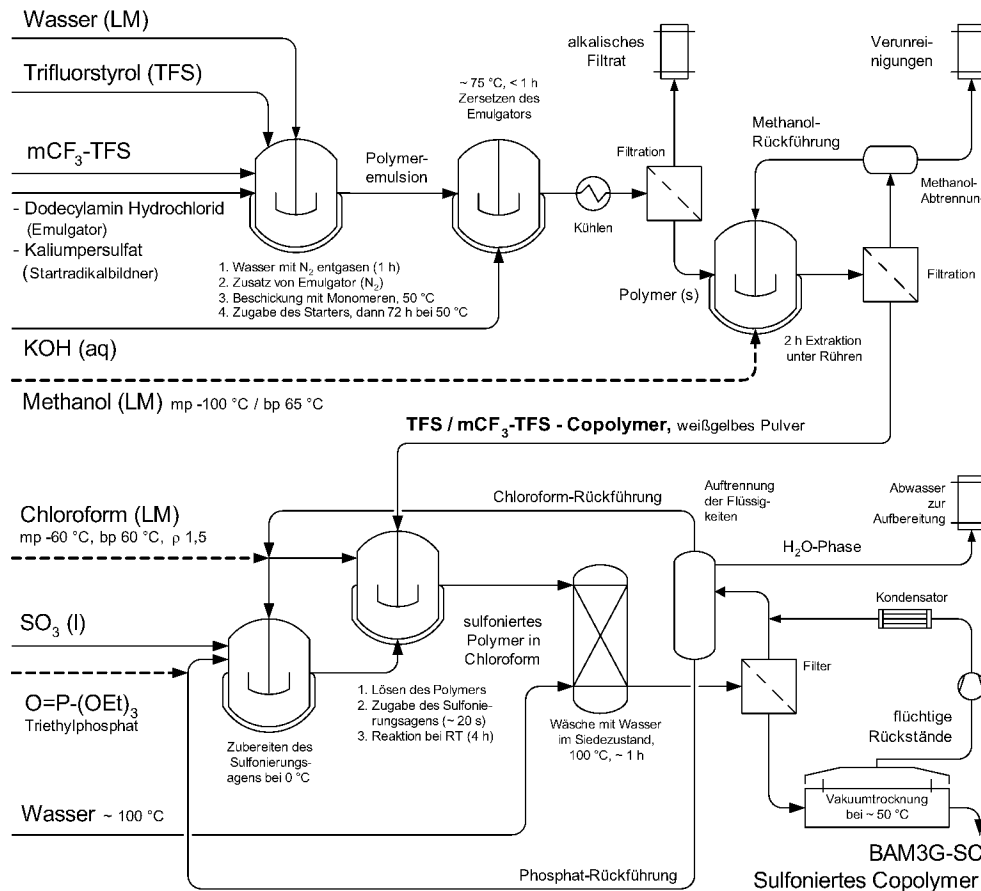


Bild 6.26 : BAM3G - Polymerisation und Sulfonierung zu BAM3G-SC, nach [149, 159]

Die radikalische Polymerisation läuft unter Schutzgas und in einer wässrigen Emulsion ab. Bemerkenswert ist ihr sehr langsamer Verlauf, der erst nach drei Tagen zu hohen Ausbeuten nahe 85 % führt [159, Ex. 5, 7]. Nach der Polyreaktion muss zunächst der beigemischte Emulgator mit Kali- oder Natronlauge zersetzt werden, ehe sich der Filterkuchen dann mit Methanol weiter reinigen lässt.

Chloroform nimmt das so gewonnene Copolymer auf und bringt es im nächsten Verfahrensschritt mit komplexiertem Schwefeltrioxid in Kontakt, das innerhalb von 4 Stunden die Sulfonierung des Polymers in den Phenylringen herbeiführt. Das Komplexierungsmittel Triethylphosphat und die enthaltenen Ionen verlassen die Produktmischung über eine intensive Wäsche mit heißem Wasser. Aus deren Eluat wird das Phosphat zurückgewonnen und lässt sich auf diese Weise wieder verwenden. Unterdessen trennt sich das sulfonierte Polymer vom Chloroform und kann entweder zunächst als Pulver getrocknet oder gegebenenfalls auch direkt aus dem Lösungsmittel heraus zu geträgerten Membranen gegossen werden.

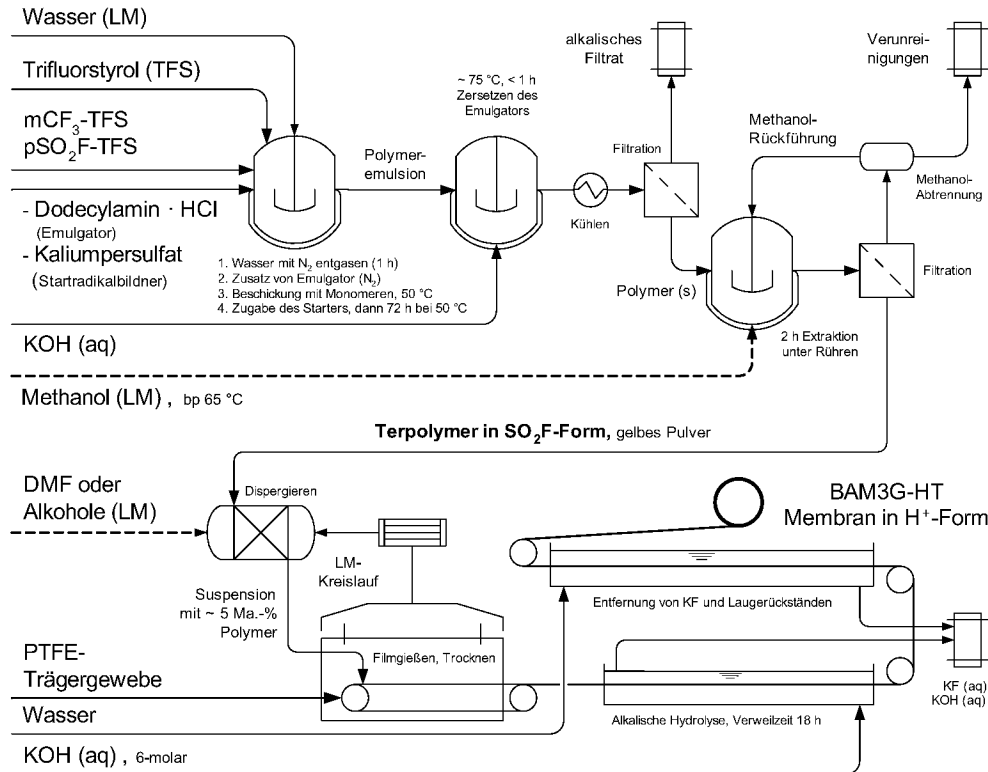


Bild 6.27 : BAM3G - Polymerisation und alkalische Hydrolyse zu BAM3G-HT, nach [144, 149]

Die Polymerisation verläuft ähnlich der SC-Variante, jedoch mit dem Unterschied, dass nun mit p-SO₂F-TFS ein drittes Monomer in das Polymer Eingang findet. Die Mengenverhältnisse liegen bei einer molaren Mischung von TFS : mCF₃-TFS : pSO₂F-TFS von 1 : 1 : 2 [149, Ex. 2]. Anschließend überführt ein Gießprozess mit nachgeschalteter Trocknung das Polymer in die Form einer Membran, nachdem es zuvor in DMF oder einer Mischung auf Alkoholbasis suspendiert worden ist.

Ein Bad mit 6-molarer Kalilauge transformiert dann in der Folie die SO₂F-Gruppen der Phenylringe unter Bildung von gelöstem Kaliumfluorid in die SO₃H-Form. Bemerkenswert ist die hierfür erwähnte Verweilzeit von etwa 18 Stunden, die jedoch wahrscheinlich eine Funktion der Filmdicke ist und bei dünnen Folien kürzer ausfallen kann [149, Ex. 5]. Waschwasser in einem zweiten Bad spült abschließend Alkali- und Halogenid-Ionen sowie den restlichen Überschuss an Lauge aus der fertigen Membran heraus.

6.2.3 BAM-3G – Mengenbilanzierung und Materialkostenanalyse

Analog zur Diskussion des Nafion® sind auch hier genaue Bilanzierungen in Anhang 8.9 enthalten. Tabelle 6.2 zeigt das summarische Endergebnis der Patentanalysen für die SC- und die HT-Variante in kg Ausgangsstoff je kg Ionomer :

Tabelle 6.2 : BAM3G - Bedarf an Ausgangsstoffen in kg Chemikalie pro kg Ionomer

BAM 3G	Diisopropylamin	Zinkchlorid	R-134a	Iod	Na-Bisulfat	Isopren	Benzol	Chlor	Toluol	Lithium	Fluorwasserstoff	Emulgator	Fluor	Sauerstoff	Kaliumpersulfat
-SC	3,8	2,5	2,3	1,7	1,5	1,3	0,72	0,62	0,27	0,26	0,17	0,15	0,13	0,08	0,01
-HT	2,2	1,5	1,3	1,0	1,2	0,74	0,42	0,47	0,20	0,15	0,13	0,08	0,10	0,04	0,01

Bei den genannten Stoffen handelt es sich um diejenigen, die in beiden Polymervarianten zum Einsatz kommen. Das sulfonierte Copolymer (SC) verwendet darüber hinaus noch 1,2 kg Triethylphosphat und 2,1 kg Schwefeltrioxid für die Sulfonierung. Im hydrolysierten Terpolymer (HT) kommen zusätzlich 0,89 kg Chlorsulfonsäure sowie 0,22 kg Kaliumfluorid zum Einsatz, die für die Synthese von para-Fluorsulfonyl-Iodbenzol nötig sind.

Für die involvierten Lösungsmittel gilt in dieser Arbeit die vereinfachte Annahme vollständiger Rezyklierung. Dies bedeutet ein Umwälzen von 8,3 kg Wasser und 4,5 kg Schwefelsäure pro kg SC (4,8 und 3,4 kg pro kg HT). Die Produktion von para-Fluorsulfonyl-Iodbenzol (für HT) führt Patentangaben zufolge auf einen Lösungsmittelbedarf von 7,9 kg Chloroform und 3,5 kg Aceton je kg Ionomer. Für die Sulfonierung ließe sich entsprechend ein Umlauf von 43 kg Chloroform und über 700 kg Wasser je kg SC ableiten, was aber in dieser Form nicht übernommen wurde, da derart hohe Mengen eine andere Umsetzung in der Praxis erwarten lassen. Die Anlagenauslegung berücksichtigt daher beide Lösungsmittel pauschal mit je 10 kg / kg Ionomer.

In den nächsten Abbildungen sind die angesetzten Kostenverteilungen für die einzelnen Edukte sowie deren Herkunft aufgeführt. Nicht für alle konnten praxisnahe Gruppen aus der EUROSTAT-Datenbank Verwendung finden. Ausgefallene Chemikalien sind deshalb wieder über eine Modellverteilung approximiert worden, wie im Fall des Nafions® beschrieben (Seite 100).

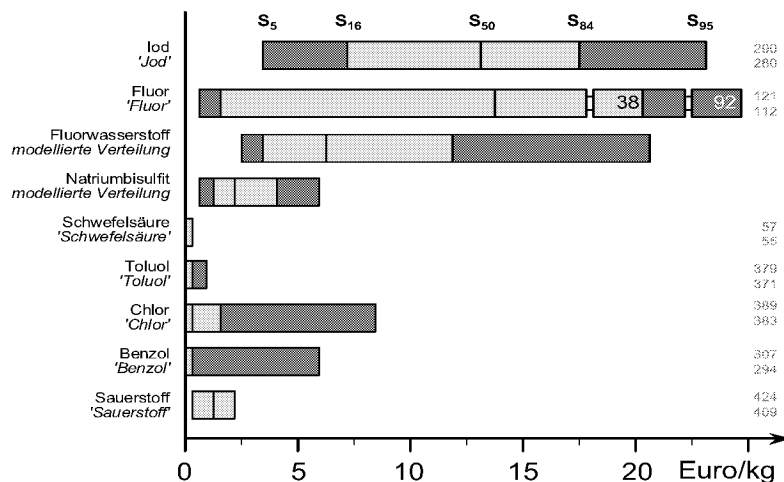


Bild 6.28 : Preise wichtiger BAM3G-Chemikalien (Quelle EUROPROMS, zur Darstellung siehe Bild 4.9)

Auffallend ist, dass die Halogene Iod und Fluor mit vergleichsweise hohen Kosten verbunden sind. Auch für Fluorwasserstoff ist dies zu erwarten, zumal dessen Einsatz besondere Vorkehrungen zum Schutz von Arbeitern und Anlage erfordert. Die Basisaromaten Benzol und Toluol sind wenig kostenkritische Einsatzstoffe.

Nachdem Bild 6.28 vor allem die Ausgangschemikalien der Monomerbausteine Iodbenzol und m-CF₃-Iodbenzol zeigen, beinhaltet die nächste Tabelle weitere Edukte, die für die Trifluorvinylie- rung der Benzolderivate sowie die spätere Polymerisation und Sulfonierung nötig sind.

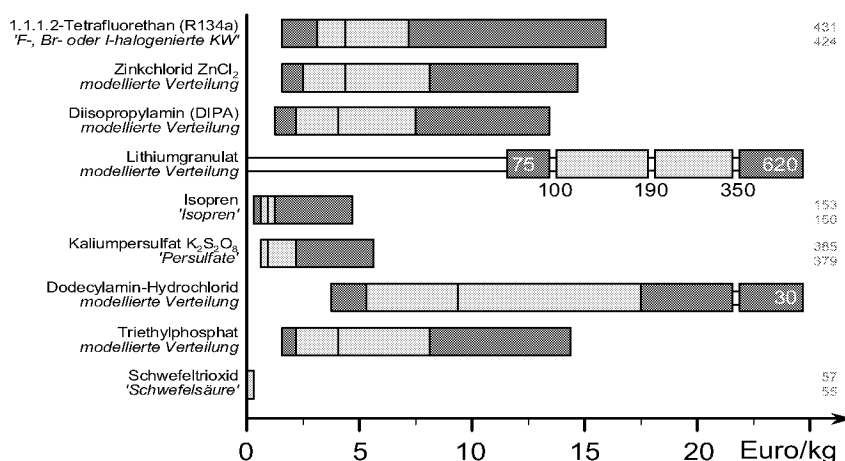


Bild 6.29 : Preise wichtiger Chemikalien zur Trifluorvinylie- rung, Polymerisation und Sulfonierung *

Der Umfang der beiden Abbildungen deutet bereits die Gesamtkomplexität der BAM3G-Poly- mersynthese an. Der kostenintensivste Schritt in der Reaktionskette besteht voraussichtlich in der Trifluorvinylie- rung der Monomere. Er bedarf der vorherigen LDA-Synthese aus DIPA und elementarem Lithium, dessen massenspezifischer Preis auch im industriellen Maßstab unge- fähr bei etwa 200 Euro je kg Alkalimetall liegen dürfte.

Das Metall oxidiert bei der Reaktion und ist somit nicht wieder nutzbar. Die anfallenden Lithium- halogenide lassen sich zwar nach Trennung und Reinigung als Kuppelprodukte absetzen, je- doch hat eine nachhaltige Entwertung der Substanz stattgefunden: LiCl wird mit 75 Euro je kg im Chemikalienhandel geführt (Gehalt an Lithium: 16,4 Ma.-%). In Verbindung mit einer ent- sprechenden Modellverteilung folgt im industriellen Handel hieraus ein anzunehmender Wert der Chemikalie zwischen etwa 5 und 20 Euro je kg Salz. Der für die Polymerisationsreaktion in den Quellen genannte Emulgator Dodecylamin kann einen zusätzlichen Kostenfaktor darstellen; je nachdem, in welcher Menge er in der Praxis benötigt wird.

Wie bereits im Fall von Nafion® geschehen, so kombiniert nun auch hier eine Monte-Carlo- Analyse die Materialbilanz mit den eben entwickelten Verteilungsfunktionen für deren massen- bezogenen Kosten. Die höhere Anzahl an Edukten hat dazu geführt, dass aus Kapazitätsgrün- den nicht 60.000, sondern nur 20.000 statistische Zufallsexperimente Eingang in die Analyse

* Angaben am Ende informieren oben über die Gesamtzahl verfügbarer Datenpunkte in der Datenbank und unten über die Zahl der verwendeten Datenpunkte nach der Konsistenzprüfung (Anhang 8.6)

gefunden haben. Aus 18 Einsatzstoffen folgt schließlich eine Summenfunktion, wie sie die folgende Grafik in Verbindung mit den kostenintensivsten Einzelchemikalien zeigt :

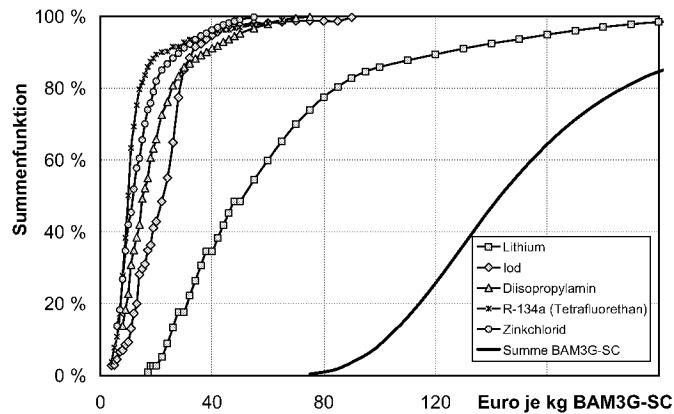


Bild 6.30 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von BAM3G-SC; Anteile wichtiger Edukte

Die Summenfunktion liegt größtenteils im Intervall zwischen 100 und 200 Euro je kg Ionomer. Sie berücksichtigt die Beiträge aller zuvor erwähnten Ausgangschemikalien. Diejenigen mit dem höchsten Anteil an der Gesamtsumme sind in Bild 6.30 zusätzlich mit aufgeführt.

Es dominiert der Verbrauch an elementarem Lithium, das zur direkten Synthese des LDAs benötigt wird. Das Alkalimetall stellt im arithmetischen Mittel über 50 % der Eduktkosten. Ihm folgen der Analyse zufolge die Ausgaben für Iod, das wie Lithium im Endprodukt dann nicht mehr enthalten ist. Jeweils mit 10 bis 20 Euro pro kg Produkt tragen auch Diisopropylamin (DIPA), das fluoridierte Ethan R-134a sowie Zinkchlorid zusätzlich zu den Kosten des sulfonierten Polymers bei. Triethylphosphat, der Polymerisationsemulgator sowie die Halogene Fluor und Chlor sind für Kostenanteile zwischen 1 und 5 % verantwortlich; die übrigen Chemikalien besitzen Beiträge unter 1 % der gesamten Materialkosten, wie sie Bild 6.30 zeigt. Eine entsprechende Grafik für HT, den anderen BAM3G-Polymerotyp, zeigt folgendes Ergebnis :

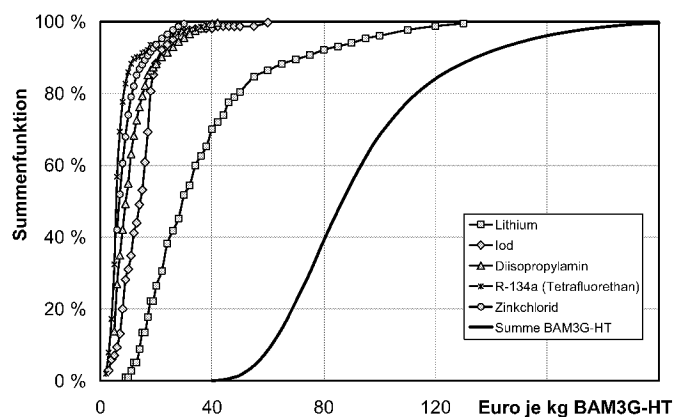


Bild 6.31 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von BAM3G-HT; Anteile wichtiger Edukte

Die Summenfunktion liegt hier zwischen 60 und 140 Euro je kg Ionomer und damit relativ zum sulfonierten Copolymer (SC) deutlich niedriger. Dies liegt im Wesentlichen daran, dass Ausbeuteverluste von 15 und 25 %, die den Quellen zufolge beim SC während der Polymerisation und der Sulfonierung entstehen [159, Ex. 7 und 17], im hydrolysierten Terpolymer (HT) nicht auftreten [149, Ex. 2 und 4].

Nach wie vor stellt das Lithiummetall mit knapp 50 % der Materialkosten einen dominierenden Anteil vor Beiträgen weiterer Chemikalien zwischen 10 und 20 Euro je kg BAM3G-HT-Ionomer (Iod, DIPA, R-134a, ZnCl_2 und $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_5$). Teure Ausgangsstoffe wie Fluor oder Dodecylamin gehen in so geringen Mengen ein, dass sie nur noch einen Anteil von jeweils etwa 2 % der Materialkosten stellen. Entsorgungskosten sind dabei bisher noch nicht berücksichtigt.

6.2.4 BAM-3G – Investkosten der Produktionsanlagen

Wie bereits für das Nafion®-Polymer geschehen, so soll im Folgenden auch für beiden Ionomer-varianten BAM3G-SC und BAM3G-HT der Fertigungskostenanteil für eine Großanlage mit etwa 2.500 Tonnen Jahresproduktion abgeschätzt werden (Seiten 93 und 103). Analog dient zunächst wieder die Bilanzierung der Synthesekette als Grundlage, um die Mengenströme an Chemikalien zu bestimmen, die die einzelnen Baugruppen der Chemieanlage passieren. Bild 6.32 zeigt die sich daraus für BAM3G-SC ergebenden Stoffströme je Stunde in den einzelnen Anlagenteilen. Zur Vereinfachung beginnt diese Darstellung bereits mit den aromatischen Bausteinen Benzotrifluorid (aus Benzol, Chlor und HF) und Iodbenzol (aus Benzol, Iod und Sauerstoff). Die entsprechenden Mengenbilanzierungen mit Quellenangaben enthält der Anhang 8.10 (Seite 169 pp.).

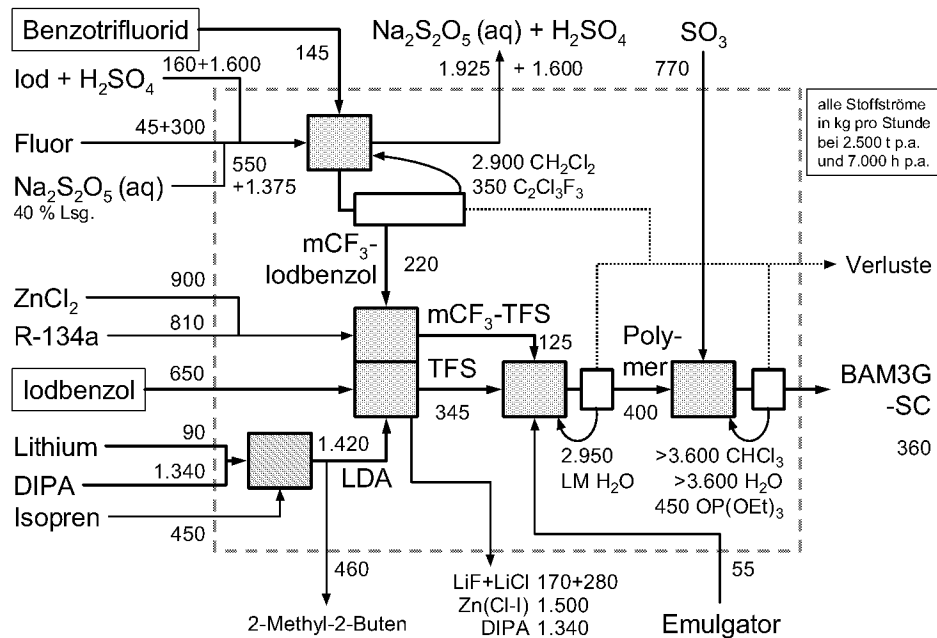


Bild 6.32 : BAM3G - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion (SC)

Im oberen Teil erfolgt zunächst die Synthese von meta-Trifluormethyl-Iodobenzol. Unten links ist die Bereitstellung des Lithium-Diisopropylamins dargestellt, das zur Trifluorvinylierung mit Iodobenzol beziehungsweise dessen Trifluormethylderivat in Kontakt gebracht wird.

Polymerisation und nachfolgende Sulfonierung sind zumindest den zugänglichen Quellen zufolge mit Verlusten um 20 bis 25 % verbunden, was die benötigten Mengen an Intermediaten, Edukten und Lösungsmitteln erhöht und zu hohen Chemikalienströmen führt, die einer gesonderten Entsorgung bedürfen. Der hohe Einsatz an halogenierten organischen Lösungsmitteln, die in mehreren Kreisläufen recycelt werden müssen, erhöht sowohl die Größe der Anlagenkomponenten als auch die Gesamtkomplexität der Produktion.

Diisopropylamin (DIPA) könnte nach der Trifluorvinylierung wieder zurückgewonnen werden. Dies würde die Materialkosten im Polymer, wie zuvor gezeigt, um rund 10 % senken, wäre aber mit einem Zusatzmodul in der Anlage verbunden.

Ungefähre Reaktionsdauern in den einzelnen Stufen enthalten bereits die gezeigten Verfahrensfliessbilder. Die Summation führt auf eine theoretische Gesamtdurchlaufzeit von rund 100 Stunden (Iodierung von Benzotrifluorid ~ 17 h, Trifluorvinylierung ~ 1 h, Polymerisation ~ 74 h, Sulfonierung ~ 5 h).

Für die aus drei verschiedenen Monomeren bestehende Polymervariante BAM3G-HT ergibt sich gemäß Bild 6.33 ein relativ zu BAM3G-SC etwas verändertes Reaktionsschema :

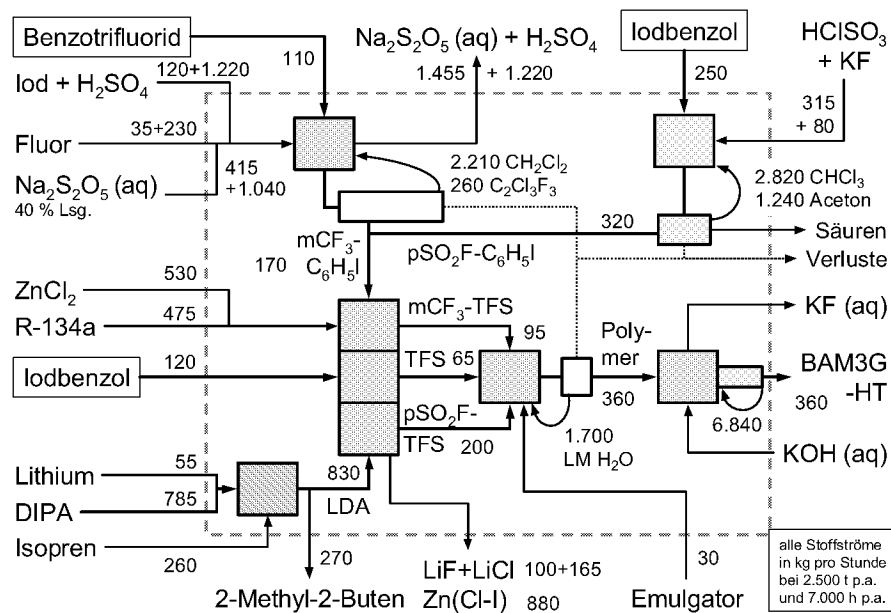


Bild 6.33 : BAM3G - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion (HT)

Oben rechts ist die zusätzliche Einheit zur Herstellung von para-Sulfonylfluorid-Iodobenzol aus Iodobenzol, Chlorsulfonsäure und Kaliumfluorid zu erkennen (Bild 6.20). Auch sie ist mit einem beträchtlichen Umlauf an Chloroform und Aceton verbunden, sofern sich das Verhältnis von Rektanden zu Lösungsmittelmenge relativ zu den Angaben im Patent nicht deutlich reduzieren lässt [149, Ex. 1]. Als Kuppelprodukte entstehen pro Stunde etwa 45 kg HCl und 120 kg H₂SO₄.

Die Sulfonierungsstufe entfällt. An ihre Stelle tritt eine alkalische Hydrolyse der Polymermembran mit KOH, wie in Bild 6.27 gezeigt. Die den Quellen zufolge nahezu quantitativen Ausbeuten bei Polymerisation und Hydrolyse führen im Fall des HT auf einen deutlich niedrigeren Bedarf an den drei Monomeren, was die Gesamtanlage etwa 25 % kleiner als bei der SC-Variante ausfallen lässt.

Die Reaktionsdauer für die Synthese des zusätzlichen Monomers beträgt rund 8 Stunden, die alkalische Hydrolyse laut Quellenangaben etwa 16 Stunden. Dadurch steigt die Gesamtverweilzeit auf ~ 120 Stunden an. Der geschwindigkeitsbestimmende Schritt bleibt auch hier die mit 72 Stunden bezifferte Polymerisationsreaktion in wässriger Lösung.

In Analogie zu Bild 6.17, das Ergebnisse für den Gesamt-Kapitalbedarf einer Nafion®-Anlage zeigt, ist in den beiden folgenden Diagrammen die gleiche Größe für BAM3G-SC und -HT aufgetragen. Prinzipiell treffen die Aussagen für Nafion® auch hier zu, allerdings berechnet STALLWORTHY für Ballard etwa 20 % niedrigere Werte (80 statt 100 Mio. US-\$), TAYLOR jedoch 25 % höhere Werte (100 statt 80 Mio. US-\$) als für Nafion®.

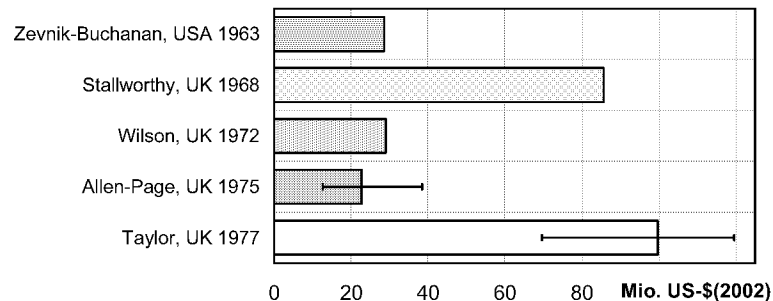


Bild 6.34 : BAM3G-SC - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkul. Zins)

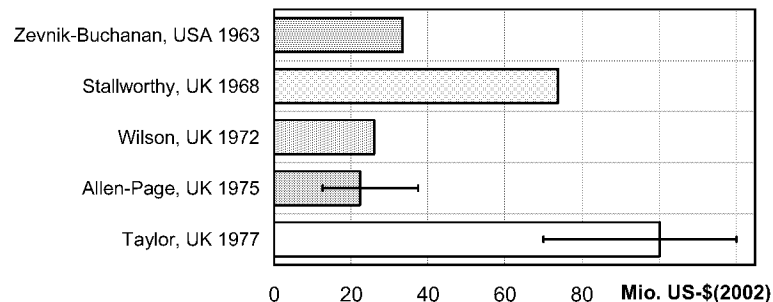


Bild 6.35 : BAM3G-HT - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkul. Zins)

In Anbetracht der möglichen Ungenauigkeiten bei einer Abschätzung auf Basis empirischer Methoden lässt sich im Anlageninvest kein signifikanter Unterschied zwischen den beiden Varianten SC und HT feststellen. Die bei HT entfallende Sulfonierungsanlage wird durch den Bedarf von para-Fluorsulfonyl-TFS als drittem Monomer wieder kompensiert.

Eine vergleichende Diskussion der Fertigungskosten mit den anderen drei Polymertypen erfolgt in Abschnitt 6.5 (Seite 134). Daher geht das folgende Unterkapitel nun zur Analyse der Herstellung von sulfoniertem Poly-Ether-Ether-Keton über.

6.3 Sulfoniertes Polyetherketon (PEEK)

Bei der Erwähnung der Polyetherketone (PE_mK_n) in Kapitel 2.2.3 kam die derzeitige Marktsituation bereits zur Sprache (Seite 20). Das fertige Polymer stellt ein fluorfreies Material dar, dessen Hauptkette aus Benzolringen mit alternierenden -O- und -CO- Brückengliedern besteht. Es wird erst nach der Polyreaktion funktionalisiert, wobei das Makromolekül über die Sulfonierung SO_3H -Gruppen und somit protonenleitende Eigenschaften erhält [30].

6.3.1 PEEK – Darstellung der chemischen Synthesekette

Der Kunststoff entsteht aus der Polykondensation des bifunktionalen Hydrochinons mit einem bifunktionalen fluorhaltigen Monomer [163, 164]. Durch die Kopplung der beiden unterschiedlichen funktionellen Gruppen entsteht keine statistische, sondern eine klar alternierende Anordnung der beiden Monomere :

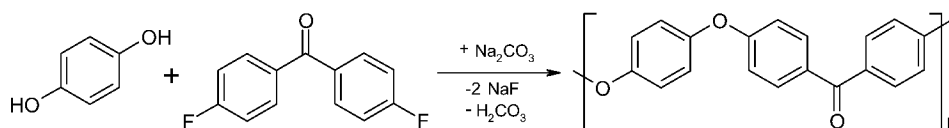


Bild 6.36 : PEEK - Polykondensation aus Hydrochinon und 4,4'-Difluorbenzophenon (DFB)

Hydrochinon ist eine gängige Basischemikalie der chemischen Industrie. Das Co-Monomer DFB muss erst aus Methylen-Dianilin (MDA) synthetisiert werden :

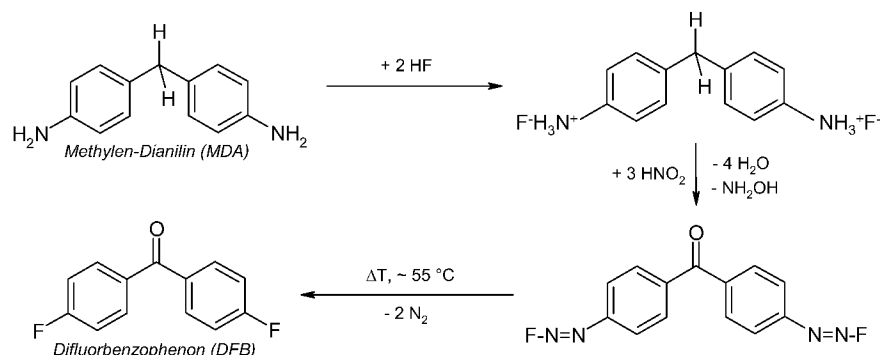


Bild 6.37 : PEEK - Synthese des Co-Monomers 4,4'-Difluorbenzophenon (DFB) [165]

MDA ist ein Basisstoff für die Polyurethanherstellung und wird dort in Form des Diisocyanats in großen Mengen eingesetzt. EUROSTAT beziffert den EU-Markt der verkauften Isocyanate mit rund 860.000 Tonnen p.a. (2000). Etwa 40.000 Tonnen werden importiert, und knapp 200.000 Tonnen verlassen die EU als Weltmarktabsatz*.

Die für die gezeigte Diazotierungsreaktion eingesetzte salpetrige Säure bildet sich *in situ* aus NaNO_2 und dem vorhandenen HF, wobei als Nebenprodukt das Alkalifluorid entsteht. Das Intermediat Hydroxylamin NH_2OH ist instabil. Es zerfällt unter Disproportionierung zu Ammonium-

* Aufgrund des geringeren Molekulargewichts sind die Tonnagen für MDA um gut 20 % niedriger.

fluorid, Stickstoff und Distickstoffoxid (N_2O). Zudem kann sich mit weiterem HNO_2 direkt N_2O (oder NO) und Wasser bilden [166, p. 704]. Die Stickoxidbildung erwähnt eine neue Quelle mit alternativem Syntheseweg für DFB als einen Nachteil des klassischen Verfahrens [167].

Ein Vorteil der Reaktion ist es aber, dass die Reaktionsschritte in Bild 6.37 simultan ablaufen, weil HNO_2 gleichzeitig die Ammoniumfluoridgruppen diazotiert und die Oxidation des zentralen Kohlenstoffatoms vornimmt.

Die Funktionalisierung zum Protonenleiter geschieht nach Abschluss der Polykondensation. PEEK-Pulver wird mit konzentrierter Schwefelsäure in Kontakt gebracht, wodurch im Ring zwischen den beiden Etherbrücken eine Sulfonierung eintritt, deren Häufigkeit im gesamten Makromolekül sich durch Reaktionstemperatur und Kontaktzeit steuern lässt [30].

Ein Gießprozess stellt die Membran aus sulfoniertem PEEK her, das zuvor in NMP* gelöst wurde. Durch Verdampfen des Lösungsmittels bei $\sim 200^\circ\text{C}$ entstehen PEEK-Membranen, in die optional auch Trägergewebe oder Füllstoffe eingearbeitet sein können.

6.3.2 PEEK – Verfahrenstechnische Umsetzung

Im folgenden Teil werden die Teilschritte der Synthese kurz erklärt und mit den Informationen versehen, die aus der Bewertung der entsprechenden Patente hervorgehen. Meist liefern diese nur Teilinformationen, sodass auf Basis der verfügbaren Angaben zu Reaktionsbedingungen, Umsatzgraden, Ausbeuten und dergleichen im Bedarfsfall weitere Annahmen zu treffen sind. In der Regel enthalten die Dokumente mehrere Fallbeispiele mit variierten Ausgangszuständen, aus denen jeweils das zielführendste im Hinblick auf eine hohe Ausbeute oder Produktqualität für die Analyse ausgewählt worden ist. Bild 6.38 zeigt eine mögliche anlagentechnische Umsetzung einer Synthese von Difluorbenzophenon, wie sie Anfang der 80er Jahre in einem Patent laborchemisch beschrieben wurde [165].

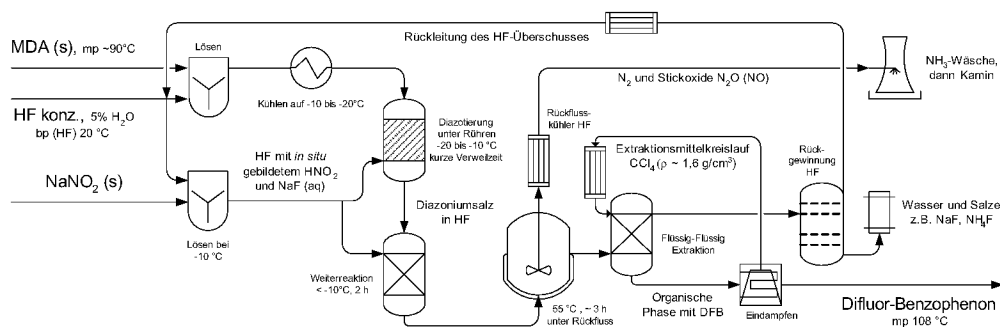


Bild 6.38 : PEEK - Synthese de Co-Monomers DFB auf der Basis von MDA, nach [165]

Die Edukte MDA und Natriumnitrit werden separat jeweils in hochkonzentrierter Fluss-Säure gelöst, wobei sich aus NaNO_2 bereits salpetrige Säure bildet. In zwei Schritten kommt sie dann mit MDA bei unter -10°C in Kontakt, ehe dann bei 50 bis 60°C im Rückfluss von kondensierendem HF das DFB unter Gasaustritt gebildet wird. Das organische Produkt wird in einem Kreislauf von Tetrachlorkohlenstoff extrahiert und eingedampft.

* N-Methyl-Pyrrolidon (gängiges Lösungsmittel)

Während der Reaktionen reichert sich die Fluss-Säure immer mehr mit gebildetem H_2O an, sodass der zu rezyklierende Fluorwasserstoff am Ende destillativ von Wasser und gelösten Salzen befreit werden muss, ehe er eingangs wieder in hochkonzentrierter Form verwendbar ist. Dies ist problemlos möglich, da sich HF und H_2O bei hohen HF-Konzentrationen in ihrem Siedeverhalten stark unterscheiden und erst bei knapp 40 Vol.-% HF ein Azeotrop bilden [168]. Stickoxide, die während der Diazotierung entstehen, müssen analog zur Rauchgasentstickung bei Kohlekraftwerken durch eine Ammoniakwäsche zu Stickstoff und Wasser umgesetzt werden.

Die industrielle Polykondensation der PEEK-Herstellung entwickelte sich während der 80er-Jahre [163, 164]. Sie läuft unter erhöhter Temperatur im Lösungsmittel Diphenylsulfon (DPS) ab, das bei 125 °C schmilzt und bei 380 °C siedet.

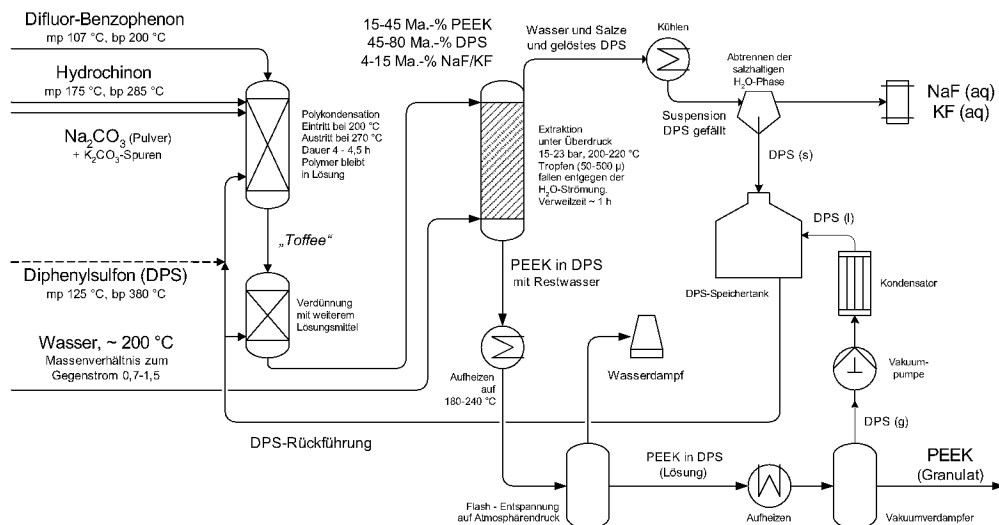


Bild 6.39 : PEEK - Polykondensation aus Difluorbenzophenon und Hydrochinon, nach [164]

Die Polykondensationsstufe beginnt zunächst mit der Mischung von Reaktanden und Lösungsmittel. Die Ausgangstemperatur der Lösung liegt bei über 200 °C; am Ende der Reaktion verlässt das zähe Gemisch (engl. *Toffee*) den Reaktor mit knapp 300 °C. Nach einer Verdünnung mit weiterem Diphenylsulfon erfolgt in der Kontaktkolonne bei über 200 °C die Gegenstromextraktion mit entsprechend heißem Wasser unter einem Druck von 15 bis 23 bar. Die hydrophile Phase übernimmt die im Toffee enthaltenen Ionen, vor allem die der entstehenden Alkalifluoride. Hierbei mitgezogenes DPS fällt nach Abkühlung aus und lässt sich zum Verbleib im Kreislauf abtrennen.

Das PEEK-Polymer verbleibt im organischen Lösungsmittel und verlässt den Sumpf der Kolonne mit einem geringen Gehalt an Restwasser, das in einem Flash infolge der Druckabsenkung verdampft. Abschließend trennt ein Vakuumverdampfer das DPS vom Produkt, um es in den Speichertank für das Lösungsmittel zurückzuführen. Von dort aus kann es im Reaktor der Polyreaktion erneut verwendet werden.

Gute thermische Isolierung sorgt für geringe Wärmeverluste der Reaktoren. Jedoch müssen sowohl die Ausgangsstoffe als auch das Extraktionswasser aufgeheizt werden, was erhöhte Energiekosten zur Folge hat. Die an den Flüssigphasen zu leistende Kompressionsarbeit ist dabei vergleichsweise gering, jedoch steigt der energetische Aufwand bei der DPS-Entfernung weiter an, da dort der gesamte Lösungsmittelstrom den Phasenübergang durchführen muss (DPS-Siedepunkt: 380 °C). Dies kann nicht ohne Einsatz thermischer und elektrischer Energie für die Vakuumverdampfung geschehen.

Die nächste Abbildung stellt die abschließenden Prozessschritte Sulfonierung des Polymers und Formgebung via Gießen einer sPEEK-Lösung in N-Methyl-Pyrrolidon (NMP) dar.

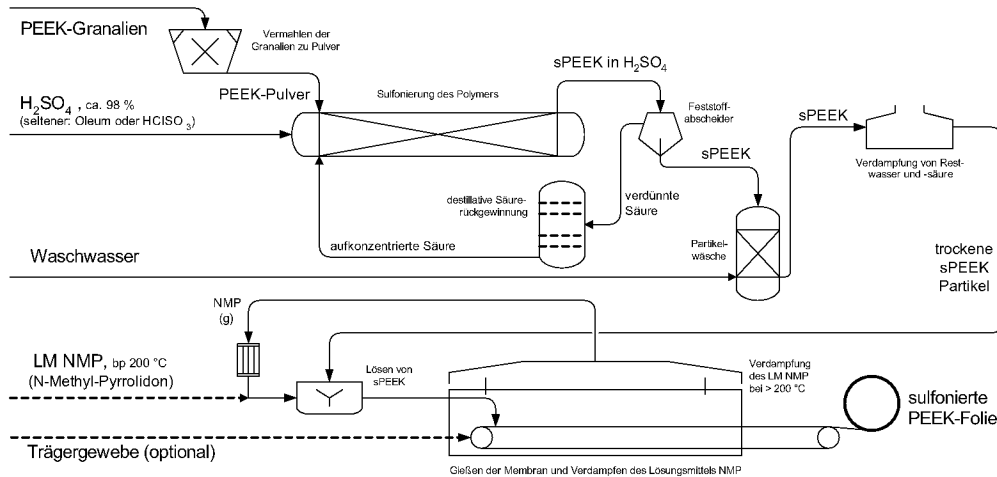


Bild 6.40 : PEEK - Sulfonierung und Gießen einer Membran aus der PEEK-NMP-Lösung

Die Granalien aus der Polymersynthese passieren zunächst einen Mahlschritt, sodass das PEEK am Eintritt in den Sulfonierungsreaktor als feines Pulver mit der konzentrierten Schwefelsäure in Kontakt kommt. Sie sollte wenige Prozent Wasser enthalten, da es sonst zu Ketten-trennung und Quervernetzung kommen kann [30, p. 20].

Der Sulfonierungsgrad DS gibt den Anteil der sulfonierten Wiederholungseinheiten bezogen auf deren Gesamtzahl an. Um eine möglichst hohe Protonenleitfähigkeit zu erreichen, sollte DS zwar hoch sein, jedoch beginnt sulfoniertes PEEK (sPEEK) ab DS ~ 70 %, sich in Methanol zu lösen. Bei vollständiger Sulfonierung (DS = 1) ist sPEEK in heißem Wasser löslich und somit nicht mehr als Ionermembran verwendbar [30, p. 21].

Die für einen bestimmten DS-Wert benötigte Reaktionsdauer hängt von der Säurekonzentration, der Menge an Polymer pro Säuremenge und vor allem von der Temperatur ab, wie Tabelle 6.3 zeigt. Für detaillierte Studien der Kinetik siehe [169].

Tabelle 6.3 : Reaktionsdauern für PEEK-Sulfonierungen

Temperatur	25 °C	35 °C	55 °C	75 °C	
DS = 45 %	24	8	2	0,5	Stunden
DS = 70 %	100	28	4	1	Stunden
Lit.	[30, Fig. 1]	[169, Fig. 8]	[169, Fig. 8]	[169, Fig. 8]	

Die Reaktion führt zu einer Verdünnung der Schwefelsäure, die sich aber gut unter Atmosphärendruck aufkonzentrieren lässt, weil Tau- und Siedeverhalten von H_2SO_4 und Wasser stark differieren und zudem kein Azeotrop bilden [170, Fig. 5].

Nach einfacher Wäsche und Trocknung nimmt ein im Kreislauf geführtes Lösungsmittel wie N-Methylpyrrolidon (NMP) das sPEEK auf. Ein umlaufendes Band dient als Träger für die auf ihm vergossene Lösung, aus der im Trocknungsprozess das NMP wieder entfernt wird. Ohne große Schwierigkeiten lassen sich bei diesem Gießprozess optional Füllstoffe zur Erhöhung der ionischen Leitfähigkeit oder mechanische Trägergewebe einarbeiten.

6.3.3 PEEK – Mengenbilanzierung und Materialkostenanalyse

Analog zur Diskussion der anderen Ionomere sind auch hier genaue Bilanzierungen in Anhang 8.9 enthalten. Tabelle 6.4 zeigt das summarische Endergebnis der Patentanalysen, die abgesehen von der DFB-Synthese keine Hinweise auf nennenswerte Verluste an Ausgangsstoffen infolge von Nebenreaktionen geben.

Tabelle 6.4 : PEEK - erforderliche Rohstoffmengen bei einem Sulfonierungsgrad von 70 %

	Hydrochinon	MDA	NaNO_2	HF	Na_2CO_3	H_2SO_4	Summe
mol je mol sPEEK (DS = 70 %)	1,0	1,3	7,2	7,7	1,0	0,7	[-]
kg je kg sPEEK (DS = 70 %)	0,32	0,74	1,4	0,45	0,31	0,20	3,5

Entsprechend der Darstellung in Bild 6.13 zeigt die nächste Abbildung Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die zugehörigen Handelspreise der beteiligten Basischemikalien auf der Grundlage der Datenbank EUROPROMS.

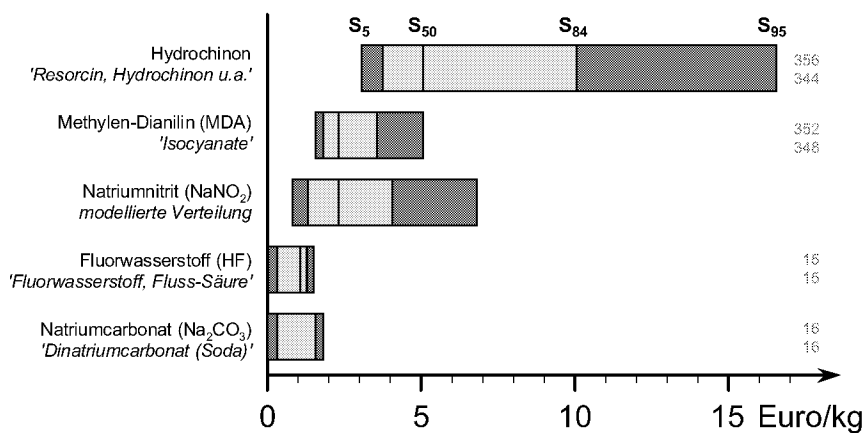


Bild 6.41 : Preise wichtiger PEEK-Chemikalien (Quelle EUROPROMS^{*}, zur Darstellung siehe Bild 4.9)

^{*} Angaben am Ende informieren oben über die Gesamtzahl verfügbarer Datenpunkte in der Datenbank und unten über die Zahl der verwendeten Datenpunkte nach der Konsistenzprüfung (Anhang 8.6)

Wie schon für NaOCl bei der Nafion®-Synthese, so ist auch hier das Natriumnitrit über eine modellierte Verteilung approximiert worden (Seite 100). Der Grund hierfür ist, dass die Datenbank in einer ähnlichen Gruppe ("Nitrite", 24.15.20.30) nur drei Werte bereitstellt, was für eine statistische Auswertung keine ausreichende Grundgesamtheit ist. Die Zahlenwerte selbst (0,25 / 1,5 und 2,5 Euro pro kg NaNO_2) würden sich aber gut in den Zielbereich der erstellten Modellverteilung einfügen.

Eine Visualisierung des Monte-Carlo-Modells (vergleichbar mit Bild 6.14) sei an dieser Stelle aus Gründen der Übersicht nicht nochmals für PEEK wiederholt. Das Ergebnis der MC-Analyse aus 60.000 statistischen Experimenten, die Massenbilanz und Handelspreise wie dargestellt kombinieren, zeigt Bild 6.42.

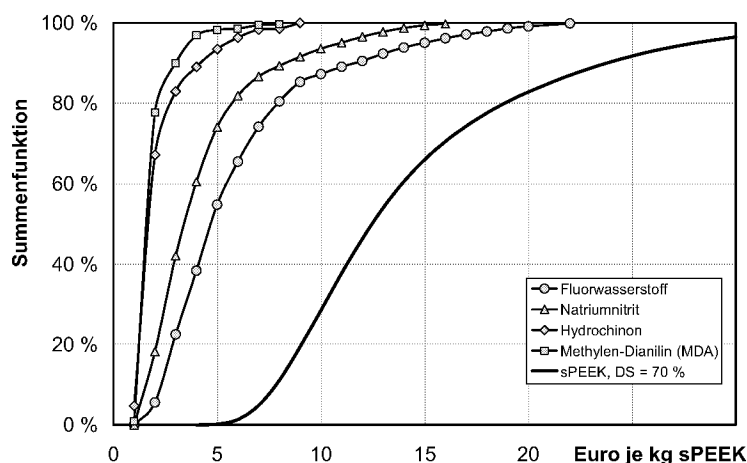


Bild 6.42 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von sPEEK und Anteile der Edukte

Die Materialkosten liegen unter 30 Euro je kg sPEEK und entsprechen praktisch denen des un-sulfonylierten PEEK. Hauptfaktoren sind Fluorwasserstoff und Natriumnitrit, welche beide in beachtlicher Menge für die Diazotierung benötigt werden, Hydrochinon als eines der beiden Monomere sowie MDA, der Ausgangsstoff zur Synthese des Intermediats DFB. Die Beiträge der anderen in Tabelle 6.4 erwähnten Chemikalien Na_2CO_3 und H_2SO_4 sind mit maximal 53 und 70 Eurocent pro kg sPEEK noch geringer. Sie sind daher in der obigen Abbildung nicht separat aufgeführt, in der Kurve für das sulfonierte Polymer aber enthalten.

6.3.4 PEEK – Investkosten der Produktionsanlage

Bild 6.43 stellt das Anlagenkonzept auf Basis der Patentanalyse dar. Besonders auffallend ist der sehr hohe Rückführstrom an reinem Fluorwasserstoff. Er wird benötigt, um den Anteil des sich kontinuierlich bildenden Wassers so gering wie möglich zu halten, was zwei Gründe hat :

1. Stahl erleidet oberhalb von etwa 30 Ma.-% Wasser in der Fluss-Säure massiven Schaden durch Korrosion. Für wasserfreies HF können C-Stähle bis etwa 100 °C eingesetzt werden, sofern ihre Oberfläche mit FeF_3 geschützt ist [171].
2. Sobald der Wassergehalt während der Diazotierung höher liegt (zum Beispiel bei 10 oder 15 Ma.-%), sinkt die Ausbeute an Difluorbenzophenon [165, Ex. 1 und 3].

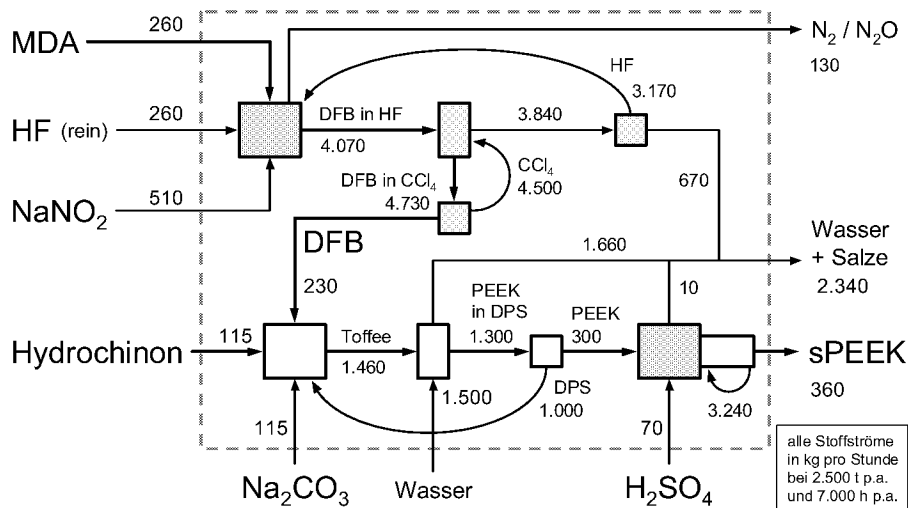


Bild 6.43 : PEEK - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion

Aus dem Produktstrom mit hohem HF-Anteil heraus überführt eine Extraktion mit Tetrachlorkohlenstoff das Produkt DFB in die organische Phase. Das Lösungsmittel verdampft und DFB beginnt gemeinsam mit dem Dialkohol Hydrochinon die Polykondensation in einer Lösung von Diphenylsulfon (Bild 6.39).

In den drei erforderlichen Lösungs- beziehungsweise Extraktionsmittelkreisläufen mit HF, CCl₄ und DPS zirkulieren hohe Stoffmengenströme, die alle durch den Einsatz von Verdampfungswärme aktiv gehalten werden müssen und jeweils spezifische Charakteristika haben: Kohlenstoffstähle sind zwar HF-verträglich, jedoch darf die Strömungsgeschwindigkeit 1,5 m/s nicht überschreiten. Die Produktion von CCl₄ soll bis 2005 eingestellt werden, weswegen hier wohl ein Surrogat zu verwenden ist (Protokoll von Montreal 1987, Zusatzvereinbarung London 1990). DPS siedet bei Atmosphärendruck erst knapp unter 400 °C, weshalb mit der Verdampfung auch vergleichsweise hohe Energieströme verbunden sind.

Die Reaktionsdauern in den Stufen sind im Vergleich zu den anderen Ionomeren gering und betragen in Summe etwa 15 Stunden (DFB-Synthese ~ 5 h, Polykondensation ~ 6 h, Sulfonierung ~ 4 h). Hinzu kommen allerdings noch die Verweilzeiten in Nebenaggregaten.

In Analogie zu Bild 6.17, das auf Seite 104 Ergebnisse für den Gesamt-Kapitalbedarf einer Nafion®-Anlage zeigte, ist im folgenden Diagramm die gleiche Größe für ein zu 70 % sulfoniertes PEEK aufgetragen. Zu beachten ist die andere Skalierung der Abszisse.

Verglichen mit den Ballard-Polymeren sind die Kosten hier in etwa halbiert (STALLWORTHY / TAYLOR) beziehungsweise zumindest um ein Drittel geringer (ZEVNIK UND BUCHANAN / WILSON / ALLEN UND PAGE). Die Relationen der Methoden zueinander sind hier nahezu unverändert.

Eine vergleichende Diskussion der Fertigungskosten mit den übrigen Ionomeren erfolgt in Abschnitt 6.5 (Seite 134). Das folgende Unterkapitel geht der Vollständigkeit wegen zunächst noch auf die Produktion von Phosphorsäure-dotiertem Polybenzimidazol (PBI) ein.

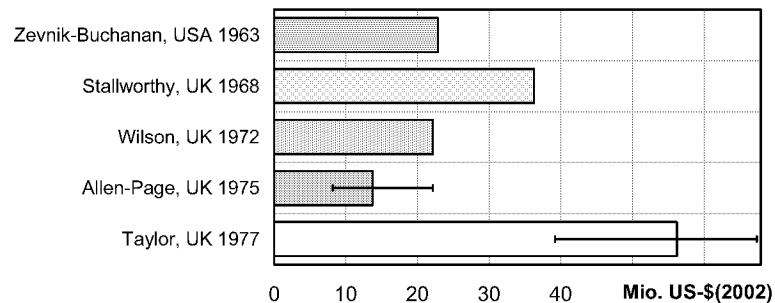


Bild 6.44 : sPEEK - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalk. Zins)

6.4 Phosphorsäure-dotiertes Polybenzimidazol (PBI)

Die technische Einführung erwähnte bereits, dass PBI im Gegensatz zu den übrigen Ionomeren nicht durch kovalent gebundene SO_3H -Gruppen zum Protonenleiter wird, sondern diese Eigenschaft erst durch Einbinden von Phosphorsäure in das Polymer erhält (Seite 20). Am heterozyklischen Teil der Wiederholungseinheit lagern sich mehrere H_3PO_4 -Einheiten an und stellen bei ausreichender Konzentration so ein H^+ -Leitungssystem bereit, und zwar (anders als bei den übrigen Ionomeren) auch ohne enthaltenes Wasser. Polybenzimidazol selbst fungiert zugleich als mechanischer Träger und als Adsorbens der Säure.

6.4.1 PBI – Darstellung der chemischen Synthesekette

Wie die Polyetherketone, so ist auch PBI das Ergebnis einer Polykondensation. Eingesetzt werden die Monomere 3,3',4,4'-Tetraamino-Biphenyl (TAB) und Diphenyl-Isophthalat (DPI) :

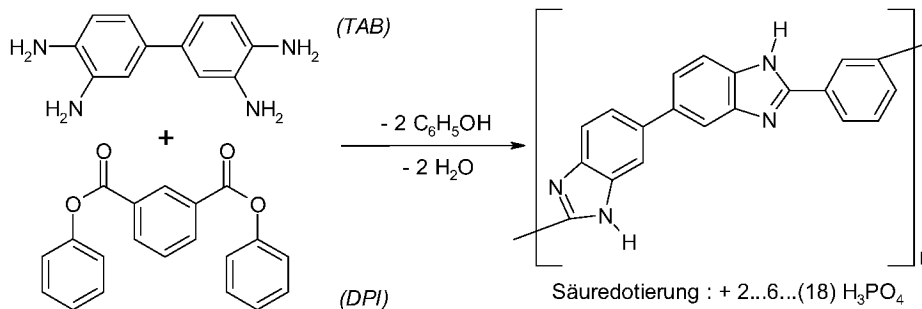


Bild 6.45 : PBI - Polykondensation aus 3,3',4,4'-Tetraamino-Biphenyl und Diphenyl-Isophthalat

Beide Monomere müssen zunächst unabhängig voneinander synthetisiert werden. Ausgangsstoff für TAB ist dabei das 3,3'-Dichlorbenzidin. Die Substanz findet industrielle Anwendung bei der Produktion von Farbstoffpigmenten und wird wie folgt aus o-Nitrochlorbenzol dargestellt :

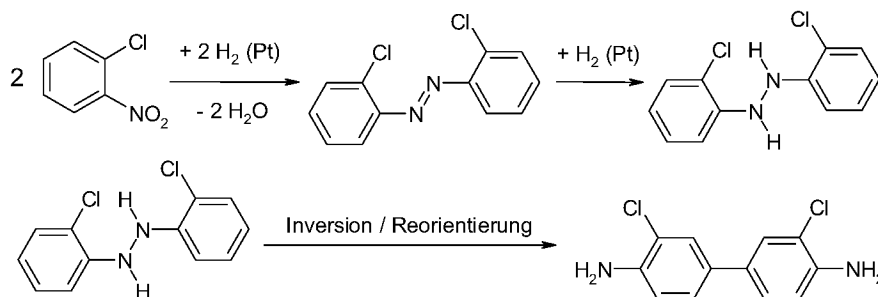


Bild 6.46 : PBI - Synthese von Dichlorbenzidin (DCB), Ausgangsstoff für TAB [172]

Die US-amerikanische Umweltbehörde EPA führt DCB in ihrem *Toxic Release Inventory* als ein *de-minimis*-Karzinogen, das heißt bereits kleinste Mengen wirken kanzerogen [173]. Diese Gefahr wirkt sich aber nur wenig auf die Umwelt aus, da sich die Substanz insbesondere bei Kontakt mit Wasser schnell abbaut (Halbwertszeit etwa 90 Sekunden).

Die Weiterreaktion von DCB zum TAB erfolgt über eine Ammonolyse in Anwesenheit von Kupfer, Kupfer(I)chlorid und Ammoniumchlorid [174, 175] :

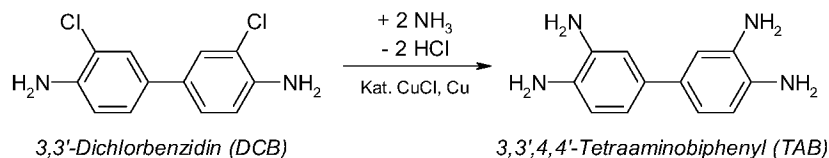


Bild 6.47 : PBI - Synthese des Monomers TAB aus DCB

Der als Co-Monomer fungierende Diaryl-Ester DPI entsteht aus der Reaktion von Isophthalsäure mit Phenol, wie die folgende Gleichung illustriert. Phenol agiert hierbei zugleich als Reagenz, Lösungsmittel der Säure und Trägergas zur Eliminierung des entstehenden Wassers [176]. Dies wirkt sich positiv auf die Produktausbeute aus, da es den Anteil an nur teilweise konvertiertem Monoester verringert.

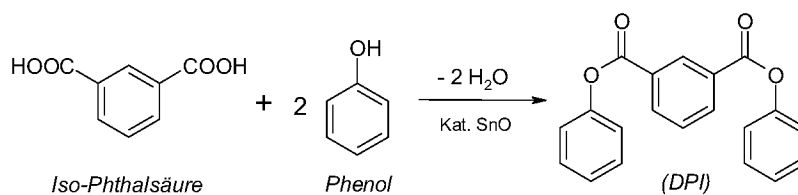


Bild 6.48 : PBI - Synthese des Monomers Diphenyl-Isophthalat (DPI)

Anders als bei PEEK handelt es sich beim Polybenzimidazol um eine fluorfreie Polymersynthese. Dabei ist TAB das schwieriger herzustellende Polymer: Aufgrund seiner Empfindlichkeit gegenüber Sauerstoff müssen die Reaktionen unter Inertgas mit einem O₂-Gehalt < 20 ppm ablaufen. Dies schließt auch die Polykondensation selbst mit ein, wie die Fließbilder der anlagentechnischen Umsetzung der erläuterten Reaktionsschritte zeigt.

6.4.2 PBI – Verfahrenstechnische Umsetzung

Bild 6.49 beschreibt zunächst eine Möglichkeit der kontinuierlichen TAB-Produktion und Aufbereitung auf der Basis neuer Patentveröffentlichungen.

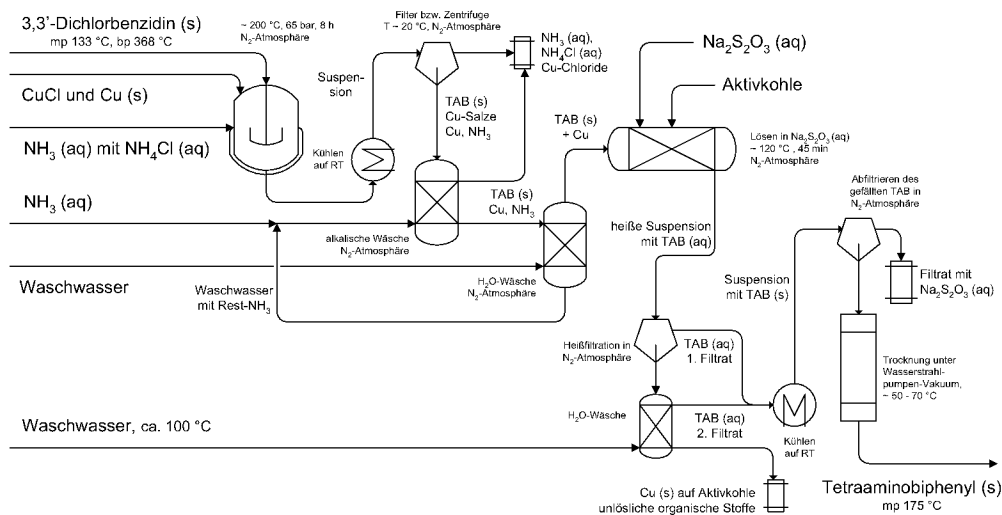


Bild 6.49 : PBI - Produktion und Reinigung des Monomers TAB, nach [174]

Bei der Substituierungsreaktion sorgt zugegebenes Ammoniumchlorid für eine hohe Konzentration an NH_4^+ -Ionen in der Lösung, sodass ausreichend freies NH_3 für die Substitution der Chloratome des DCB verfügbar ist (Prinzip von LE CHÂTELIER). Eine hohe Temperatur beschleunigt die Reaktion, und der erhöhte Druck hält NH_3 in der wässrigen Phase und führt so zu höherem Umsatz [175, col. 1].

Aufgrund der hohen Oxidationsanfälligkeit des TAB müssen seine Darstellung und nachfolgende Reinigungsschritte unter Inertgas (vornehmlich N_2) erfolgen. Nach Ablauf der Reaktion und Abkühlen fällt TAB aus und wird nebst Kupferpulver und Verunreinigungen abfiltriert. Nach ammoniakalischer Wäsche und Reinigung mit Wasser sind Kupferionen und Ammoniak entfernt, sodass TAB nur noch von elementarem Kupferpulver zu reinigen ist. Letzteres wird von Aktivkohle adsorbiert, wobei gleichzeitig zugefügtes Natriumdithionit wiederum für reduzierende Bedingungen während der Wäsche sorgt und damit eine Oxidation von TAB verhindert.

Die kupferbelegte Aktivkohle muss heiß von der Lösung abfiltriert werden, um Verluste durch gefälltes TAB zu verhindern. Hierzu wird auch der Filterkuchen mit heißem Wasser gewaschen und die Filtrate anschließend gemeinsam abgekühlt. Erst hier fällt das reine Tetraaminobiphenyl aus, verlässt als Filterkuchen die Produktion und trennt sich in der Vakuumtrocknung von Restwasser [174, Ex. 1].

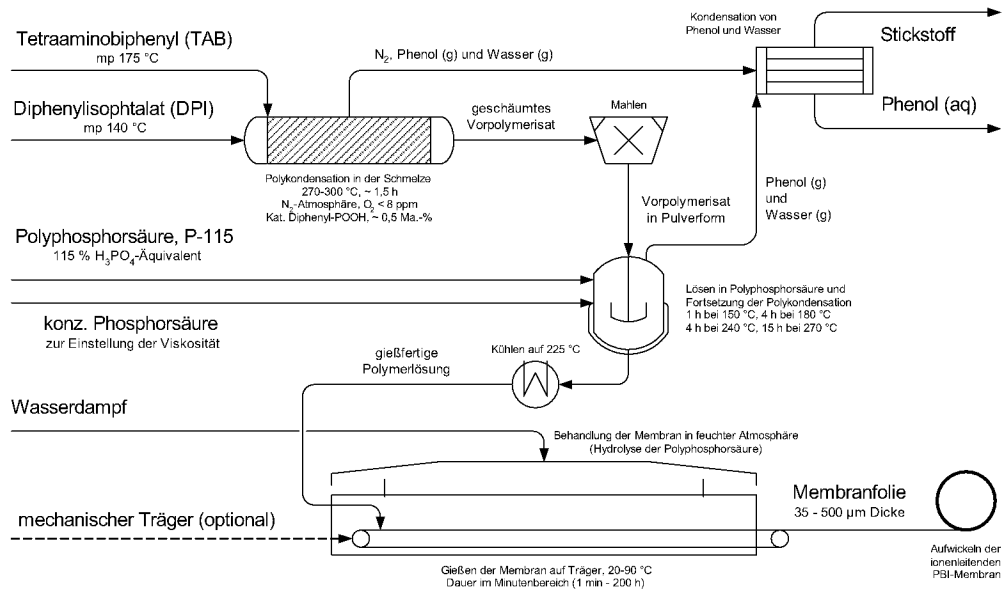


Bild 6.51 : PBI - Polykondensation, Dotierung mit dem Protonenleiter H₃PO₄ und Filmgießen

Während der rund 24 Stunden dauernden Endphase der Polykondensationsreaktion bildet sich laut Patentangaben ein interpenetrierendes Netzwerk zwischen der Polyphosphorsäure einerseits und dem Polybenzimidazol andererseits aus. Dies ermöglicht, einen höheren Anteil an Säure im Bereich der makromolekularen Ketten zu binden, als dies beim reinen Tränken des Polymers in konzentrierter Phosphorsäure der Fall wäre [178].

Über die Temperatur, auf die die Lösung nach Verlassen des Reaktionsraums abkühlt, kann eine Viskosität eingestellt werden, bei der sich die Masse gut zu einem Film gießen lässt. Die Membranausbildung erfolgt auf einer rund 100 °C heißen, inerten Unterlage, von der sich die Membran später leicht trennen lässt. Wie schon beim Gießen der anderen Polymere erwähnt, können in diesem Prozessschritt auch Fasergewebe eingearbeitet werden, die die Membran später mechanisch stabilisieren.

6.4.3 PBI – Mengenbilanzierung und Materialkostenanalyse

Wie für alle anderen bereits diskutierten Membranen enthält Anhang 8.9 eine genaue Bilanzierungsrechnung auf Basis der Angaben in den zitierten Patenten. Tabelle 6.5 zeigt das summarische Endergebnis.

Tabelle 6.5 : PBI - erforderliche Rohstoffmengen für undotiertes Benzimidazol-Polymer

	Isophthal-säure	Phenol	DCB	NH ₃	NH ₄ Cl	Aktiv-kohle	Summe
mol je mol PBI	1,0	2,5	1,1	51	2,2	[-]	[-]
kg je kg PBI	0,55	0,76	0,94	2,8	0,39	0,03	5,5

Die nächste Abbildung zeigt zugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die Handelspreise der benötigten Edukte auf der Grundlage der Datenbank EUROPROMS. Für Isophthalsäure und Dichlorbenzidin sind alternativ Modellverteilungen generiert worden (Seite 100).

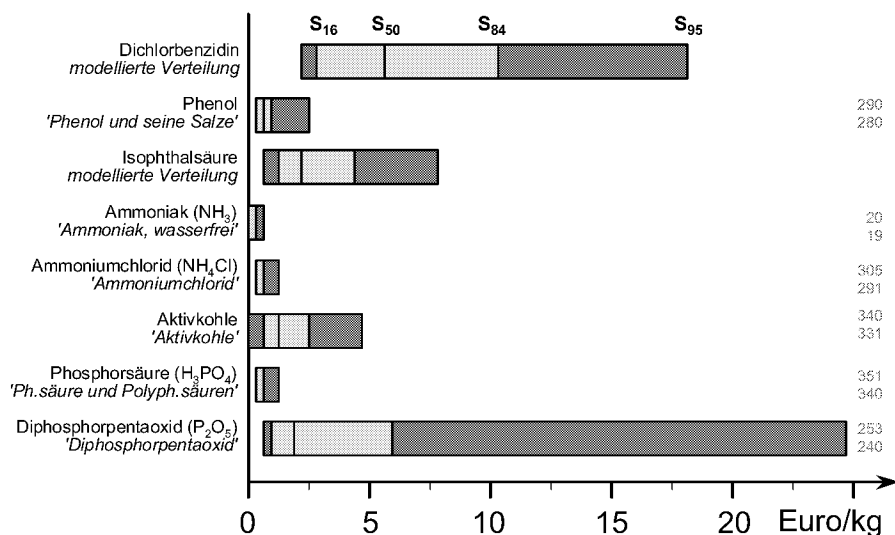


Bild 6.52 : Handelspreise von PBI-Basischemikalien (Quellen: EUROPROMS^{*}, Acros 2002, Merck 2001)

Wie sich gleich zeigen wird, sind die Kosten je kg für undotiertes PBI am höchsten. Durch den Zusatz von preiswerter Phosphorsäure verringern sich die massenspezifischen Kosten des Ionomers merklich. Bereits bei niedrigen Beladungen von beispielsweise 5 mol H₃PO₄ je Wiederholungseinheit PBI stellt die Phosphorsäure über 60 Ma.-% des dotierten Polymers, wie das nächste Diagramm zeigt :

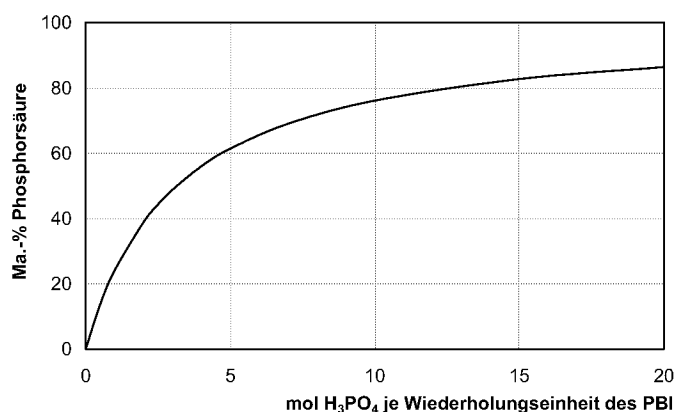


Bild 6.53 : Massenanteil der Phosphorsäure am PBI-Ionomer als Funktion der Dotierung

^{*} Angaben am Ende informieren oben über die Gesamtzahl verfügbarer Datenpunkte in der Datenbank und unten über die Zahl der verwendeten Datenpunkte nach der Konsistenzprüfung (Anhang 8.6)

Aufgrund dieser deutlichen Senkung der Membrankosten durch Dotieren mit H_3PO_4 erfolgt die Bilanzierung der Materialkosten zunächst für das Polybenzimidazol (PBI) ohne Säure. Das Ergebnis zeigt Bild 6.54 :

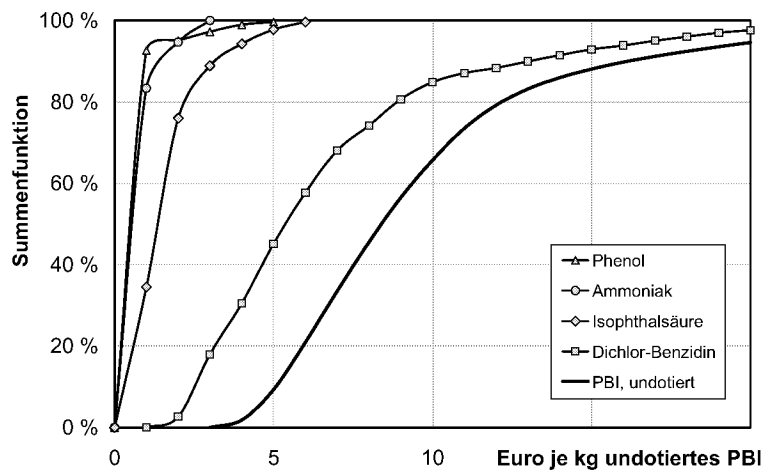


Bild 6.54 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von reinem PBI und Anteile der Edukte

Die Monte-Carlo-Analyse liefert in diesem Fall ein ähnliches Resultat wie im Fall des sulfonierten Polyetherketons. Der Materialkostenanteil an Polybenzimidazol liegt mit hoher Wahrscheinlichkeit unterhalb von 20 Euro je kg Polymer. Den größten Anteil hieran trägt das Dichlorbenzol. Es geht dabei zurück auf eine modellierte Verteilung für Nitrochlorbenzol (Bild 6.46), das mit einer Ausbeute von über 90 % zu DCB umsetzbar ist [172]. Die Firma Merck gibt 2001 einen Preis von 21 Euro je kg der Chemikalie an.

Weitere weniger gewichtige Kostenfaktoren sind Isophthalsäure, Ammoniak und Phenol. Zusätze wie Ammoniumchlorid, Natriumdithionit oder Aktivkohle sind wegen ihres geringen Bedarfs in Bild 6.54 nicht separat aufgeführt.

Tabelle 6.6 zeigt, wie die Säuredotierung zu einem stark verringerten Bedarf an Polymer-Edukten führt. Das entsprechende Beispiel arbeitet allerdings mit einem hohen Säureüberschuss, um eine Sättigung der Polymer-Heterozyklen mit H_3PO_4 zu erreichen [178].

Tabelle 6.6 : PBI - erforderliche Rohstoffmengen für säurehaltiges Polymer

mol H_3PO_4 je mol PBI	Isophthal- säure	Phenol	DCB	NH_3	NH_4Cl	P_2O_5	H_3PO_4 100 %	Summe
undotiert	0,55	0,76	0,94	2,8	0,39	-	-	5,5 kg
15	0,10	0,13	0,16	0,5	0,07	0,84	1,8	3,6 kg

Die Konsequenzen, die sich somit für den Preis je kg Ionomer ergeben, zeigt abschließend Bild 6.55: Die Kurve für den Gesamtsummenverlauf reduziert sich im unteren Wahrscheinlichkeitsbereich auf etwa die Hälfte, während im oberen Bereich die eventuell hohen Kosten für P_2O_5 zum entscheidenden Faktor werden. Deren Verteilung nimmt über S_{80} eine sehr ausladende Gestalt an und dominiert so die oberen Grenzen der Materialkosten von PBI (Bild 6.52 unten).

Der hohe Überschuss an den Säurekomponenten führt desweiteren dazu, dass zum einen die Anteile für Dichlorbenzidin und Phosphorsäure ähnlich hoch sind und außerdem das in Polyphosphorsäure enthaltene Oxid P_2O_5 zur kostenintensivsten Ausgangskemikalie wird.

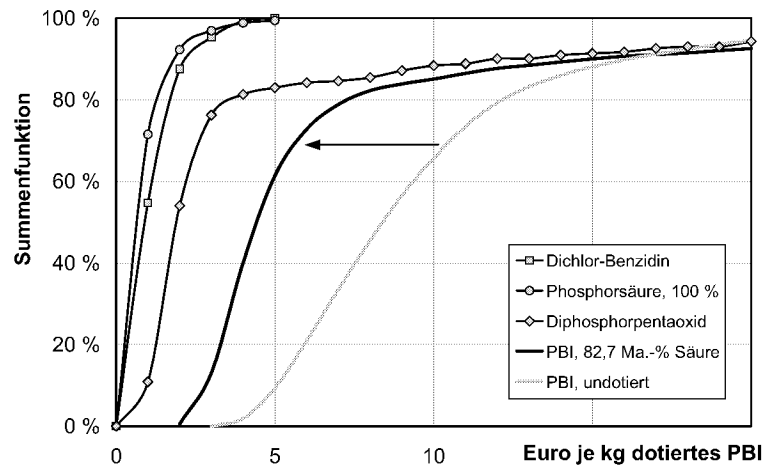


Bild 6.55 : PBI - Materialkosten im ionenleitenden, säuredotierten Polymer

Wesentliches Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation für PBI ist, dass die Materialkosten für Phosphorsäure-dotiertes Polybenzimidazol mit guter Wahrscheinlichkeit (60 %) unter 5 Euro je kg Ionomer und mit hoher Wahrscheinlichkeit (90 %) unter 15 Euro je kg Ionomer liegen.

6.4.4 PBI – Investkosten der Produktionsanlage

Das nachstehende Fließbild zeigt die zu erwartenden Massenströme in einer virtuellen Großanlage zur Produktion. Der Übersicht halber sind die Werte etwas gerundet.

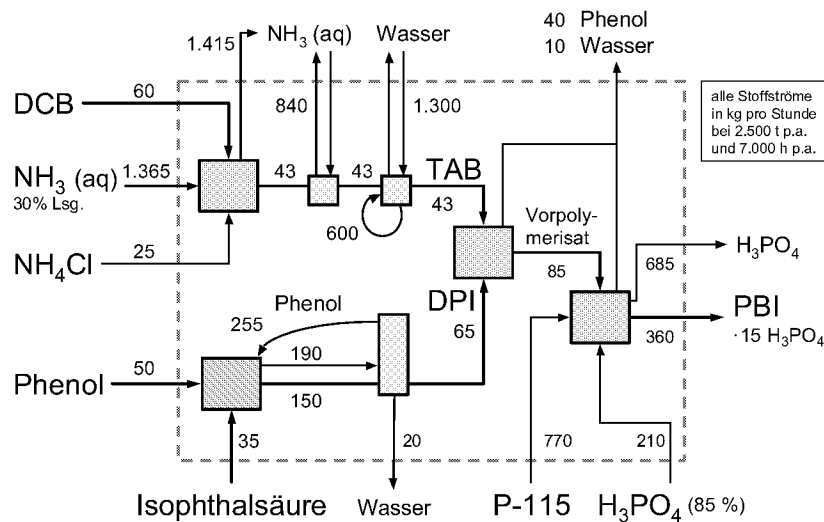


Bild 6.56 : PBI - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion

Das Schutzgas sowie die geringen Mengen weiterer Substanzen wie Aktivkohle, Natriumdithionit und Diphenyl-Phosphinsäure sind hier zur Vereinfachung weggelassen. Die summarische Verweilzeit in den einzelnen Reaktoren beträgt rund 35 bis 40 Stunden (TAB-Synthese ~ 10 h, DPI-Synthese ~ 5 h, Polykondensation und Säuredotierung ~ 23 h).

Die Analyse des direkten Kapitalbedarfs für die PBI-Produktion nach den fünf bekannten Vorgehensweisen zeigt Bild 6.57.

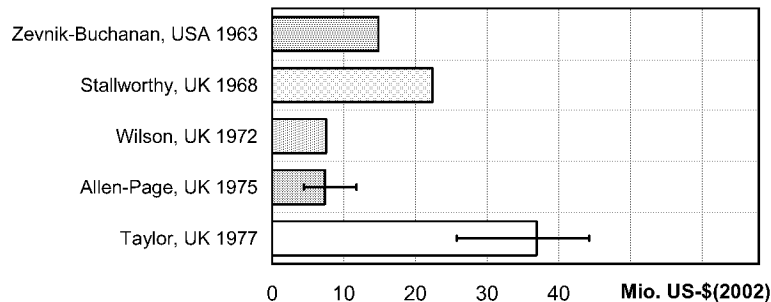


Bild 6.57 : PBI - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkül. Zins)

6.5 Vergleichende Diskussion von Material- und Fertigungskosten

Nachdem die ersten vier Abschnitte dieses Kapitels jeweils aus einer Analyse der einzelnen Polymervarianten bestanden, sollen letztere nun in einem Benchmarking gegeneinander verglichen werden. Wichtig ist es hierbei, die entscheidenden Unterschiede zu erkennen, die in den Kosten für die Basischemikalien sowie für die Fertigungsanlage begründet liegen.

Weitere in Herstell- oder Selbstkosten eingeschlossene Kostenarten werden maßgeblich von firmen- oder standortspezifischen Faktoren dominiert. Dies gilt insbesondere für Material- und Fertigungsgemeinkosten, Sonderkosten der Fertigung, Vertriebskosten und dergleichen. Sie sollen hier im Benchmarking noch unberücksichtigt bleiben, jedoch wird der nachfolgende Abschnitt 6.6 eine exemplarische Aufstellung der Selbstkosten geben, um zum einen die wirtschaftliche Systematik einzuhalten und zum anderen Aussagen zu prinzipiell möglichen Verkaufspreisen von Membranmaterialien treffen zu können.

Vergleich der Materialkosten von Ionomeren

Das gemeinsame Ergebnis aus den bereits einzeln dargestellten Monte-Carlo-Simulationen für die Ionomer-Materialkosten zeigt Bild 6.58 (vergleiche hierzu auch die Darstellungen auf den Seiten 102, 115, 124, 132 und 133).

Die fünf Ionomere lassen sich in drei Gruppen klassifizieren :

- ◆ BAM3G-SC als Polymer mit hohen Materialkosten zwischen 100 und 250 Euro/kg
- ◆ Nafion® 1100 und BAM3G-HT mit mittleren Materialkosten zwischen 50 und 150 Euro/kg
- ◆ sulfoniertes PEEK und säuredotiertes PBI mit geringen Materialkosten unter 30 Euro/kg

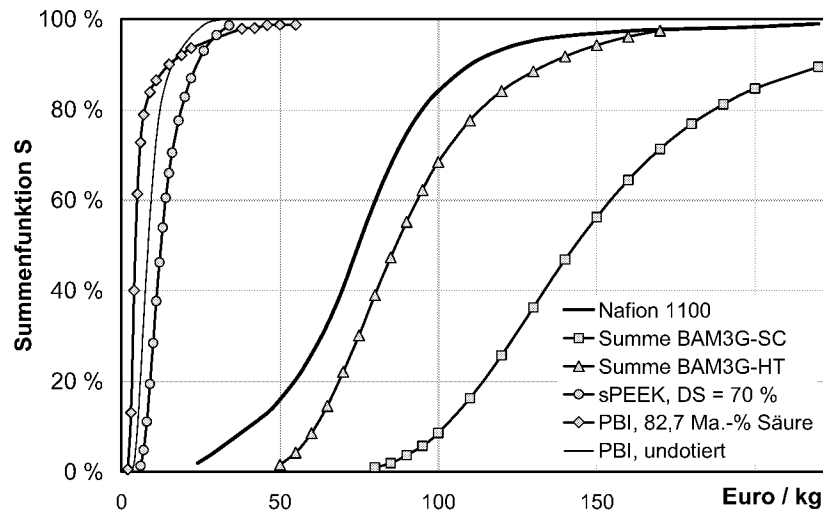


Bild 6.58 : Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten nach der MC-Analyse

Dies ist auch in der Darstellung gemäß der Definition in Bild 4.9 erkennbar, die lediglich Schnitte der Summenfunktionen bei 5, 16, 50, 84 und 90 % enthält :

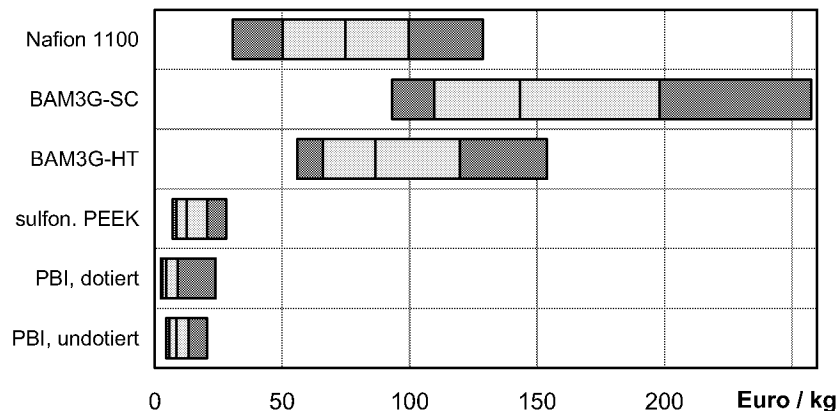


Bild 6.59 : Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen, Schnittdarstellung

Die Materialkosten in Euro je kg Membranpolymer stellen einen ersten Anteil der Herstellkosten K dar, wie sie im Ausdruck für den virtuellen Benchmark B in Gleichung 4.10 (Seite 52) enthalten sind. Nimmt man nun den Faktor Dichte $\cdot$ Dicke (also $M/V \cdot D$) mit hinzu, so führt dies auf die flächenspezifischen Materialkosten der Membran. Der Flächennutzungsgrad α ist bei dieser Betrachtung nicht von Belang, da er nicht vom Membranmaterial, sondern dem späteren Stack-design bestimmt wird.

Nafion® besitzt bei einer Dicke von 50 μm ein Flächengewicht von 100 g je m^2 . Nimmt man dieses als Grundlage für die anderen Polymere, so ergeben sich aus Bild 6.59 die flächenspezifischen Materialkosten wie in Bild 6.60 dargestellt.

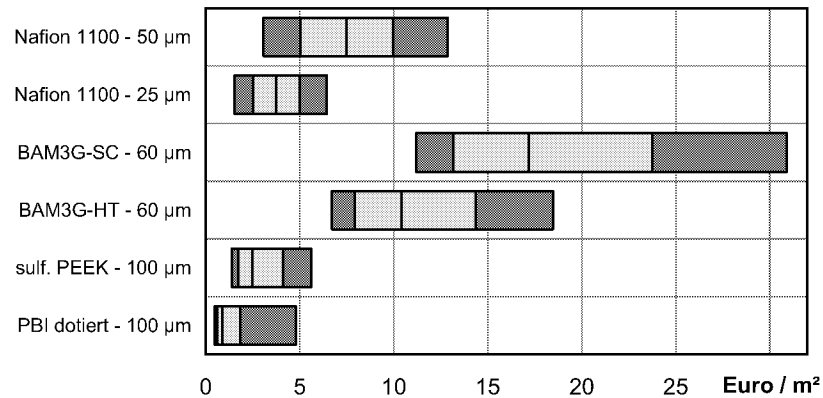


Bild 6.60 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für flächenbezogene Materialkosten (bei 1 Annahme)

Diese Art der Darstellung erfordert die zusätzliche Annahme einer Membrandicke. Viele Laboruntersuchungen deuten darauf hin, dass aus Gründen chemischer oder mechanischer Stabilität fluorfreie arylische Polymere wie PEEK oder PBI eine höhere Foliendicke erfordern, um annähernd vergleichbare Standzeiten wie perfluorierte Materialien zu erreichen. Daher sind für diese Polymere 100 statt 50 µm angesetzt. Ballard-Ionomere haben geringere Äquivalentgewichte als Nafion®, um gute Protonenleitfähigkeiten zu erreichen. Auch hier wird eine etwa 20 % höhere Membrandicke angenommen, um dem Aspekt der Standzeit Rechnung zu tragen. Nafion® 1100 selbst ist inzwischen auch in einer 25 µm dicken Folie kommerziell erhältlich, weswegen auch dieser Fall mit in Bild 6.60 aufgenommen worden ist. Allerdings kann sich dies in einer MEA eventuell nachteilig auf die Lebensdauer auswirken.

Durch die Korrelation mit der Membrandicke verringert sich der Materialkostenvorteil von PEEK und PBI auf die Hälfte. Umgekehrt erhöhen sich die Materialkosten der Ballard-Polymere weiter. Dabei wird auch die Kluft zwischen Nafion® und BAM3G-HT größer.

Die Benchmark-Analyse der Materialkosten von Membranen vervollständigt sich, wenn abschließend auch ein Faktor für die erreichbare flächenbezogene Leistungsdichte berücksichtigt wird, wie dies Gleichung 4.10 für den virtuellen Benchmark vorgibt :

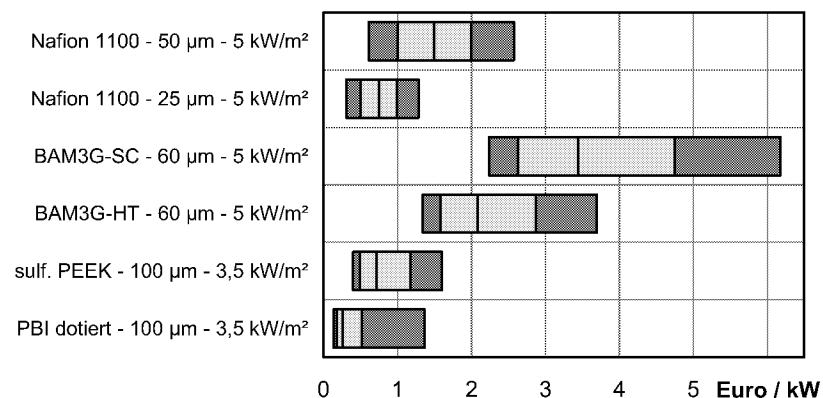


Bild 6.61 : Wahrscheinlichkeitsverteilung für leistungsbezogene Materialkosten (bei 2 Annahmen)

Unabhängige Versuchsergebnisse deuten bisher darauf hin, dass aus mehreren Gründen (die an dieser Stelle der Übersicht wegen nicht detailliert diskutiert werden) die arylischen Polymere keine zu perfluorierten Materialien äquivalente Leistungsdichte erreichen werden - zumindest nicht, wenn zugleich auch ähnliche Lebensdauern L der Membranen gefordert werden. Demzufolge wird angenommen, dass sich der Materialkostenvorteil arylischer Polymere um weitere 30 % gegenüber perfluorierten Ionomeren verringert.

Die angenommenen Leistungsdichten sind Durchschnittswerte, die sich auf die gesamte Produktion beziehen. Entständen zwischen der hergestellten Rollenware und den fertigen Stacks noch merkliche Verluste, so müsste die mittlere Leistungsdichte in Bild 6.61 demgemäß niedriger angesetzt werden. Verluste könnten beispielsweise bei der MEA-Herstellung oder in den eingebauten Zellen durch inaktive Flächen auftreten. Als Abschätzung hierfür kann gelten: Bei maximaler Leistungsdichte wie in Bild 6.61 angenommen, jedoch nur 50 % Restausbeute in Form von aktiver Membranfläche, verdoppeln sich die auf der Abszisse dargestellten Kosten in Euro je kW - bei Nafion® beispielsweise von 1-2 auf 2-4 Euro je Kilowatt elektrischer Leistung.

Wie sich massenbezogene Materialkosten (Bild 6.58) zweier Polymerarten relativ zueinander verhalten, ist wiederum an deren Häufigkeitsverteilung gekoppelt. Eine klare Aussage lässt sich nur mit einer zusätzlichen Monte-Carlo-Analyse unter den fünf Polymeren treffen. Sie vergleicht jeweils die 60.000 statistischen Einzelergebnisse zweier Partner und bildet das Materialkostenverhältnis als deren Quotienten ab. Deren Stichprobenergebnisse fügen sich zu einem Histogramm, wie es ergänzend Bild 6.62 zeigt. Das Materialkostenverhältnis definiert sich zu :

$$MKV_i = \begin{cases} x_i / y_i & \text{für } x_i > y_i \\ -y_i / x_i & \text{für } x_i \leq y_i \end{cases} \quad (\text{Gl. 6.1})$$

Nafion® stellt den Basisfall dar, mit dem die anderen vier Varianten verglichen werden. Als zusätzliche Information ist auch ein Vergleich zwischen sulfoniertem PEEK und säuredotiertem PBI enthalten.

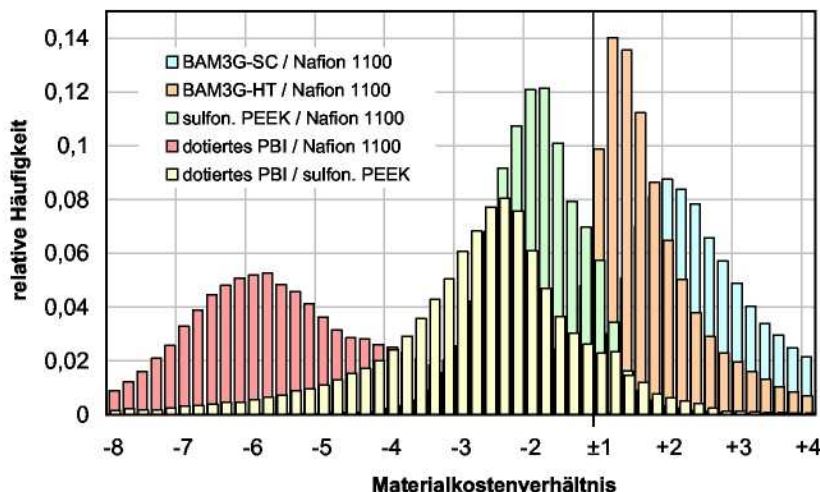


Bild 6.62 : relative Materialkosten verschiedener Paarungen von Polymeren

Der Zahlenwert gibt das Verhältnis der Materialkosten an. Positive Werte entsprechen höheren Materialkosten als bei Nafion®, negative umgekehrt niedrigeren Materialkosten. Die Darstellung lässt erkennen, dass Ballard-Ionomere ähnlich hohe bis etwa dreifache Rohstoffkosten erwarten lassen. Umgekehrt besitzt sulfoniertes PEEK zu Nafion® einen Materialkostenvorteil in ähnlichem Ausmaß. Phosphorsäure-dotiertes PBI wird über einen höheren Rohstoffkostenvorteil verfügen, ungefähr zwischen Faktor 4 und 7.

Vergleich der Fertigungskosten von Ionomeren

Das gemeinsame Ergebnis aus den bereits einzeln dargestellten Investkostenrechnungen für die Ionomer-Produktionsanlagen zeigt das folgende Bild 6.63 (vergleiche hierzu auch die Darstellungen auf den Seiten 104, 118, 126 und 134).

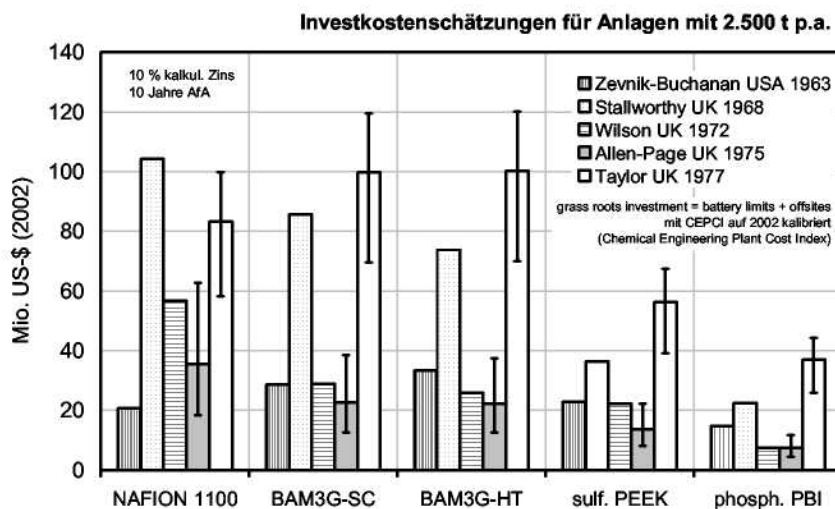


Bild 6.63 : Investkostenschätzungen für Polymer-Produktionsanlagen mit 2.500 t p.a.

Beim Vergleich von Nafion® und Ballard-Polymeren fallen zunächst zwei Aspekte auf :

- ♦ Alle Methoden kommen bei Vergleich von BAM3G-SC und -HT auf ähnliche Ergebnisse. Wie in Abschnitt 6.2.4 näher erläutert, liegt dies an der finanziellen Vergleichbarkeit der Module Sulfonierung (SC) und pSO₂F-TFS-Synthese (HT).
- ♦ Während drei Methoden die Nafion®-Anlage höher beziffern als die Ballard-Produktion, kommt insbesondere TAYLOR für BAM3G auf einen 20 % höheren Wert als bei Nafion®.

Der letztere Aspekt liegt im Unterschied begründet, dass die anderen Methoden sich stark am durchgesetzten Mengenströmen ausrichten. Diese liegen speziell bei der HFP-Epoxidierung besonders hoch. Vergleichbare Ströme in der BAM3G-Darstellung sind rund $\frac{2}{3}$ niedriger.

Im Gegensatz hierzu umfasst der Ansatz von TAYLOR einen breiteren Vektor an Einflussfaktoren, von denen insbesondere die Reaktionsdauer (die nur hier berücksichtigt wird) einen ausgeprägten Einfluss auf das Ergebnis besitzt. Während dokumentierte Verweilzeiten bei Nafion® in Summe etwa 13 Stunden ergeben, betragen diese bei BAM3G ~ 100 Stunden, speziell infolge

der langen Polymerisationsdauer von rund drei Tagen. Diese wichtige Betrachtung fehlt den übrigen Methoden, was die Ergebnisse von TAYLOR eher noch bestärkt.

Die Gegenüberstellung von Nafion®, sulfoniertem PEEK und säuredotiertem PBI lässt bei WILSON und ALLEN / PAGE keine merklichen Auffälligkeiten erkennen. Aufgrund der nochmals geringeren Durchsätze bei der Produktion der fluorfreien Ionomermembranen liegt sPEEK bei etwa der Hälfte von Nafion® und PBI nochmals um einen Faktor 2 niedriger.

Eine solche Fokussierung auf durchgesetzte Ströme führt auch bei STALLWORTHY zu dem starken Gradienten zwischen Nafion® und PEEK beziehungsweise PBI. Dies geht so weit, dass hier für Nafion® 20 % höhere Kosten als mit TAYLOR vorhergesagt werden, während bei PEEK und PBI die Ergebnisse etwa $\frac{1}{3}$ unter den Angaben von TAYLOR liegen. Dessen Ansatz erfasst im Fall des PEEK zum Beispiel das hohe mittlere Temperaturniveau um 250 °C besser - ebenso die besonderen Bedingungen, die die Diazotierungsreaktion oder der Umgang mit großen Mengen an HF und CCl₄ erfordern. Bei PBI führt in gleicher Weise die lange Reaktionsdauer bei TAB-Synthese und Polykondensation zu einer Nivellierung des Kostenunterschiedes relativ zu Nafion®. Dennoch sagt auch TAYLOR für eine Nafion®-Anlage doppelt so hohe Kosten wie für eine Produktion von H₃PO₄-dotiertem PBI voraus.

Interessant ist abschließend die Umlage der Anlagenkosten auf die Menge an produzierter Polymermembran sowie deren Verhältnis zu den eingangs diskutierten Materialkosten. Eine einfache Divisionskalkulation erfordert neben der Vorgabe eines AfA-Wertes und eines mittleren kalkulatorischen Zinssatzes noch zwei weitere Annahmen, und zwar zur Anlagenauslastung und zum Ausschuss. Letztere führen dazu, dass die Auslegungskapazität von 2.500 Tonnen p.a. nicht erreicht, sondern unterschritten wird. Da der zu Beginn von Kapitel 6 beschriebene Fall (Seite 93) bereits von einer Großproduktion ausgeht, seien Werte von 80 % Auslastung und 10 % Ausschuss angenommen. In der Praxis übertreffen solche Produktionen diese Werte eher noch [179]. Bild 6.64 zeigt die Umlage der Anlageninvestition auf die sich dann einstellenden 1.800 Tonnen p.a. an verkäuflichem Produkt.

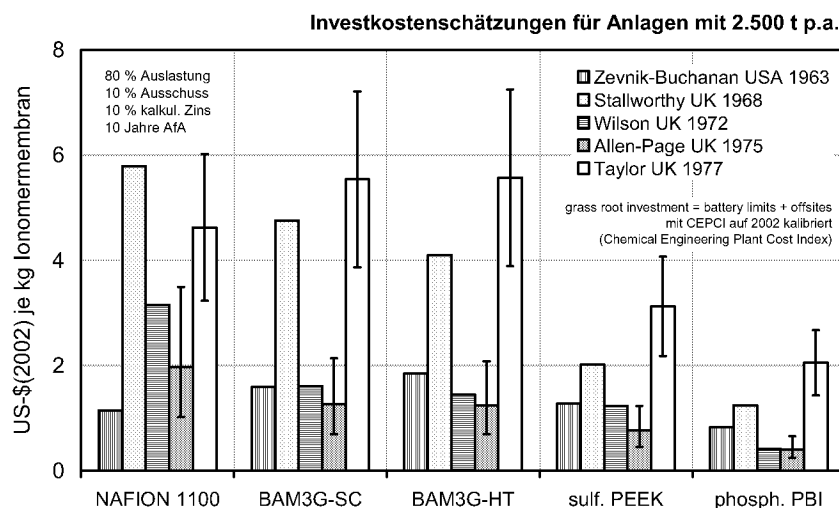


Bild 6.64 : Umlage des Anlagenkapitalbedarfs auf das Ionomermembrangewicht

Die wichtigste Schlussfolgerung hieraus ist, dass selbst bei ungünstigen Bedingungen die Anlagenkosten eine Schwelle von 7 US-\$(2002) je kg Ionomermembran kaum überschreiten. Umgelegt auf eine 50 µm dicke Membran mit 100 g/m² Flächengewicht sind dies 70 US-Cent. Im Vergleich zu den zugehörigen Materialkosten bedeutet dies, dass die Fertigungskosten bei den perfluorierten Materialien nur einen Anteil von 5 bis 8 % darstellen. Bei sulfoniertem PEEK betragen die Fertigungseinzelkosten etwa $\frac{1}{3}$ der Materialeinzelkosten, bei Phosphorsäure-dotiertem PBI zwei Drittel.

6.6 Beitrag zu möglichen PEFC-Stackkosten

Im Benchmarking des vorangehenden Abschnitts 6.5 sind mit den Material- und Fertigungseinzelkosten die Kostenarten genau analysiert worden, in denen sich die synthetisierten Folien grundlegend voneinander unterscheiden. Darüber hinaus ist jedoch auch von Interesse, welche Größenordnung die Verkaufspreise für das Rollenmaterial schließlich erreichen können beziehungsweise erreichen werden.

Diese Frage beantwortet eine Plankostenrechnung zu Vollkosten, in der alle im Umfeld des Konzerns anfallenden Kostenarten mit eingerechnet werden. Die gestaltet sich aus mehreren Gründen als schwierig und nur bedingt allgemeingültig :

- ◆ Investitionskosten einer Anlage hängen in beträchtlichem Maß von ihrem Standort ab.
- ◆ Ausmaß und Umlageschlüssel anfallender Gemeinkosten sind firmenabhängig.
- ◆ Chemische Produktionskomplexe sind nicht autark, sondern hochgradig vernetzt. Dies liegt an einer meist unvermeidbaren Kuppelproduktion sowie dem Ziel hoher Energieeffizienz.

Dennoch sei an dieser Stelle auf der Basis durchschnittlicher Zuschlagsätze ein exemplarisches Beispiel gegeben, in der die Zahlen einzelner additiver Beiträge in Zukunft einfach anzupassen sind, sobald sich der Kenntnisstand ändert. Auf die relativen Kosten der fünf Polymervarianten haben die prozentualen Zuschläge keinen Einfluss mehr.

Als quantitative Grundlage für die Zuschlagsätze soll hier die allgemeine Kostenstruktur der deutschen chemischen Industrie im Jahr 2000 herangezogen werden (Bild 6.65).

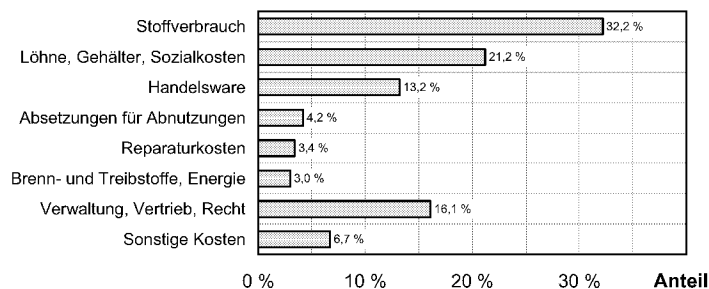


Bild 6.65 : Anteile der Kostenarten am Bruttoproduktionswert, deutsche chemische Industrie 2001 [120]

Hieraus lassen sich folgende ungefähre Zuschlagsätze ableiten :

- ◆ Energie- und sonstige Versorgungskosten entsprechen ~ 9 % der Rohstoffkosten
- ◆ Aufwand für Handelsware ~ 41 % der Rohstoffkosten
- ◆ Reparaturkosten ~ 81 % der Absetzungen für Produktionsanlagen (AfA)
- ◆ Personalkosten ~ 279 % der Summe aus Absetzungen für Abnutzungen und Reparaturen

Eine Schwierigkeit im frühen Stadium der Prozessanalyse stellt der Energiebedarf der Anlagen dar, weil für ausgefallene Chemikalien (wie in den Abschnitten 6.1 bis 6.4) in der Literatur meist keine kalorischen Daten vorliegen. In Patentschriften ist es zudem unüblich, diese zu erwähnen. Daher erfolgt ein entsprechender Aufschlag proportional zu den Rohstoffkosten.

Näherungsweise sei angenommen, dass sich der Personalbedarf direkt proportional zur Anlagengröße entwickelt. Der Zuschlagfaktor hierfür ist der Quotient aus Bruttopersonalkosten und der Summe von Abschreibungen und Reparaturen. Weitere Annahmen sind ferner :

- ◆ 2 % der Materialeinzelkosten für Hilfs- und Betriebsstoffe
- ◆ 20 % der Fertigungseinzelkosten für Forschung und Entwicklung
- ◆ 30 % der Herstellkosten (HK) für Verwaltung, Vertrieb, Recht und sonstige Kosten
- ◆ 15 % der Selbstkosten (SK) als Gewinnaufschlag
- ◆ 5 % für Rabatte oder Skonto

Hiermit ergeben sich für die fünf protonenleitenden Polymerelektrolytmembranen dann folgende Zahlen :

Tabelle 6.7 : Planungsrechnung auf Vollkostenbasis mit resultierenden Nettoverkaufspreisen (†)

	Nafion® 1100	BAM3G- SC	BAM3G- HT	sulfoniertes PEEK	dotiertes PBI	
Materialeinzelkosten (MEK)	74,8	143	86,7	12,5	4,5	[Euro/kg]
MGK (2 % der MEK) Hilfs- und Betriebsstoffe	1,5	2,9	1,7	0,3	0,1	dto.
MGK (9 % der MEK) Energie, Wasser etc.	6,7	12,9	7,8	1,1	0,4	dto.
MGK (41 % der MEK) Handelsware	30,7	58,8	35,5	5,1	1,8	dto.
Fertigungseinzelkosten (FEK)	6,0	7,0	7,0	4,0	3,0	dto. (†)
FGK (81 % der FEK) Wartung, Reparatur	4,9	5,7	5,7	3,2	2,4	dto.
FGK (279 % auf FEK+W/R) Personalkosten	30,3	35,3	35,3	20,2	15,1	dto.
SoKF (20 % der FEK) Forschung, Entwicklung	1,2	1,4	1,4	0,8	0,6	dto.
Herstellkosten (HK)	156	267	181	47,2	28,0	[Euro/kg]
Verwaltung, Vertrieb, Recht (21 % der HK)	32,8	56,1	38,1	9,9	5,9	dto.
Sonstige Gemeinkosten (9 % der HK)	14,0	24,1	16,3	4,3	2,5	dto.
Selbstkosten (SK)	203	347	236	61,4	36,4	[Euro/kg]
Gewinn (15 % der SK)	30,4	52,1	35,3	9,2	5,5	dto.
Skonto und Rabatte (5 % der SK)	10,1	17,4	11,8	3,1	1,8	dto.
Nettoverkaufspreis, massenbezogen	243	417	283	73,7	43,7	[Euro/kg]
angenommene Membrandicke (100 g / 50 µm)	50	60	60	100	100	[µm]
angenommene Leistungsdichte	5,0	5,0	5,0	3,5	3,5	[kW/m²]
Nettoverkaufspreis, flächenbezogen	24	50	34	15	8,7	[Euro/m²]
Nettoverkaufspreis, leistungsbezogen	4,9	10	6,8	4,2	2,5	[Euro/kW]

Die letzten beiden Zeilen stellen mit den prinzipiell möglichen flächen- und leistungsbezogenen Nettoverkaufspreisen das eigentliche Endergebnis dieses sehr umfangreichen Kapitels 6 dar. Sie zeigen klar, dass die Membrankosten der untersuchten Alternativen die Zielkosten vieler

* MGK = Materialgemeinkosten, FGK = Fertigungsgemeinkosten, SoKF = Sonderkosten der Fertigung

† hier Annahme einer Währungsparität zwischen Euro und US-\$ (2002)

Märkte - inklusive des Pkw-Sektors - tatsächlich erreichen können. Diese Feststellung ist umso wichtiger in Anbetracht der Tatsache, dass die benötigten Spezialpolymere mengenmäßig nicht an die Tonnagen anderer Massenkunststoffe heranreichen werden (Seite 93).

Was kann Ursache für die heutigen Preise perfluorierter Membranen sein ?

Die starke Divergenz zwischen den von Tabelle 6.7 gezeigten 24-50 Euro je m² perfluorierter Membran und den heute üblichen Preisen, wie sie Abschnitt 3.3.4 (Seite 39) zitiert, wirft die Frage nach weiteren Gründen auf - abgesehen von komplexen Polymersynthesen. Folgende Aspekte kommen hierfür in Frage :

- ◆ Weltweit liegt ein Oligopol weniger Anbieter vor, die einerseits die Patentrechte an den Materialien besitzen und zudem (auch nach deren Freigabe) einen Erfahrungsvorsprung im Umgang mit der Produktion und den beteiligten Stoffen (insbesondere TFE, C₂F₄) haben. Das Segment protonenleitender Membranpolymere stellt somit einen Verkäufermarkt dar [107, p. 229 und 78, p. 463], was den Verkaufspreis von den Herstellkosten entkoppelt.
- ◆ Die breite Anwendungsmöglichkeit im Brennstoffzellenbereich hat sich erst während der 90er Jahre abgezeichnet - parallel zum primär angepeilten Markt der Chlor-Alkali-Elektrolyse. Welche quantitativen Absatzchancen sich bei Brennstoffzellen bieten, ist zunächst auch den Ionomerherstellern kaum bekannt. Zudem befindet sich die Brennstoffzellen-Technologie noch in der Entwicklung und fragt bisher nur entsprechend geringe Mengen am Markt nach. Diese Situation könnte zu dem Bestreben führen, den Preis vorerst hochzuhalten, weil spätere Erhöhungen den Kunden nur schwer vermittelbar wären.
- ◆ In der derzeitigen Situation kann auch das Faktum, dass mit der Chlor-Alkali-Elektrolyse ein mengenmäßig beträchtlicher primärer Absatzmarkt mit hohen Zielkosten existiert, dazu beitragen, dass die Brennstoffzellen-Membranpreise vergleichbar gehalten werden. Da es sich bei diesen Anlagen um langfristige industrielle Investitionsgüter handelt, sind Preise um 1.000 US-\$ je m² Membran für die Herstellung von Chlor und Natronlauge vertretbar.

Die umweltschonende Produktion dieser beiden Grundchemikalien mit dem Membranverfahren steht in einer Konkurrenz zur Membranvermarktung in Brennstoffzellenanwendungen. Die Ähnlichkeit der Materialien erschwert es den Anbietern zum heutigen Zeitpunkt noch, für die beiden Märkte unterschiedliche Preise einzufordern, die um Größenordnungen differieren. Preisgünstige Membranen für Brennstoffzellen könnten womöglich mittelfristig zu einem Einbruch der Erlöse im Chlor-Alkali-Segment führen.

Dies könnte für die Membranhersteller bei der heutigen Sachlage eine unnötige, vielleicht sogar selbst verursachte Erschwernis darstellen. Die umweltgefährdenden Emissionen an Quecksilber, die mit dem Amalgamverfahren verbunden sind, haben bei vielen Betreibern von Chlor-Alkali-Anlagen zu der Entscheidung geführt, zukünftig keine Amalgam-Neuanlagen mehr zu bauen beziehungsweise sogar Altanlagen bis zum Jahr 2020 stillzulegen [180, p. 19]. Im Jahr 2000 war erst etwa die Hälfte der Produktionskapazität Westeuropas auf quecksilberfreie Verfahren umgestellt. Eine entsprechende EU-Direktive von 1982 wird zwar derzeit überarbeitet [181], dennoch existiert damit zumindest für die nächsten zwei Dekaden ein gesicherter Markt für perfluorierte Chlor-Alkali-Membranen.

Im Folgenden sind einige Effekte dargestellt, die zukünftig preissenkend wirken sollten :

- ◆ Die Architekturen von Chlor-Alkali- und Brennstoffzellen-Membran entfernen sich bei weiterer Spezialisierung in Aufbau und Material kontinuierlich voneinander (Foliendicken, funktionelle Zusatzstoffe, Mehrschichtsysteme und dergleichen).
- ◆ Die Brennstoffzellenstacks erhöhen ihr nachgewiesenes Leistungspotenzial und unterstreichen damit ihr bisher postuliertes Marktpotenzial. Als Reaktion auf einen Nachweis der Zuverlässigkeit entsteht ein Market-Pull in Anwendungen mit Neuheitsmerkmalen.
- ◆ Mögliche neue Produzenten treten mit alternativen Materialien am Markt auf.
- ◆ Anstelle eines Einzelprodukts wird eine Vielzahl kundenspezifischer Varianten angeboten.
- ◆ Der Markt der Chlor-Alkali-Verfahren läuft in eine Sättigung ein.

Während die ersten Punkte von Brennstoffzellenentwicklern selbst aktiv beeinflussbar sind und sich innerhalb der nächsten fünf Jahre bereits stark vorantreiben lassen, beträgt der Zeithorizont der Marktsättigung für Membranverfahren in der Chlor-Alkali-Elektrolyse eher 15 bis 20 Jahre und entzieht sich weitgehend der Einflussnahme der Brennstoffzellentechnologie - zumal es sich auch bei der Elektrolyse um einen wichtigen Beitrag zum Schutz der Umwelt handelt.

6.7 Zusammenfassung

In Kapitel 6 erfolgt ein quantitativer Vergleich möglicher Produktionskosten für verschiedene Membranmaterialien, deren Auswahl zuvor in Abschnitt 2.2.3 stattfand. Bild 2.5 (Seite 21) zeigt die Wiederholungseinheiten der hier untersuchten Polymere.

Die Analyse setzt das in Kapitel 4.4 neu entwickelte ökonomische Modell zur Kostenbetrachtung von Komponenten eines PEFC-Stacks ein, welches Schlüsselkennzahlen für ein Benchmarking bereitstellt. Abschnitt 6.5 führt dieses Benchmarking für die polymerspezifischen Material- und Fertigungseinzelkosten durch, ehe Abschnitt 6.6 hierauf aufbaut und eine exemplarische Plankostenrechnung zu Vollkosten entwickelt. Aus ihr lassen sich dann erreichbare zukünftige Nettoverkaufspreise ableiten.

Die inhaltliche Basis hierfür legen jedoch die vorgeschalteten Abschnitte 6.1 bis 6.4, in denen jeweils detaillierte Recherchen und Kalkulationen zu den folgenden Punkten enthalten sind :

- ◆ Chemischer Syntheseweg des Polymers aus allgemein zugänglichen Basisstoffen
- ◆ Verfahrenstechnische Umsetzung in einer Produktionsanlage
- ◆ Mengenbilanzierung mit Berücksichtigung von Umsätzen, Ausbeuten und Verlusten
- ◆ Materialkostenanalyse mit der durch Abschnitt 4.5 bereitgestellten Monte-Carlo-Methodik
- ◆ Studienschätzung des Anlagenkapitalbedarfs nach fünf in Abschnitt 4.6 beschriebenen, validierten Verfahren aus der Literatur. Berücksichtigung der Verfahrensfleißbilder, Massenbilanzen, Produktionsbedingungen, Zahl und Art der Apparate sowie gegebenenfalls weiterer Informationen zu Verweilzeiten, Reinheitsanforderungen oder Sicherheitsaspekten.

Mit dieser Datengrundlage kommt Abschnitt 6.5 dann zu folgenden Ergebnissen :

1. Bei den massenbezogenen Kosten für Rohchemikalien (Euro je kg Membran) unterteilen sich die fünf Ionomere in drei Gruppen (siehe Bild 6.58, Seite 135) :
 - ◆ BAM3G-SC als Polymer mit hohen Materialkosten zwischen 100 und 250 Euro/kg
 - ◆ Nafion® 1100 und BAM3G-HT, mittlere Materialkosten zwischen 50 und 150 Euro/kg
 - ◆ sulfoniertes PEEK und säuredotiertes PBI mit geringen Materialkosten unter 30 Euro/kg

2. Bei der für Material, Design und Herstellung entscheidenden Kennzahl (Gleichung 4.10) der flächenbezogenen Materialkosten (Euro je m² Membran) ändern sich die Verhältnisse etwas, da für ein vergleichbares Verhalten im Betrieb die anderen Polymerfolien dicker als Nafion® sein müssen (Bild 6.60, Seite 136).
3. Fließt der zusätzliche Benchmark-Faktor "Leistung pro Aktivfläche" mit ein, so verringert sich der Vorteil der fluorfreien relativ zu den perfluorierten Polymeren bei den Rohstoffkosten weiter, da die Membranen auf der Grundlage heutiger Forschung ein verringertes Leistungsvermögen im Betrieb haben werden (Bild 6.61, Seite 136). Unterstellt man eine Ausbeute des Folienrollenmaterials von 50 % in Form späterer Aktivfläche eines PEFC-Stacks, dann ergeben sich für die Rohstoffkosten der Polymere folgende Werte :

Tabelle 6.8 : Materialeinzelkosten für verschiedene Polymervarianten, aus Bild 6.61

Nafion-112	Nafion-111	BAM3G-SC	BAM3G-HT	sulf. PEEK	dot. PBI	
~ 2 bis 4	~ 1 bis 2	~ 5 bis 10	~ 3 bis 6	~ 1 bis 2,5	< 1	[Euro/kW]

4. Das Benchmarking der Fertigungseinzelkosten lässt für die Produktion bei einer Kapazität von 2.500 t p.a. zumindest bei der Analyse nach fünf abgekürzten Berechnungsverfahren übereinstimmend einen Bedarf an Kapitalkosten unter 120 Mio. US-\$(2002) erwarten (Bild 6.63, Seite 138). Mit den weiteren Annahmen von 80 % Anlagenauslastung, 10 % Ausschuss, 10 Jahren Abschreibungsdauer und 10 % kalkulatorischem Durchschnittszins führt eine Umlage auf die Produktionsmenge zu folgenden Beiträgen :

Tabelle 6.9 : Fertigungseinzelkosten nach Umlage auf die produzierte Menge (Annahmen siehe oben)

Nafion® 1100	BAM3G-SC	BAM3G-HT	sulf. PEEK	dot. PBI	
< 6	< 7	< 7	< 4	< 3	[Euro/kg]
4 bis 12 %	3 bis 7 %	5 bis 14 %	~ 20 - 50 %	~ 30 - 90 %	[FEK:MEK]

Als Ergänzung zum Benchmarking der polymerspezifischen Material- und Fertigungseinzelkosten (MEK, FEK) vervollständigt Abschnitt 6.6 die Analyse mit einer exemplarischen Aufstellung zugehöriger Plankostenrechnungen auf Vollkostenbasis. Die prozentualen Zuschläge haben keinen Einfluss mehr auf die relativen Verhältnisse zwischen den Polymervarianten. Sie zeigen aber in nachvollziehbarer Weise, wo bei einer systematischen Berücksichtigung zusätzlicher Gemeinkosten der Nettoverkaufspreis des Membranmaterials liegen kann (Tabelle 6.7).

Die für Material und Herstellung entscheidende Benchmark-Kennzahl des flächenbezogenen Wertes liegt demzufolge für Nafion®-112 bei 24 Euro/m², für BAM3G-SC und -HT bei 50 beziehungsweise 34 Euro/m² sowie für sulfoniertes PEEK und Phosphorsäure-dotiertes PBI bei 15 und 9 Euro/m². Die Werte zeigen, dass die Membrankosten der untersuchten Alternativen die Zielkosten vieler potenzieller Märkte der Brennstoffzelle (inklusive des Pkw-Sektors) tatsächlich erreichen können. Diese Feststellung ist umso wichtiger in Anbetracht der Tatsache, dass die benötigten Spezialpolymere mengenmäßig nicht an die Tonnagen anderer Massenkunststoffe heranreichen werden (Seite 93).

7 Zusammenfassung, Bewertung und Perspektiven

Für die Brennstoffzellen-Technologie ist die Erreichbarkeit vorgegebener Kostenziele neben Aspekten der Lebensdauer, des Wirkungsgrades und der Umweltverträglichkeit mit die wichtigste Fragestellung. Bisherigen Kosteninformationen zu PEFC-Stacks fehlt eine transparente Darstellung entweder des Prinzips, der Annahmen oder der Zwischenschritte, weswegen Vergleiche von publizierten Daten nur sehr eingeschränkt möglich sind. Vor diesem Hintergrund wurde die Notwendigkeit gesehen, eine ökonomische Methodik zur Analyse der Herstellprozesse zu entwickeln, die dann eine nachvollziehbare Aussage zu Brennstoffzellenkosten liefert und ferner zur Optimierung der PEFC-Entwicklung beiträgt.

Vorrangiges Ziel dieser Dissertation ist es daher, für die in PEFC-Stacks der kW-Klasse enthaltenen Bauteile zunächst ein allgemeingültiges, techno-ökonomisches Kostenmodell zu entwickeln. Wichtig hierbei ist, in enger Anlehnung an die Management-Methodik des Benchmarkings verschiedene technische Realisierungsvarianten im Hinblick auf die damit verbundenen Herstellkosten vergleichen zu können. Modularität und Flexibilität ermöglichen Vergleiche von Teilergebnissen, Modifikationen für den Fall sich verändernder Randbedingungen sowie Betrachtungen zukünftiger technischer Entwicklungen nach gleichem Prinzip. Zudem sind Modell und Anwendung in weiten Teilen unabhängig von Kommunikationspolitik oder Strategien einzelner Firmen.

Kapitel 2 der Arbeit stellt technische Grundlagen bereit, indem es für die Komponenten eines Stacks sowie deren Montage die Breite heute bekannter technischer Umsetzungen zeigt. Eine Literaturübersicht zur Kostenbewertung ergänzt Kapitel 3. Somit lassen sich aus heutiger Sicht zu den wichtigsten Bauelementen zunächst folgende vorläufige Aussagen treffen :

- ◆ Für Bipolarplatten sind drei verschiedene Herstelltechnologien denkbar: Gestanzte und profilierte Metallplatten, die für den späteren Betrieb eine Korrosionsschutzschicht erhalten, spritzgegossene Platten aus einer extrudierten Grafit-Kunststoff-Mischung oder Folien aus expandiertem Grafit. Alle drei Alternativen sind aus technischer Sicht mit Vor- und Nachteilen behaftet und erfordern individuelle technologische Weiterentwicklungen. Zudem lassen bisherige Kostenangaben auf ähnlich hohe Herstellkosten schließen, sodass keine generelle Aussage getroffen werden kann.
- ◆ Für Polymerfolien, zentrale Bestandteile der Membran-Elektroden-Einheit, dominiert der Einsatz teflonähnlicher Makromoleküle, die Sonderprodukte sind und zunächst für die Chlor-Alkali-Elektrolyse entwickelt wurden. Parallel hierzu befinden sich auch alternative Materialien im Laborstadium. Allen Polymeren ist jedoch gemeinsam, dass die chemischen Synthesen vielstufig und die Kosten aus Kundensicht schwer einzuschätzen sind.
- ◆ Katalysatoren, die auf beiden Seiten der Polymermembran aufgebracht werden müssen, basieren nicht nur heute, sondern auch mittel- bis langfristig auf Edelmetallen (insbesondere

Platin). Auch bei einer sukzessiven Verringerung der benötigten Menge bleiben die Materialkosten der sehr wertvollen Metalle signifikant.

Auf Basis dieser Informationen ist eine Priorisierung der Stack-Komponenten in ihrer Bedeutung als Kostenträger möglich, die auch Einfluss auf das weitere Vorgehen im Rahmen dieser Dissertation gehabt hat :

- ◆ Mit dem Spritzgießverfahren von Compositplatten ist eine der drei denkbaren Bipolarplatten-Technologien ausgewählt worden, um die systematische Anwendung der Analysemethodik detailliert zu demonstrieren (Kapitel 5). Dies erlaubt zwar noch kein Benchmarking der drei Konkurrenztechnologien im eigentlichen Sinne, zeigt aber bereits für diese neue Bauteilentwicklung Möglichkeiten und Grenzen bei Kostensenkung und Optimierung auf.
- ◆ In Anbetracht der essenziellen Funktion und hohen Komplexität protonenleitender Membranen hat die vorliegende Arbeit fünf dieser Ionomere für detaillierte Kostenanalysen ihrer Produktionswege ausgewählt. Diese Untersuchungen stellen den anwendungstechnischen Schwerpunkt dar (Kapitel 6). Betrachtet wurden Referenzpolymere, die in ihrer Grundstruktur folgenden Ionomeren nachempfunden sind: Nafion® 1100, BAM3G als sulfoniertes Co- und hydrolysiertes Terpolymer, sulfoniertes Polyetheretherketon (PEEK) sowie Phosphorsäure-dotiertes Polybenzimidazol (PBI) (S. 19). Bei Nafion® und BAM3G handelt es sich um perfluorierte, bei PEEK und PBI um fluorfreie Polymere. Kostenaspekte ihrer Produktionsprozesse werden am Ende über ein Benchmarking der Herstell- und Selbstkosten miteinander verglichen und diskutiert.
- ◆ Der hohe Materialwert des in Katalysatoren enthaltenen Platins lässt produktionstechnische Aspekte in der Kostenbetrachtung zunächst in den Hintergrund rücken. Die Arbeit beschränkt sich daher auf eine kurze Übersicht möglicher Katalysatorkosten als Funktion der Parameter Edelmetallpreis, Beladung und realisierbare Leistungsdichte. Eine Tabelle dient zu Vergleichszwecken, um die Ergebnisse aus Analysen für die anderen Komponenten auch in Relation zu entsprechenden Platinkosten diskutieren zu können (S. 185).

Grundlage für die genannten Untersuchungen ist die Bereitstellung eines allgemein anwendbaren techno-ökonomischen Analysemodells für PEFC-Module (Kapitel 4). Hierbei wird die Methodik des Bauteil-Prozess-Benchmarkings systematisch verfolgt und angepasst. Die Erfassung der Komponenten als Einzelobjekte der Analyse beruht auf einem geometrischen Modell für PEFC-Module (S. 49).

Aus bisherigen Arbeiten sind übereinstimmend drei Problembereiche bekannt: Produktionskosten, Aggregatleistung und Stack-Lebensdauer. Hier setzt demnach das Kennzahlensystem für das Benchmarking an, definiert das Minimum des Quotienten Herstellkosten / (elektrische Leistung · Lebensdauer) als einen virtuellen Benchmark und macht so das Optimierungsziel quantifizierbar. Umformungen stellen den Ausdruck als Produkt von Parametern zur Beschreibung von Material, Design und Herstellung der betrachteten Komponente einerseits sowie des Leistungsvermögens im Betrieb andererseits dar (S. 52) :

$$\text{Benchmark} = \text{Min} \left\{ \underbrace{\frac{\text{Herstellkosten HK}}{\text{Masse M}} \cdot \frac{\text{Dicke D}}{\text{Volumen V}} \cdot \frac{1}{\alpha}}_{\text{Material, Design und Herstellung}} \cdot \underbrace{\frac{\text{Aktivfläche A}}{\text{Leistung P}} \cdot \frac{1}{\text{Lebensdauer L}}}_{\text{Leistungsvermögen im Betrieb}} \right\}$$

Ein globales Minimum geht erst aus dem Produkt aller fünf Faktoren hervor. Die neue Darstellung erlaubt aber die Analyse des Einflusses von Materialien, Design und Herstellung auf den Benchmark isoliert vom späteren Leistungsvermögen. In dieser Arbeit werden für die beiden letztgenannten Faktoren dort, wo ein Bezug der Herstellkosten auf eine spätere Stackleistung von Interesse ist, lediglich ungefähre Werte auf Basis praktischer Erfahrungen angenommen. Dem Ermitteln der massenbezogenen Herstellkosten (HK/M) kommt eine Schlüsselfunktion zu. Herstellkosten teilen sich in eine Summe aus Material- und Fertigungskosten auf. Die Kapitel 4.5 und 4.6 erläutern die zur Bestimmung dieser Kostenanteile eingesetzten Vorgehensweisen: Ein Monte-Carlo-Verfahren berechnet Erwartungswerte und Konfidenzintervalle für Materialkosten der Komponenten, wobei eine Datenbank des europäischen statistischen Amtes EUROSTAT als Quelle von Wert- und Mengendaten der enthaltenen Rohstoffe dient. Diese Vorgehensweise bietet die Vorteile, makroökonomisch (also firmenunabhängig), realitätsnah und objektiv zu sein. Sie ist nicht brennstoffzellenspezifisch und lässt sich auch auf andere technische Untersuchungsobjekte ausdehnen. Die Betrachtung der Fertigungskosten erfolgt angepasst an die speziellen Produktionsbedingungen der betrachteten Stack-Komponenten. Sie gehorcht aber der Kennzahlmethodik des Modells.

Kapitel 5 appliziert die Kennzahlmethodik auf eine Bipolarplattenfertigung aus Grafit-Kunststoff-Composit. Es handelt sich um dünne Platten von 2 oder 1,5 mm Dicke mit Außenabmessungen von 16 x 24 cm. Die Materialmischung besteht aus Grafit mit 60 bis 90 Vol.-%, wobei das restliche Volumen aus Phenolharz, Epoxidharz oder Polypropylen als Bindematrix besteht. Materialkosten für die Mischung ergeben sich aus der Monte-Carlo-Analyse auf Basis von EUROSTAT-Daten. Demnach erscheint ein Wert um 5 Euro je kg Compound realistisch. Nur mit geringer Wahrscheinlichkeit < 5 % könnten die Materialkosten 7 Euro je kg übersteigen. Somit liegen die Materialkosten für eine 2 mm dicke Bipolarplatte zwischen 50 und 90 Eurocent (1,5 mm: 35 bis 75 Eurocent).

Für eine Fertigung sind Maschinen mit Investitionskosten zwischen 200 und 600 kEuro erforderlich. Werkzeugkosten betragen rund 30 bis 50 kEuro. Es zeigt sich, dass die Produktionskosten im Mehrschichtbetrieb auf etwa 70 Eurocent je Platte sinken. Eine Verkürzung der Zykluszeit, die der entscheidende Parameter für die Stückkosten ist, birgt ein Kostensenkungspotenzial auf rund 55 Eurocent, dürfte aber aus fertigungstechnischen Gründen nur schwer erreichbar sein.

Projiziert man die genannten Zahlen auf eine angenommene Leistungsdichte von 5 kW/m², so liegen die Herstellkosten von Bipolarplatten je nach technischer Variante zwischen 15 und 25 Euro je kW elektrischer Brennstoffzellenleistung (S. 89). Eine exemplarische Plankostenrechnung zu Vollkosten deutet an, dass zukünftige Nettoverkaufspreise von Compositplatten auf Basis dieses Produktionsverfahrens wohl Werte von 30 Euro/kW (bei Duroplasten wie Phenol- oder Epoxidharz) beziehungsweise 23 Euro/kW (mit thermoplastischem Polypropylen) übersteigen werden (S. 90).

Kapitel 6 wendet sich mit derselben Benchmarking-Methodik der Analyse von fünf Varianten protonenleitender Polymermembranen zu und kommt dabei zu den folgenden Ergebnissen :

- Bei den massenbezogenen Kosten für Rohchemikalien (Euro je kg Membran) unterteilen sich für die fünf Ionomere in drei Gruppen (S. 135) :
 - ♦ BAM3G-SC als Polymer mit hohen Materialkosten zwischen 100 und 250 Euro/kg
 - ♦ Nafion® 1100 und BAM3G-HT, mittlere Materialkosten zwischen 50 und 150 Euro/kg
 - ♦ sulfoniertes PEEK und säuredotiertes PBI mit geringen Materialkosten unter 30 Euro/kg
- Bei der für Material, Design und Herstellung entscheidenden Kennzahl der flächenbezogenen Materialkosten (Euro je m² Membran) ändern sich die Verhältnisse, da die anderen Polymerfolien für eine vergleichbare Lebensdauer dicker als Nafion® sein müssen. Hinzu kommt, dass sich der Vorteil der fluorfreien relativ zu den perfluorierten Polymeren bei den Materialkosten weiter reduziert, weil die Membranen nach heutigem Kenntnisstand ein verringertes Leistungsvermögen im Betrieb haben werden. Unterstellt man eine Ausbeute des Folienrollenmaterials von 50 % in Form späterer Aktivfläche eines PEFC-Stacks, dann ergeben sich für die Rohstoffkosten der Polymere folgende Werte :

Tabelle 6.8 : Materialeinzelkosten für verschiedene Polymervarianten (S. 136)

Nafion-112	Nafion-111	BAM3G-SC	BAM3G-HT	sulf. PEEK	dot. PBI	
~ 2 bis 4	~ 1 bis 2	~ 5 bis 10	~ 3 bis 6	~ 1 bis 2,5	< 1	[Euro/kW]

- Das Benchmarking der Fertigungseinzelkosten lässt für die Produktion bei einer Kapazität von 2.500 t p.a. in allen Fällen einen Bedarf an Kapitalkosten unter 120 Mio. US-\$(2002) erwarten (S. 138, Wechselkurs S. 57). Mit den weiteren Annahmen von 80 % Anlagenauslastung, 10 % Ausschuss, 10 Jahren Abschreibungsdauer und 10 % kalkulatorischem Durchschnittszins führt eine Umlage auf die Produktionsmenge zu folgenden Fertigungskosten :

Tabelle 6.9 : Fertigungseinzelkosten nach Umlage auf die produzierte Menge (S. 139)

Nafion® 1100	BAM3G-SC	BAM3G-HT	sulf. PEEK	dot. PBI	
< 6	< 7	< 7	< 4	< 3	[Euro/kg]
4 bis 12 %	3 bis 7 %	5 bis 14 %	~ 20 - 50 %	~ 30 - 90 %	[FEK:MEK] *

Als Ergänzung zum Benchmarking der polymerspezifischen Material- und Fertigungseinzelkosten (MEK, FEK) ist auch hier eine exemplarische Aufstellung zugehöriger Plankostenrechnungen auf Vollkostenbasis enthalten. Die prozentualen Zuschläge haben keinen Einfluss mehr auf die relativen Verhältnisse zwischen den Polymervarianten. Sie zeigen aber, wo bei einer systematischen Berücksichtigung zusätzlicher Gemeinkosten ein Nettoverkaufspreis des Membranmaterials liegen könnte (S. 141) :

Die für Material und Herstellung entscheidende Benchmark-Kennzahl des flächenbezogenen Wertes liegt demzufolge für Nafion®-112 bei 24 Euro/m², für BAM3G-SC und -HT bei 50 beziehungsweise 34 Euro/m² sowie für sulfoniertes PEEK und Phosphorsäure-dotiertes PBI bei 15 und 9 Euro/m². Die Werte zeigen, dass die Membrankosten der untersuchten Alternativen die Zielkosten vieler potenzieller Märkte der Brennstoffzelle (inklusive des Pkw-Sektors) erreichen können. Diese Feststellung ist umso wichtiger in Anbetracht der Tatsache, dass die benötigten

* Prozentzahlen entsprechen dem Verhältnis Fertigungseinzelkosten : Materialeinzelkosten

Spezialpolymere mengenmäßig nicht an die Tonnagen anderer Massenkunststoffe heranreichen werden: Eine Substitutionsquote von 25 % der weltweiten Verkäufe neuer Pkws ergäbe einen Bedarf an Ionomer-Material von etwa 30.000 Tonnen p.a., der verteilt auf 12 Produktionsanlagen weltweit zur hier angenommenen Nennkapazität von nur 2.500 t p.a. führt (S. 93).

Als problematisch ist hingegen die Marktsituation im Ionomerbereich zu sehen: Mit der Chlor-Alkali-Elektrolyse sehen sich PEFC-Brennstoffzellen einem Primärmarkt mit hohen Zielkosten um 1.000 Euro/m² gegenüber, was schnelle Preissenkungen stark erschwert. Zudem stellt der Verkauf protonenleitender Membranen einen globalen Verkäufermarkt dar, in dem bisher wenige Anbieter ein Oligopol bilden (S. 142).

Das mit dieser Arbeit aufgebaute techno-ökonomische Kostenmodell für PEFC-Stacks erfüllt in vielen Punkten die eingangs gestellten Anforderungen. Die Kennzahlmethodik bietet die Möglichkeit, einzelne Technologien systematisch und modular zu untersuchen. Darüber hinaus lässt es sich kontinuierlich auf neu entstehende Lösungen anwenden. Damit ist der Weg offen, nach und nach eine Bibliothek verschiedener technischer Varianten für die einzelnen Komponenten von Brennstoffzellenstacks zu erstellen. Eine Analyse von Composit-Bipolarplatten und ein Benchmarking wichtiger Membranpolymere liegen mit dieser Arbeit vor. In folgenden Aspekten sind der Anwendung des Modells aber Grenzen gesetzt :

- ◆ Die Datenbank EUROPROMS enthält zwar über 800 Einträge im Bereich der chemischen Industrie. Dennoch lässt sich nicht für alle Basischemikalien eine realitätsnahe Vergleichsgruppe finden, sodass zum Teil auch Ersatzmodelle entwickelt werden müssen, welche die Genauigkeit der Aussage reduzieren (S. 100). Für andere Branchen ist das Datenmaterial zudem weniger detailliert (S. 157).
- ◆ Kosten von Chemikalien hängen sehr vom geforderten Reinheitsgrad ab. Diese Abhängigkeit kann die Datenbank EUROPROMS nicht auflösen, da sie über alle Qualitäten mittelt. Zudem ist an vielen Stellen der Polymersynthesen unklar, welche Mengen an Verunreinigungen tragbar sind beziehungsweise welchen Mehraufwand ihre Abtrennung erfordert.
- ◆ Produktionskosten sind eine Funktion der Ausbringungsmenge (*economies of scale*, S. 39). In den Anwendungsbeispielen hier waren große Stückzahlen Ausgangspunkt der Betrachtungen. Bei der Produktion von Kleinmengen können mikroökonomische Kostenfaktoren relevant werden, die der makroökonomische Ansatz alleine nicht beschreiben kann.

In der Zukunft ließe sich das Modell an derartigen Punkten ergänzen und verfeinern. Zudem müssen weitere inhaltliche Arbeiten folgen, um auch bei anderen Bauteilen der PEFC Ergebnisse eines Bauteil-Prozess-Benchmarkings generieren und schließlich Gesamtkosten für Stacks angeben zu können (S. 8).

Strategisch gesehen können derartige entwicklungsbegleitende Prozesskosten-Kalkulationen mit Sicherheit einen Beitrag leisten, das Kostenpotenzial aussichtsreicher Technologien für Brennstoffzellen-Materialien und -Komponenten schneller zu erkennen. Vorhandene Ressourcen für Forschung und Entwicklung können so effizienter auf den kommerziellen Erfolg der Brennstoffzelle hinarbeiten.

8 Anhang

8.1 Formelverzeichnis, Akronyme und CAS-Nummern der Chemikalien

griechische Formelzeichen

α	Flächennutzungsgrad einer Zelle
$\Delta_E V$	Exzessvolumen
μ	Erwartungswert einer Normalverteilung
ρ	massenspezifische Dichte
$\bar{\rho}$	mittlere Dichte einer Mischung mehrerer Komponenten
σ	Standardabweichung einer Normalverteilung

lateinische Formelzeichen

A	1. Aktivfläche / elektrochemisch aktive Fläche 2. Ausgangswert (Monte-Carlo)
B	virtueller Benchmark
D	Dicke (eines Bauteils)
DE	Degressionsexponent
E	Eingangswert (Monte-Carlo)
EV	Eingangsvektor (Monte-Carlo)
F	Querschnittsfläche
HK	Herstellkosten
I	Intervall
i, j	Summationsindizes
K	Kosten
K_E	Energiekosten
K_F	Fertigungskosten
K_K	Kapitalkosten
K_M	Materialkosten
K_P	Personalkosten
k_M	massenbezogene Kosten einer Materialkomponente
L	Lebensdauer
M	Masse eines Bauteils
m	Masse einer Materialkomponente
P	Leistung
Q	kennzeichnende Größe für die Kapazität eines Apparats oder einer Anlage
R	beliebige Gruppe von Atomen in einem Molekül
r	Raumanteil / Volumen~

S_i	Fixpunkt in einer Summenfunktion, insbesondere $i \in \{5; 16; 50; 84; 95\}$
V	Volumen
w	Massenanteil
Z	Zwischengröße / $\sim$ -parameter (Monte-Carlo)

Akronyme

ADL	Arthur D. Little, US-amerikanisches Unternehmen
AfA	Absetzung für Abnutzungen
AFC	alkalische Brennstoffzelle, <i>alkaline fuel cell</i>
ANL	Argonne National Lab, USA
BAM3G	Ballard Advanced Materials, 3. Generation
BPE	Bipolarelement
BPP	Bipolarplatte
BZ	Brennstoffzelle
CAS-RN	<i>Chemical Abstracts Service Registry Number</i>
CCM	katalysatorbeschichtete Ionermembran, <i>catalyst coated membrane</i>
CEPCI	<i>Chemical Engineering Plant Cost Index</i>
CFK	Kohlefaser-verstärkte Kunststoffe
CNC	numerische Steuerung mit Rechner, <i>computerized numerical control</i>
CVD	chemische Dampfabcheidung, <i>chemical vapor deposition</i>
DMFC	Direktmethanol-Brennstoffzelle, <i>direct methanol fuel cell</i>
DN	direkte Nebenposition in einer Anlagenbewertung
DoE	Department of Energy der Vereinigten Staaten
DS	Sulfonierungsgrad, <i>degree of sulfonation</i>
ECN	<i>Energy Research Center of The Netherlands</i>
EU	Europäische Union
F(C)KW	Fluor(chlor)kohlenwasserstoff
FEK	Fertigungseinzelkosten
FEP	Fluoriertes Ethen und Propen, <i>fluorinated ethene propene</i>
FGK	Fertigungsgemeinkosten
GDL	Gasdiffusionslage
HK	Herstellkosten
HP	Hauptposition in einer Anlagenbewertung
IDN	indirekte Nebenposition in einer Anlagenbewertung
LM	Lösungsmittel
MEA	Membran-Elektroden-Einheit, <i>membrane electrode assembly</i>
MEK	Materialeinzelkosten
MGK	Materialgemeinkosten
MKV	Materialkostenverhältnis
MC	Monte Carlo ($\sim$ Simulation, $\sim$ Verfahren)
MCFC	Schmelzkarbonat-Brennstoffzelle, <i>molten carbonate fuel cell</i>
NACE	Klassifikation der Wirtschaftsbranchen innerhalb der Europäischen Union

*Nomenclature générale des Activités économiques
dans les Communautés Européennes*

PAFC	Phosphorsaure Brennstoffzelle, <i>phosphoric acid fuel cell</i>
PAN	Polyacrylnitril
PBI	Polybenzimidazol
PDCB	Perfluordimethyl-Cyclobutan
PE	Polyethen
PEEK	Poly-Ether-Ether-Keton
PEK	Poly-Ether-Keton
PE _m K _n	Polyetherketone im allgemeinen Sinn
PEFC	Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle, <i>polymer electrolyte fuel cell</i>
(PN) _n	Polyphosphazen
PP	Polypropen
PPI	US-amerikanischer Index der Industrieproduktion, <i>producer price index</i>
PSI	Paul-Scherrer-Institut Villingen, Schweiz
PTFE	Polytetrafluorethen, Teflon®
PVC	Polyvinylchlorid
SGL	Sigri Great Lakes (Carbon GmbH)
SK	Selbstkosten
SOFC	Festoxid-Brennstoffzelle, <i>solid oxide fuel cell</i>
SoKF	Sonderkosten der Fertigung
TEM	Transmissionselektronenmikroskop
VK	Kosten beim Verkauf / Verkaufspreis

**Registrierungsnummern (CAS-RN) der organischen Substanzen,
die an den in Kapitel 6 untersuchten Synthesen beteiligt sind**

in Abschnitt 6.1 : Nafion®

Chlordifluormethan	CHClF ₂	75-45-6
Tetrafluorethen (TFE)	C ₂ F ₄	116-14-3
Tetrafluorethan-β-Sulton	C ₂ F ₄ OSO ₂	697-18-7
Fluorsulfonyl-difluoracetylfluorid (FDA)	FO ₂ S-CF ₂ -COF	677-67-8
Hexafluorpropen, Perfluor~ (HFP)	C ₃ F ₆	116-15-4
Hexafluorpropenoxid, Perfluor~ (HFPO)	C ₃ F ₆ O	428-59-1
Trioctylmethylammoniumchlorid (TOMAC)	C ₂₅ H ₅₄ CIN	5137-55-3
"Diaddukt"	FO ₂ S-C ₅ F ₁₀ O ₂ -C ₃ F ₅ O	4089-58-1
PSEPVE	FO ₂ S-C ₅ F ₁₀ O ₂ -C ₂ F ₃	16090-14-5
iso-PSEPVE	FO ₂ S-C ₅ F ₁₀ O ₂ -C ₂ F ₃	34805-58-8
Polytetrafluorethen (PTFE)	[CF ₂] _n	9002-84-0

in Abschnitt 6.2 : Ballard-Polymere

Trifluorstyrol (TFS)	C ₂ F ₃ -C ₆ H ₅	447-14-3
----------------------	--	----------

meta-Trifluormethyl-TFS	$C_2F_3-C_6H_4-CF_3$	82907-02-6
para-Sulfonylfluorid-TFS	$C_2F_3-C_6H_4-FSO_2$	185848-06-0
Iodbenzol	$J-C_6H_5$	591-50-4
meta-Trifluormethyl-Iodbenzol	$J-C_6H_4-CF_3$	401-81-0
para-Sulfonylfluorid-Iodbenzol	$J-C_6H_4-FSO_2$	349-52-0
Benzotrichlorid	$C_6H_5-CCl_3$	98-07-7
Benzotrifluorid	$C_6H_5-CF_3$	98-08-8
Diisopropylamin (DIPA)	$H-N-(iPr)_2$	108-18-9
Lithium-Diisopropylamid (LDA)	$Li-N-(iPr)_2$	4111-54-0
Tetrakis(triphenylphosphin)palladium(0)	$Pd-(PPh_3)_4$	14221-01-3
Triethylphosphat (Sulfonierungssagens)	$OP-(OEt)_3$	78-40-0
in Abschnitt 6.3 : sulfoniertes Polyetherketon (PEEK)		
Hydrochinon	$HO-C_6H_4-OH$	123-31-9
4,4'-Methyldianilin (MDA)	$CH_2-(C_6H_4-NH_2)_2$	101-77-9
4,4'-Difluorbenzophenon (DFB)	$F-C_6H_4-CO-C_6H_4-F$	345-92-6
Polyetheretherketon (PEEK)	$[(C_6H_4O)_2-C_6H_4CO]_n$	29658-26-2
in Abschnitt 6.4 : Phosphorsäure-dotiertes Polybenzimidazol (PBI)		
ortho-Chlor-Nitrobenzol	$C_6H_4ClNO_2$	88-73-3
3,3'-Dichlorbenzidin (DCB)	$(C_6H_3ClNH_2)_2$	91-94-1
3,3',4,4'-Tetraaminobiphenyl (TAB)	$(H_2N)_2-(C_6H_4)_2-(NH_2)_2$	91-95-2
Isophthalsäure	$HOOC-C_6H_4-COOH$	121-91-5
Diphenyl-isophthalat (DPI)	$C_6H_4-(COO-C_6H_5)_2$	744-45-6
Polybenzimidazol, Celazol® (PBI)	$[(CN_2H-C_6H_3)_2-C_6H_4]_n$	25928-81-8

8.2 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1.1 : Beispiele für Zielkosten der Brennstoffzelle in verschiedenen Anwendungen [1, p. 3]	5
Tabelle 2.1 : Flächen- und leistungsbezogene Massen von Bipolarplatten-Materialien [8, p. 28]	15
Tabelle 2.2 : tabellarische Übersicht der diskutierten protonenleitenden Polymere	21
Tabelle 3.1 : Kostenbegriffe in der Kostenträgerrechnung (Übersicht)	34
Tabelle 3.2 : Auslegungsdaten der ADL-Studie zur Brennstoffzellen-Pkw-Serienfertigung [79, pp. 21-25]	35
Tabelle 3.3 : Auslegungsdaten EU-Studie zur Stack-Serienfertigung [83, pp. 28-29]	37
Tabelle 3.4 : Auflistung von Materialkosten eines Stack-Prototypen 1998 [84, p. 385]	38
Tabelle 3.5 : Prognose flächen- und massenspezifischer Verkaufspreise von Nafion® [87]	40
Tabelle 3.6 : Marktpreise für ausgewählte Polymere, England, Juni 2002 [91]	42
Tabelle 4.1 : Verfahren der strategischen Kostenrechnung [78, p. 1158]	45
Tabelle 4.2 : erfasste Bilanzgrößen in der Datenbank EUROPROMS	60
Tabelle 4.3 : Ziel von Kostenrechnungen bei verschiedenen Industrieerzeugnissen	63
Tabelle 4.4 : Hauptpositionen und Zuschlagfaktoren [107, p. 452]	66
Tabelle 4.5 : empirische Methoden zur Abschätzung des Anlagenkapitalbedarfs für Chemieanlagen	68
Tabelle 5.1 : Massenanteile des Grafits bei verschiedenen Volumenanteilen (in %)	76
Tabelle 5.2 : spezifische Dichten idealer binärer Gemische aus Grafit und Kunststoff (in g/cm³)	76
Tabelle 5.3 : resultierende Plattengewichte [g] bei 2 mm Dicke (55 cm³ Formvolumen)	77
Tabelle 5.4 : resultierende Plattengewichte [g] bei 1,5 mm Dicke (41,9 cm³ Formvolumen)	77
Tabelle 5.5 : benötigte Einspritzdrücke in bar [17, p. 704]	78

Tabelle 5.6 : erforderliche Schließkräfte der Maschinen nach Gleichung 5.1.....	78
Tabelle 5.7 : zugehörige Investkosten von Spritzmaschinen gemäß Tabelle 5.6.....	79
Tabelle 5.8 : zu erwartende Gesamtinvestition in das Formwerkzeug	79
Tabelle 5.9 : BPP-Produktion - Konstanten und zentrale Betriebsparameter im Basisfall.....	83
Tabelle 5.10 : BPP-Produktion - vom Schichtmodell abhängige Betriebsparameter.....	83
Tabelle 5.11 : Planungsrechnung auf Vollkostenbasis für BPP, mit resultierenden Nettoverkaufspreisen	90
Tabelle 6.1 : Nafion - erforderliche Rohstoffmengen je nach Ausbeute bei der Polymerisation	99
Tabelle 6.2 : BAM3G - Bedarf an Ausgangsstoffen in kg Chemikalie pro kg Ionomer	113
Tabelle 6.3 : Reaktionsdauern für PEEK-Sulfonierungen	122
Tabelle 6.4 : PEEK - erforderliche Rohstoffmengen bei einem Sulfonierungsgrad von 70 %	123
Tabelle 6.5 : PBI - erforderliche Rohstoffmengen für undotiertes Benzimidazol-Polymer	130
Tabelle 6.6 : PBI - erforderliche Rohstoffmengen für säurehaltiges Polymer.....	132
Tabelle 6.7 : Planungsrechnung auf Vollkostenbasis mit resultierenden Nettoverkaufspreisen.....	141
Tabelle 6.8 : Materialeinzelkosten für verschiedene Polymervarianten, aus Bild 6.61	144
Tabelle 6.9 : Fertigungseinzelkosten nach Umlage auf die produzierte Menge	144
Tabelle 8.1 : Investition in das Basiswerkzeug nach [76, pp. 359-362].....	163
Tabelle 8.2 : Materialkosten, abhängig von Zusammensetzung und Preisen je kg Mischung (D 2 mm).....	166
Tabelle 8.3 : Materialkosten, abhängig von Zusammensetzung und Preisen je kg Mischung (D 1,5 mm).....	166
Tabelle 8.4 : leistungsbezogenes Gewicht [kg/kW _{el,brutto}] bei 2 mm Dicke (Tabelle 5.3).....	167
Tabelle 8.5 : leistungsbezogenes Gewicht [kg/kW _{el,brutto}] bei 1,5 mm Dicke (siehe Tabelle 5.4)	167
Tabelle 8.6 : Bewertung der Einzelströme für Nafion® 1100 nach STALLWORTHY	176
Tabelle 8.7 : Bewertung der Einzelapparate für Nafion® 1100 nach WILSON.....	177
Tabelle 8.8 : Eintretende Stoffmengenströme für Nafion® 1100 nach ALLEN UND PAGE.....	178
Tabelle 8.9 : Bewertung der Einzelapparate für Nafion® 1100 nach ALLEN UND PAGE	179
Tabelle 8.10 : Auswertung für die Synthese von Nafion® 1100 nach TAYLOR.....	180
Tabelle 8.11 : Auswertung für die Synthese von sulfoniertem PEEK nach TAYLOR.....	181
Tabelle 8.12 : Auswertung für die Synthese von BAM3G-SC nach TAYLOR.....	182
Tabelle 8.13 : Auswertung für die Synthese von BAM3G-HT nach TAYLOR	183
Tabelle 8.14 : Auswertung für die Synthese von H ₃ PO ₄ -dotiertem PBI nach TAYLOR	184
Tabelle 8.15 : Materialkosten für Platin in US-\$ je kW als Funktion von drei Parametern.....	185

8.3 Abbildungsverzeichnis

Bild 1.1 : Anwendungsobjekte (gelb) des in dieser Arbeit erstellten Kostenmodells	8
Bild 2.1 : Aufbau eines Brennstoffzellenstacks sowie seiner Einzelzellen [4, p. 12].....	9
Bild 2.2 : Aufbau eines kühlbaren Bipolarelements aus zwei Bipolarplatten [6]	11
Bild 2.3 : Spritzgießanlage mit Extrudier-, Werkzeug- und Schließeinheit (v.l.n.r.) [16]	13
Bild 2.4 : Design einer einzelnen Composit-Bipolarplatte.....	14
Bild 2.5 : Wiederholungseinheiten der fünf für Kapitel 6 ausgewählten Polymere.....	21
Bild 2.6 : Platinkatalysator auf Kohlenstoff mit 70 Ma.-% Pt [48].....	23
Bild 2.7 : Herstellung geträgerter Katalysatoren im chemischen Nassverfahren.....	24
Bild 2.8 : Partikel-Modifikationen während der Spray-Verdampfung, nach [56].....	25
Bild 2.9 : REM-Aufnahmen eines mit PTFE beschichteten Kohlefasergewebes [62]	27
Bild 2.10 : MEA-Einheit mit Membran, Katalysatorschichten und Gasdiffusionslagen. Dicke ~ 1,1 mm [64]	27
Bild 2.11 : Schematische Darstellung einer Anlage zur nasschemischen Beschichtung [72].....	29
Bild 2.12 : MEA-Aufbau über Katalysator-beschichtete Membranen, nach [70]	29
Bild 2.13 : MEA-Aufbau über Katalysator-beschichtete Gasdiffusionslagen, nach [70].....	30
Bild 2.14 : vollautomatisierbare, kontinuierliche Herstellung fünfflagiger MEAs [73]	31
Bild 3.1 : ADL-Studie, Kostenverteilung auf die Stack- und MEA-Komponenten [79, p. 31]	36
Bild 3.2 : Prognose von SGL Carbon zu PEFC-Prototypen und Losgrößen von 10 ³ - 10 ⁴ [82]	36
Bild 3.3 : leistungsbezogene Herstellkosten und Gewicht eines metallischen BPE gemäß [85]	38

Bild 3.4 : Schätzung des Verkaufspreises perfluorierter, gegossener Membranen [87]	40
Bild 3.5 : Zusammenhang zwischen Preisen von Polymeren und deren Jahresproduktion [88, p. 118].....	41
Bild 3.6 : Entwicklung des US-Preisindex für Kunststoffe während der 90er Jahre [90, p. 483]	41
Bild 3.7 : Wechselkursentwicklung zwischen britischem £ und US-\$ [94]	43
Bild 4.1 : Das Prozesskosten-Benchmarking im Umfeld der Entwicklung von PEFC-Stacks	46
Bild 4.2 : Übertragung der Zielgrößen in Kennzahlen und deren Parameter	49
Bild 4.3 : Modell eines BZ-Moduls aus mehreren Stacks mit MEAs, BPEs und Endelementen	49
Bild 4.4 : Mögliche Elemente der Wiederholungseinheiten sowie deren ungefähre Dicke	51
Bild 4.5 : einfaches Beispielmodell für eine Monte-Carlo-Analyse	57
Bild 4.6 : Wechselkursverhältnis zwischen Euro und US-amerikanischem Dollar (Tageskurse).....	57
Bild 4.7 : modellierte Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Wechselkursverhältnis US-\$:Euro [74, p. 45].....	58
Bild 4.8 : Histogramm der EUROPROMS-Informationen für PTFE (287 Datenpunkte)	61
Bild 4.9 : Bereiche von 68 % und 90 % Wahrscheinlichkeit für PTFE-Handelspreise gemäß Bild 4.8	62
Bild 4.10 : Kostenindex für den chemischen Anlagenbau in den USA zwischen 1960 und 2002 [118]	71
Bild 5.1 : Übersicht von Struktur-Wirkungsbeziehungen bei Bipolarplatten mit Auswahl an Parametern	73
Bild 5.2 : Abmessungen und Strömungen einer Bipolarplatte (gestrichelt: Aktivfläche A)	74
Bild 5.3 : Querschnitt einer Bipolarplatte beziehungsweise eines Bipolarelements.....	75
Bild 5.4 : Investitionskosten von Spritzgussmaschinen als Funktion ihrer Schließkraft [119]	78
Bild 5.5 : Preise für Grafit und Kunststoffe (Quelle EUROPROMS, zur Art der Darstellung siehe Bild 4.9).....	80
Bild 5.6 : Kosten von Mischungen mit 60 Vol.-% Grafit (EUROSTAT-Daten, MC-Analyse)	80
Bild 5.7 : Materialaufwand, abhängig von Zusammensetzung und Preisen je kg Mischung (D = 2 mm).....	81
Bild 5.8 : Materialaufwand, abhängig von Zusammensetzung und Preisen je kg Mischung (D = 1,5 mm).....	81
Bild 5.9 : BPP-Produktion - Fertigungskosten je Platte, mit Annahmen aus Tabelle 5.9 und 5.10	84
Bild 5.10 : Anteile der einzelnen Kostenarten an den Fertigungskosten im Basisfall.....	85
Bild 5.11 : Variation der Einflussgrößen Zykluszeit, Auslastungsgrad und Ausschuss.....	86
Bild 5.12 : Herstellkosten von BPP aus Grafit-Kunststoff-Compounds, je Stück	87
Bild 5.13 : Herstellkosten von BPP je kg Gewicht der Platten	88
Bild 5.14 : Herstellkosten von BPP aus Grafit-Kunststoff-Compounds, je kW elektrischer Leistung	89
Bild 5.15 : Anteile der Kostenarten am Bruttoproduktionswert, deutsche Kunststoffverarbeitung 2001 [120]	90
Bild 6.1 : Residualer Produktionskostenanteil bei hoher Anlagenkapazität	93
Bild 6.2 : Nafion - Polymerisation aus TFE und dem Co-Monomer PSEPVE [122, Ex. XVII]	94
Bild 6.3 : Nafion - Darstellung des Co-Monomers PSEPVE aus TFE, SO ₂ und HFPO	94
Bild 6.4 : Nafion - Funktionalisierung der protonenleitenden Gruppe [122, Ex. V].....	95
Bild 6.5 : Nafion - Verfahrensschema der Synthese von FDA, nach [126]	95
Bild 6.6 : Nafion - Verfahrensschema der Synthese von reinem HFPO, nach [130, 134].....	96
Bild 6.7 : Nafion - Verfahrensschema der Synthese und Isolierung des Diaddukts, nach [127]	97
Bild 6.8 : Nafion - Vergleich der Isomere PSEPVE und iso-PSEPVE.....	97
Bild 6.9 : Nafion - Verfahrensschema der Synthese und Isolierung von PSEPVE, nach [128].....	98
Bild 6.10 : Nafion - Verfahrensschema der Polymerisation, nach [123], [128, Ex. 4], [122, Ex. VIII]	98
Bild 6.11 : Gewinnung von TFE aus Methan, Chlor, Flußspat und Schwefelsäure [138, p. 25].....	99
Bild 6.12 : modellierte Wahrscheinlichkeitsverteilung für NaOCl	100
Bild 6.13 : Preise wichtiger Nafion®-Chemikalien (Quelle EUROPROMS, zur Darstellung siehe Bild 4.9).....	101
Bild 6.14 : Monte-Carlo-Modell für die Nafion®-Synthese, ohne Nebenprodukte.....	101
Bild 6.15 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von Nafion® 1100 und Anteile der Edukte	102
Bild 6.16 : Nafion - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion.....	103
Bild 6.17 : Nafion - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkül. Zins)	104
Bild 6.18 : BAM3G - Polyreaktion von sulfoniertem Copolymer (SC) und hydrolysiertem Terpolymer (HT)	105
Bild 6.19 : BAM3G - Darstellung der Monomere aus ihren Iod-Derivaten [146]	106
Bild 6.20 : BAM3G - Synthese von para-Fluorsulfonyl-iodbenzol.....	106
Bild 6.21 : BAM3G - Darstellung des Intermediats meta-Trifluormethyl-iodbenzol.....	107
Bild 6.22 : BAM3G - Synthese von Iodbenzol aus Benzol, Iod und Luft, nach [147].....	108
Bild 6.23 : BAM3G - Synthese von para-Fluorsulfonyl-iodbenzol, nach [149, Ex. 1]	108

Bild 6.24 : BAM3G - Synthese von meta-Trifluormethyl-Iodbenzol, nach [156,157,158].....	109
Bild 6.25 : BAM3G - Trifluorvinylierung der Iodbenzol-Derivate, nach [146, 160].....	110
Bild 6.26 : BAM3G - Polymerisation und Sulfonierung zu BAM3G-SC, nach [149, 159].....	111
Bild 6.27 : BAM3G - Polymerisation und alkalische Hydrolyse zu BAM3G-HT, nach [144, 149].....	112
Bild 6.28 : Preise wichtiger BAM3G-Chemikalien (Quelle EUROPROMS, zur Darstellung siehe Bild 4.9).....	113
Bild 6.29 : Preise wichtiger Chemikalien zur Trifluorvinylierung, Polymerisation und Sulfonierung	114
Bild 6.30 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von BAM3G-SC; Anteile wichtiger Edukte	115
Bild 6.31 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von BAM3G-HT; Anteile wichtiger Edukte	115
Bild 6.32 : BAM3G - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion (SC)	116
Bild 6.33 : BAM3G - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion (HT)	117
Bild 6.34 : BAM3G-SC - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkul. Zins)	118
Bild 6.35 : BAM3G-HT - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkul. Zins).....	118
Bild 6.36 : PEEK - Polykondensation aus Hydrochinon und 4,4'-Difluorbenzophenon (DFB)	119
Bild 6.37 : PEEK - Synthese des Co-Monomers 4,4'-Difluorbenzophenon (DFB) [165].....	119
Bild 6.38 : PEEK - Synthese de Co-Monomers DFB auf der Basis von MDA, nach [165].....	120
Bild 6.39 : PEEK - Polykondensation aus Difluorbenzophenon und Hydrochinon, nach [164].....	121
Bild 6.40 : PEEK - Sulfonierung und Gießen einer Membran aus der PEEK-NMP-Lösung	122
Bild 6.41 : Preise wichtiger PEEK-Chemikalien (Quelle EUROPROMS , zur Darstellung siehe Bild 4.9).....	123
Bild 6.42 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von sPEEK und Anteile der Edukte.....	124
Bild 6.43 : PEEK - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion	125
Bild 6.44 : sPEEK - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkul. Zins).....	126
Bild 6.45 : PBI - Polykondensation aus 3,3',4,4'-Tetraamino-Biphenyl und Diphenyl-Isophthalat	126
Bild 6.46 : PBI - Synthese von Dichlorbenzidin (DCB), Ausgangsstoff für TAB [172].....	127
Bild 6.47 : PBI - Synthese des Monomers TAB aus DCB	127
Bild 6.48 : PBI - Synthese des Monomers Diphenyl-Isophthalat (DPI).....	127
Bild 6.49 : PBI - Produktion und Reinigung des Monomers TAB, nach [174].....	128
Bild 6.50 : PBI - Produktion und Reinigung des Monomers DPI, nach [176].....	129
Bild 6.51 : PBI - Polykondensation, Dotierung mit dem Protonenleiter H ₃ PO ₄ und Filmgießen.....	130
Bild 6.52 : Handelspreise von PBI-Basischemikalien (Quellen: EUROPROMS , Acros 2002, Merck 2001)	131
Bild 6.53 : Massenanteil der Phosphorsäure am PBI-Ionomer als Funktion der Dotierung.....	131
Bild 6.54 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten von reinem PBI und Anteile der Edukte	132
Bild 6.55 : PBI - Materialkosten im ionenleitenden, säuredotierten Polymer	133
Bild 6.56 : PBI - Massenströme in den Anlageneinheiten bei Großmengenproduktion	133
Bild 6.57 : PBI - Kapitalbedarf einer Anlage von 2.500 Tonnen p.a. (AfA 10 a, 10 % kalkul. Zins)	134
Bild 6.58 : Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Materialkosten nach der MC-Analyse	135
Bild 6.59 : Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen, Schnittdarstellung.....	135
Bild 6.60 : Wahrscheinlichkeitsverteilungen für flächenbezogene Materialkosten (bei 1 Annahme).....	136
Bild 6.61 : Wahrscheinlichkeitsverteilung für leistungsbezogene Materialkosten (bei 2 Annahmen).....	136
Bild 6.62 : relative Materialkosten verschiedener Paarungen von Polymeren.....	137
Bild 6.63 : Investkostenschätzungen für Polymer-Produktionsanlagen mit 2.500 t p.a.	138
Bild 6.64 : Umlage des Anlagenkapitalbedarfs auf das Ionomermembrangewicht.....	139
Bild 6.65 : Anteile der Kostenarten am Bruttoproduktionswert, deutsche chemische Industrie 2001 [120]	140
Bild 8.1 : Gesamt-Platzbedarf von Spritzgussmaschinen in Fertigungshallen.....	162
Bild 8.2 : installierte elektrische Leistung von Spritzgussmaschinen (Antrieb:Heizung ~ 4:3).....	162
Bild 8.3 : Schnittbild einer Werkzeugauslegung mit 1 beziehungsweise 2 Kavitäten	163
Bild 8.4 : Materialkosten von Natur- und Synthesegrafit sowie 3 Kunststoffarten, ungemischt	165
Bild 8.5 : Kosten von Mischungen mit 70 Vol.-% Grafit (EUROSTAT-Daten, MC-Analyse).....	165
Bild 8.6 : Kosten von Mischungen mit 80 Vol.-% Grafit (EUROSTAT-Daten, MC-Analyse).....	166
Bild 8.7 : jährlich verarbeitete Mengen an Compound in Abhängigkeit von der Zykluszeit	167
Bild 8.8 : Entwicklung des Platinpreises seit 1960. links: Originaldaten, rechts: US-\$(2002).....	185

8.4 Kollektionen der Datenbank EUROPROMS

Erläuterungen siehe Seite 59. Zahl der insgesamt kategorisierten Gruppen : 5.719

Anzahl	Branchen	Kennung	NACE-Code
818	Chemische Industrie	ep24	NACE 24
815	Maschinenbau	ep29	NACE 29
479	Textilgewerbe	ep17	NACE 17
411	Ernährungsgewerbe	ep15	NACE 15
384	Metallerzeugung und -bearbeitung	ep27	NACE 27
362	Herstellung von Metallerzeugnissen	ep28	NACE 28
321	Bekleidungsgewerbe	ep18	NACE 18
276	Herstellung von Geräten der Elektrizitätserzeugung, -verteilung u. ä.	ep31	NACE 31
263	Medizin-, Meß-, Steuer- und Regelungstechnik, Optik	ep33	NACE 33
245	Herstellung von Gummi- und Kunststoffwaren	ep25	NACE 25
244	Möbel, Schmuck, Musikinstrumente, Sportgeräte, Spielwaren etc.	ep36	NACE 36
188	Glasgewerbe, Keramik, Verarbeitung von Steinen und Erden	ep26	NACE 26
137	Papiergewerbe	ep21	NACE 21
129	Sonstiger Fahrzeugbau	ep35	NACE 35
119	Rundfunk-, Fernseh- und Nachrichtentechnik	ep32	NACE 32
93	Holzgewerbe (ohne Herstellung von Möbeln)	ep20	NACE 20
89	Herstellung von Kraftwagen und Kraftwagenteilen	ep34	NACE 34
85	Gewinnung von Steinen und Erden, sonstiger Bergbau	ep14	NACE 14
82	Verlags- und Druckgewerbe, Kopieren von Ton-, Bild- und Datenträgern	ep22	NACE 22
59	Ledergewerbe	ep19	NACE 19
40	Herstellung von Büromaschinen, DV-Geräten und -einrichtungen	ep30	NACE 30
34	Kokerei, Mineralölverarbeitung, Spalt- und Brutstoffe	ep23	NACE 23
19	Energieversorgung	ep40	NACE 40
12	Erzbergbau	ep13	NACE 13
6	Kohlenbergbau, Torfgewinnung	ep10	NACE 10
5	Tabakverarbeitung	ep16	NACE 16
4	Gewinnung von Erdöl und Erdgas; entsprechende Dienstleistungen	ep11	NACE 11

8.5 Exemplarisch ausgewählte Datensätze aus der Datenbank EUROPROMS

Erläuterungen siehe Seite 59.

Ident-Nr.	Beschreibung
10.20.10.50	Braunkohlenbriketts
11.10.10.30	Rohöl (natürlich vorkommendes Mineralöl)
13.20.13.00	Aluminiumerze und ihre Konzentrate
14.22.11.40	Kaolin, auch gebrannt
15.20.13.53	Pazifischer Lachs, Atlantischer Lachs und Donaulachs, geräuchert
16.00.11.50	Zigaretten, Tabak enthaltend
17.72.10.55	Unterziehpullis aus Chemiefasern
18.24.22.30	Skianzüge (ohne solche aus Gewirken oder Gestricken)
19.10.33.30	Leder von Schweinen, nur gegerbt
20.10.10.37	Kiefern schnittholz, 'Pinus sylvestris L.', Dicke > 6 mm
21.23.12.30	Briefumschläge
22.12.10.00	Zeitungen, mind. 4 x wöchentlich erscheinend (z.B. Tageszeitungen)
23.20.12.00	Leichter Flugturbinenkraftstoff (Erdöldestillat, 100-250 °C, für Flugturbinen)
24.13.14.33	Schwefelsäure
24.14.12.50	Styrol
24.16.30.60	Polytetrafluorethylen, in Primärformen
24.16.56.50	Phenolharze, in Primärformen
24.41.51.45	Vitamin B12 und seine Derivate, ungemischt
24.52.18.50	Zahnputzmittel
24.66.44.00	Aktivkohle
26.11.11.75	Gezogenes oder geblasenes Glas, in Tafeln, aus optischem Glas
26.51.12.10	Weißer Portlandzement
27.10.30.05	Flüssigstahl, nichtrostend, für Stahlguß
28.30.12.50	Kondensatoren für Dampfkraftmaschinen
28.62.40.74	Drehwerkzeuge für die Metallbearbeitung
28.73.13.13	Endlose Gewebe aus Eisen oder Stahldraht, für Maschinen
28.74.14.55	Tellerfedern aus Eisen oder Stahl
29.11.13.11	Dieselmotoren für Wasserfahrzeuge mit einer Leistung < 100 kW
29.12.22.30	Dosierpumpen
29.14.22.30	Kurbelwellen
29.14.24.50	Schaltgetriebe
29.21.13.53	Induktionsöfen
29.24.11.50	Destillier- und Rektifizierapparate
29.51.12.50	Walzen für Metallwalzwerke
29.71.27.00	Mikrowellengeräte
31.40.23.83	Nickel-Hydrid-Akkumulatoren
32.10.52.35	Leuchtdioden
33.10.15.53	Künstliche Nieren
35.20.12.00	Dieselelektrische Lokomotiven
36.30.11.10	Klaviere mit aufrecht stehendem Rahmen
36.50.42.00	Videospiele, von der mit einem Fernsehempfangsgerät verwendeten Art
40.30.10.07	Wärme aus Heizkraftwerken mit KWK, die an Dritte verkauft wird

8.6 Auswerten von EUROPROMS-Daten

Ziel: Ermittlung von Informationen über massenbezogene Preise in Euro/kg für einzelne in der PRODCOM-Liste EU-weit erfasster Gütergruppen

Schritt 1: geeignete Gütergruppen und deren Prodcom-Code ermitteln

- ◆ Exceltabelle Prodcomliste2002de.xls öffnen und Gütergruppe suchen
- ◆ entsprechenden 8-stelligen Identcode identifizieren (Textsuche Strg-F empfohlen)

Schritt 2: entsprechende Datentabellen aus EUROPROMS von EUROSTAT aufrufen

Anwendung "Eurostat NewCronos" starten (THEME 4: Industrie, Handel und Dienstleistungen)

- ◆ In der Browser-Oberfläche Sprache wählbar:

"Accès à NewCronos" = französisch

"Acces to NewCronos" = englisch

"Zugang zu NewCronos" = deutsch

- ◆ Haftungsausschluss akzeptieren
- ◆ THEME 4 anklicken, dann EUROPROM
- ◆ Branche auswählen (ep10..36) - Die Zahl entspricht den ersten beiden Ziffern im 8-stelligen Prodcom-Identcode.

Hier stehen 4 Datenwerke zur Verfügung:

"Mengendaten jährlich" (ep..qa) 'quantities, annual'

"Mengendaten vierteljähr." (ep..qq) 'quantities, quarterly'

"Wertdaten jährlich" (ep..va) 'values, annual'

"Wertdaten vierteljähr." (ep..vq) 'values, quarterly'

- ◆ Auswertungshilfen (Makros) sind auf nur für die jährlichen Werte entwickelt worden. Für jede Gütergruppe hier genau eine Extraktion (csv-Datei) aus ...qa und ...va erforderlich.

Schritt 3: Mengendaten der Gütergruppe aufrufen und exportieren

- ◆ "ep...qa" anklicken, dann "EVA Software" (genaue EVA-Programmbeschreibung s. dort)

Verschiedene Achsenformate für die Tabellen sind möglich. Hinterlegt ist eine vordefinierte Ansicht als .hdr-Datei, die sich öffnet durch...

- ◆ <File><Apply View>. Im separaten Fenster <Browse> view_quantities.hdr <Open>

Nun gewünschte Prodcom-Gruppe auswählen durch Rechtsklick über dem Feld <prod> und Funktion <Filter>. Im separaten Fenster (linker Teil) die Gruppe anklicken (z.B. 24131111 - Chlor), dann <Apply> und <Ok>.

- ◆ Feld <unit> auf die Maßeinheit einstellen, in der die Produktgruppe erfasst wird.

(im allgemeinen "kg"). Achtung unter anderem bei Säuren, die wasserfrei erfasst werden; Schwefelsäure z.B. als kg_so3, Phosphorsäure als kg_p2o5, Fluss-Säure als kg_hf. Hier ist bei der späteren Verwendung der Kostenangaben ein Korrekturfaktor erforderlich, basierend auf dem Verhältnis der Molekulargewichte!

- ◆ Zum Exportieren der Daten: Menü <Exports><Tables><CSV>

Dort noch zwei Einstellungen ändern: Registrierkarte...

...<Dimensions><prod> : Label = Code + Label

...<Output Parameters> : Regional Settings = Decimal as comma (delim. = ";")

<Ok>

Dateiname z.B. = 24131111_qa (Prodcom-Nr + Information 'quantities, annual')

- ◆ Speichern und EVA-Anwendung schließen

Im Browser erscheint nun die Information

EVA launching windows (time=12:44:01) program successfully (?) terminated

- ◆ Im Browser 2 x <Zurück> anklicken zum wieder zur ep...-Auswahl zu gelangen.

Schritt 4: Wertdaten der Gütergruppe aufrufen und exportieren

- ◆ "ep...va" anklicken, dann "EVA Software" (genaue EVA-Programmbeschreibung s. dort)
verschiedene Achsenformate für die Tabellen sind möglich. Hinterlegt ist eine Ansicht als .hdr-Datei, die sich öffnet durch ...

- ◆ <File><Apply View>. Im separaten Fenster <Browse> view_values.hdr <Open>

Nun gewünschte Prodcom-Gruppe auswählen durch Rechtsklick über dem Feld <prod> und Funktion <Filter>. Im separaten Fenster (linker Teil) die Gruppe anklicken (z.B. 24131111 - Chlor), dann <Apply> und <Ok>.

- ◆ Im Feld <unit> die Maßeinheit "ecu" auswählen.

Der Euro ist nach Festsetzen der Wechselkurse 1998 direkt aus der European Currency Unit hervorgegangen, so dass in späteren Darstellungen hier auch der Begriff "Euro" verwendet werden kann. Vor 1998 konnte allerdings der Wechselkurs einer Landeswährung zum 'ECU' noch geringfügig schwanken.

- ◆ Zum Exportieren der Daten: Menü <Exports><Tables><CSV>

Dort noch zwei Einstellungen ändern: Registrierkarte...

...<Dimensions><prod> : Label = Code + Label

...<Output Parameters> : Regional Settings = Decimal as comma (delim. = ";")

<Ok>

Dateiname z.B. = 24131111_va (Prodcom-Nr + Information 'values, annual')

- ◆ Speichern und EVA-Anwendung schließen
- ◆ Browser schließen und im Hauptfenster "Stop NewCronos"

Schritt 5: csv-Dateien in Excel importieren

- ◆ Excel aufrufen, <Datei><öffnen>.

Unter <Dateityp> Option "Alle Dateien (*.*)" einstellen.

- ◆ Die 2 csv-Dateien nacheinander öffnen, also z.B. 24131111_va und 24131111_qa, dabei <Getrennt> anstatt <feste Breite>, <Semikolon> anklicken, <Ende>.

- ◆ In der Arbeitsmappe "24131111_qa" :

Rechtsklick auf den Namen des Tabellenblattes (z.B. 24131111_qa)

<Verschieben/kopieren...>

"Zur Mappe:" einstellen auf "24131111_va", Doppelklick auf "(ans Ende stellen)".

Excel wechselt automatisch in die Arbeitsmappe 24131111_va (jetzt mit 2 Blättern) und schließt die "24131111_qa"-Datei.

- ◆ Die beiden Tabellenblätter jetzt in "v" und "q" umbenennen

Schritt 6: Dateien in Excel mit Makros aufbereiten

Für die Aufbereitung der Daten stehen sieben Excel-Makros zur Verfügung, die der Reihe nach eingesetzt werden. Zunächst werden die ersten fünf direkt nacheinander ausgeführt :

- ◆ Quotienten erzeugen
- ◆ Linienmedian und Anzahl
- ◆ Linienkonsistenz (Tabelle)
- ◆ Spaltenkonsistenz (Tabelle)
- ◆ Neue Grafik

Dabei werden auf einem sich automatisch erstellenden dritten Tabellenblatt die Quotienten aus "v" und "q" in den einzelnen Zellen ausgegeben. Rechts daneben und darunter erscheinen die Mittelwerte der Zeilen (zum Beispiel "Finnland ee" über die Jahre 1994-2000) und die Mittelwerte der Spalten (zum Beispiel "1996" über alle Länder und Bezugsgrößen).

In zwei weiteren Blöcken, die sich rechts anschließen, erfolgt eine Analyse der prozentualen Abweichungen der Einzelwerte vom Linien-Mittelwert (Linienkonsistenz) und die der Einzelwerte vom Spalten-Mittelwert (Spaltenkonsistenz).

Darüber ist die Eingabe von oberen und unteren Schranken möglich, außerhalb derer Zellen rot markiert werden. Dies ist die Grundlage der Konsistenzprüfung. Maximal etwa drei Prozent der Ergebnisse dürfen hier aus der Stichprobe entfernt werden (linker Block, die Zellen sind entsprechend rot zu kennzeichnen). Basis hierfür ist die Indikation einer starken Abweichung (in der Regel > Faktor 10) innerhalb des Jahresverlaufs oder relativ zum Mittelwert aller Länder und Bezugsgrößen. Hierdurch sollen Fehler in der Statistik bereinigt werden.

- ◆ Histogramm Vorbereiten

Ist dies geschehen, so kann mit dem sechsten Makro die Erstellung des Histogramms vorbereitet werden. Sie erfolgt dann manuell über den Aufruf der Analyse-Funktion "Histogramm" in Excel: <Extras><Analysefunktionen><Histogramm>. Entsprechende Hinweise erscheinen in den Tabellenblättern automatisch.

- ◆ Histogramm Abbilden

Nach der Durchführung des Excel-Add-Ins zur Histogrammerstellung baut das letzte Makro eine Grafik auf, die die Verteilung der Werte in Euro/kg für die analysierte Gütergruppe aus EURO-PROMS zeigt. Die Datei enthält nun neben der Summenverteilung auch eine Möglichkeit, die Schwellwerte S_5 , S_{16} , S_{50} , S_{84} und S_{95} direkt abzulesen. Sie ist als normale Exceldatei abzuspeichern, vorzugsweise unter einem Namen wie <24131111_Chlor.xls>.

8.7 Composit-Spritzguss : Maschinendaten und Werkzeug-Kostenkalkulation

Zu Seite 79 : Platzbedarf und installierte Gesamtleistung für diverse Spritzgussmaschinen. Die beanspruchte Hallenfläche dient als Verteilungsschlüssel für die Abschreibungen des Gebäudes. Gemeinsam mit einem Leistungsnutzungsfaktor geht die installierte Leistung in die Energiekosten der Fertigung ein.

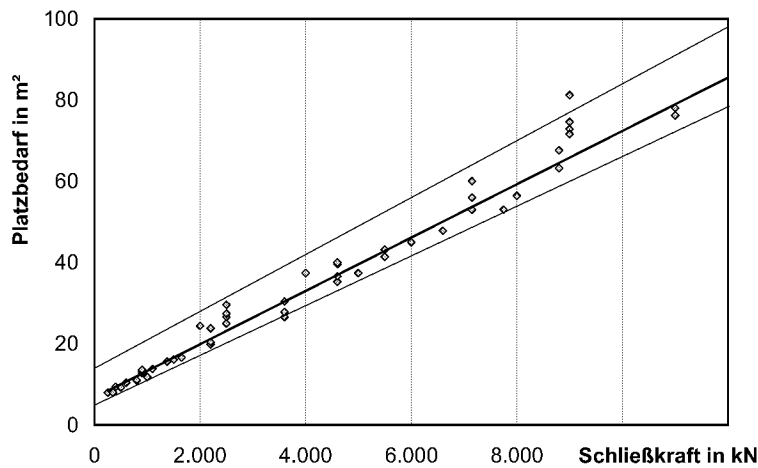


Bild 8.1 : Gesamt-Platzbedarf von Spritzgussmaschinen in Fertigungshallen

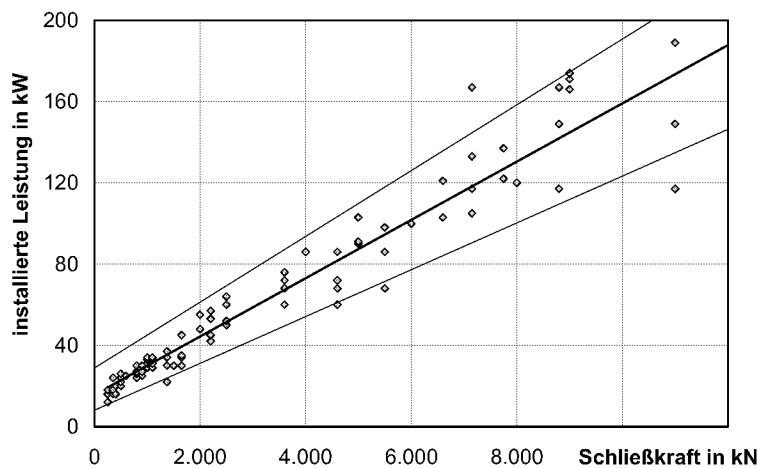


Bild 8.2 : installierte elektrische Leistung von Spritzgussmaschinen (Antrieb:Heizung ~ 4:3)

Die Kosten für ein Werkzeug lassen sich prinzipiell in zwei Bestandteile separieren [76, p. 359] :

- ◆ Basiskosten für Platten, Säulen, Führungsbuchsen und dergleichen
- ◆ Aufwendungen für die Formung der eigentlichen Kavität und eventueller Kerne

Die Basiskosten erweisen sich mit guter Genauigkeit als eine Funktion der Plattenfläche sowie der Werkzeugdicke [76, pp. 359 und 362]. Eine Näherungsformel hierfür ist

$$\frac{K_{W,B}}{\text{US-\$(2002)}} = 2 \cdot \left(1000 + 0,45 \cdot \frac{F_{W,B}}{\text{cm}^2} \cdot \frac{D_W^{0,4}}{\text{cm}^{0,4}} \right) \quad (\text{Gl. 8.1})$$

$K_{W,B}$ = Basiskosten des Werkzeugs

$F_{W,B}$ = Projektionsfläche des Werkzeugs in Trennebene

D_W = gesamte Werkzeugdicke

Gegenstand ist das 24 x 16 cm-Design wie in Kapitel 5 beschrieben (Seite 74). Bei einer Grobauslegung empfiehlt sich das nachfolgend gezeigte Design für ein Werkzeug mit 1 beziehungsweise 2 Kavitäten. Randabstände sollten mindestens 7,5 cm betragen, mit einer Zugabe von 1 cm je 200 cm² Formteillfläche.

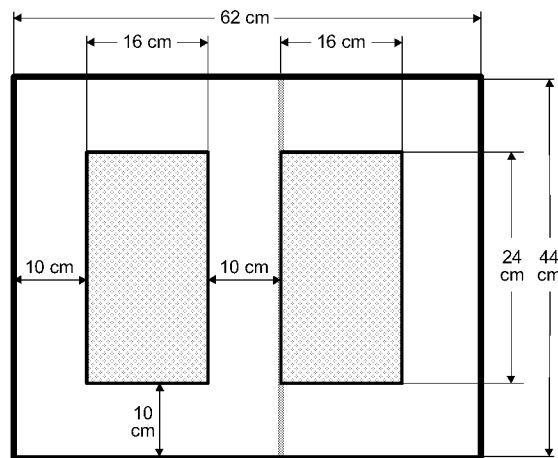


Bild 8.3 : Schnittbild einer Werkzeugauslegung mit 1 beziehungsweise 2 Kavitäten

Die entsprechenden Projektionsflächen $F_{W,B}$ betragen 1584 beziehungsweise 2728 cm². Bei einer angenommenen Gesamt-Werkzeugdicke von 30 cm und einer Verdoppelung (vergleiche Kapitel 4.2) folgen hieraus in Tabelle 8.1 gezeigte Preise für das Basiswerkzeug [76, p. 362].

Tabelle 8.1 : Investition in das Basiswerkzeug nach [76, pp. 359-362]

	B x H x D _W [cm]	Fläche F _{W,B} [cm ²]	A _{W,B} x D _W ^{0,4} [cm ^{2,4}]	K _{W,B} US-\$(2002)
bei 1 Kavität	36 x 44 x 30	1584	6.175	7.557
bei 2 Kavitäten	62 x 44 x 30	2728	10.634	11.571

Die Fertigungsdauer einer Kavität lässt sich aus drei Anteilen aufsummieren [76, p. 364] :

$$T_{Kav} = T_{AS} + T_F + T_{geo}$$

$$\frac{T_{Kav}}{h} = 2,5 \cdot \sqrt{\frac{F_{Kav}}{cm^2}} + f_{Oberfl} \cdot \left(5 + 0,085 \cdot \frac{F_{Kav}^{1,2}}{cm^{1,2}} \right) + f_{Oberfl} \cdot f_{Tol} \cdot 5,83 \cdot (X_{vorder} + X_{rück})^{1,27} \quad (Gl. 8.2)$$

T_{AS} = Zeit zur Fertigung der Auswerfeinheiten (Anzahl proportional zur Fläche)

T_F = Zeit zur Fertigung der Kavität als Funktion ihrer Größe

T_{geo} = Zeit zum Abbilden der Oberflächengeometrien (Design)

f_{Oberfl} = Faktor zur Beschreibung der Oberflächenbehandlung (1...1,4)

f_{Tol} = Faktor zur Berücksichtigung enger Toleranzen (1...1,3)

Um die Komplexität der räumlichen Struktur zu erfassen, wird die Anzahl der einzelnen Oberflächensegmente auf Vorder- und Rückseite der Platte aufsummiert. Die Division durch 10 liefert dann die Werte für X in Gleichung 8.2. Für sich regelmäßig wiederholende Strukturelemente empfiehlt sich eine Potenzierung ihrer Anzahl mit 0,7 [76, p. 363]. Exemplarisch ergeben sich für eine BPP mit einer Gas- und einer Kühlseite folgende Werte...

... für die Gasseite :

Andruckfläche, 6 Flächen der Sammelkanäle, 14 Mäander- und 4 Dichtkanäle à 3 Oberflächen

... für die Kühlseite :

Andruckfläche, 6 Flächen der Sammelkanäle, 4 Mäander- und 4 Dichtkanäle à 3 Oberflächen

$$X_{vorder} = X_{Gas} = 0,1 \cdot \left[1 + 6 + ((14 + 4) \cdot 3)^{0,7} \right] = 2,33$$

$$X_{rück} = X_{Kühl} = 0,1 \cdot \left[1 + 6 + ((4 + 4) \cdot 3)^{0,7} \right] = 1,63 \quad (Gl. 8.3)$$

Die Anforderung hoher Planparallelität der Platten (siehe 2.1, Seite 11) führt zu einem Toleranz-Zuschlagfaktor [76, p. 366], der hier zu 1,2 gesetzt wird. Hinzu kommt ein Faktor für die Oberflächenbehandlung, der sich auf T_F und T_{geo} auswirkt. Aufgrund der erforderlichen Oberflächenhärtung zum Schutz gegen Abrasion beinhaltet die Rechnung ein f_{Oberfl} von 1,25. Mit der Projektionsfläche von $F_{Kav} = 384 \text{ cm}^2$ folgt aus Gleichung 8.2 schließlich eine Fertigungszeit von $T_{Kav} = 50 + 140 + 50 = 240$ Stunden. Bei nicht kühlbaren Platten mit 2 Strömungsfeldern für Gase ist die Zeit mit 251 Stunden nur knapp 5 % höher.

Als durchschnittlichen Stundensatz setzt die Kalkulation 40 US-\$(2002)/h an [76, p. 369]. Eine direkte Übertragung auf europäische Verhältnisse ist aber nicht möglich. Eine Suche nach entsprechendem Datenmaterial führte auf eine Kostenuntersuchung deutscher Werkzeug- und Formenbauer [182], aus der Maschinen- und Mitarbeiterstundensätze von 44,16 und 50,22 DM hervorgehen; in Summe also 48,26 Euro(2001). Hiermit ergeben sich für die kühlbaren Platten Kavitätskosten von $K_{W,K}(1) = 11.560 \text{ Euro}(2001)$. Bei Fertigung von zwei identischen Kavitäten tritt eine merkliche Kostendegression ein [76, p. 371] :

$$K_{W,K}(2) = K_{W,K}(1) \cdot 2^{0,7} \quad (Gl. 8.4)$$

Dies führt auf einen Wert von $K_{W,K}(2)$ von 18.780 Euro(2001). Zugleich erhöhen sich aber auch die Basiskosten für das Werkzeug gemäß Tabelle 8.1. Die Gesamtinvestition in das Werkzeug ergibt sich somit in Summe als $K_W(n_{Kav.}) = K_{W,B}(n_{Kav.}) + 2 \cdot K_{W,K}(n_{Kav.})$. Die Zahlen fasst Tabelle 5.8 (Seite 79) zusammen. Wie für die Basiskosten, so ergibt sich auch die Investition für die

Kavität aus einer Verdoppelung der Herstellkosten (siehe Kapitel 4.2, Seite 47) . Ein kurzer Rückblick auf Bild 4.6 (Seite 57) bestätigt, dass eine 1:1-Übertragung von US-Dollar in Euro hier zulässig ist.

8.8 Composit-Spritzguss : Kostenaspekte von Bipolarplatten

Zu Seite 80 : EUROPROMS-Analyse von 2 Grafitarten und 3 Kunststoffen.

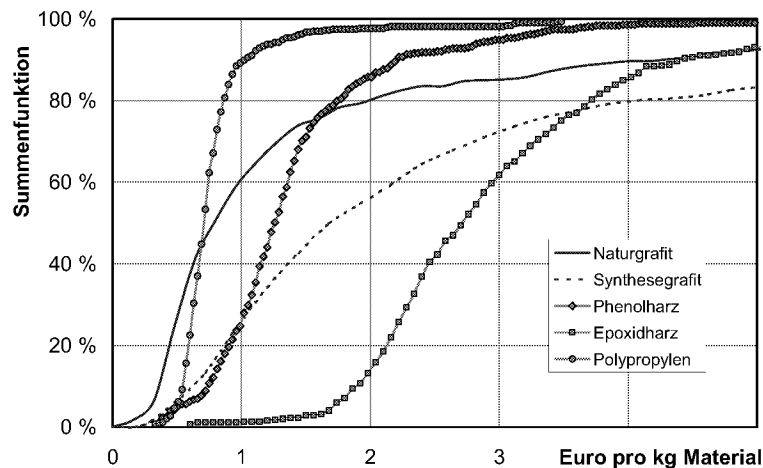


Bild 8.4 : Materialkosten von Natur- und Synthesegrafit sowie 3 Kunststoffarten, ungemischt

Die Schnittpunkte zwischen den Funktionen für Grafit und Kunststoff stellen Wendepunkte im Kostenverhalten der binären Mischung dar: Unterhalb führt eine Erhöhung des Grafitanteils zu einer preiswerteren Mischung, oberhalb verteuert sich das Composit durch Zugabe von mehr Grafit. Dies kann in den folgenden beiden Bildern mit 70 beziehungsweise 80 Vol.-% Grafit beobachtet werden. (Diagramm mit 60 Vol.-% Grafit siehe Bild 5.6, Seite 80)

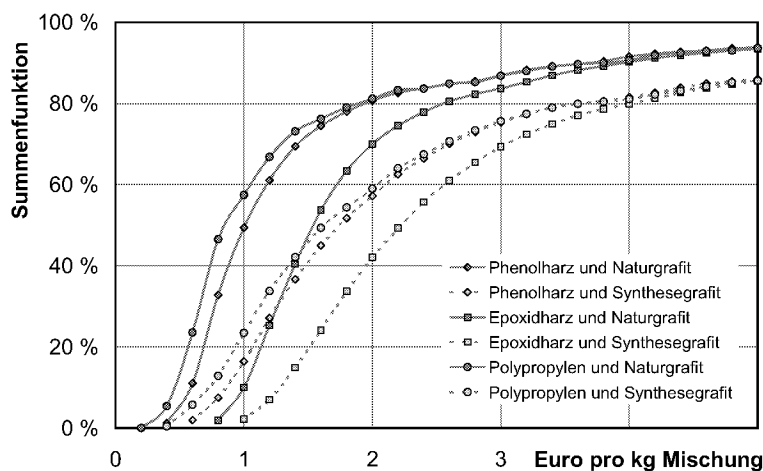


Bild 8.5 : Kosten von Mischungen mit 70 Vol.-% Grafit (EUROSTAT-Daten, MC-Analyse)

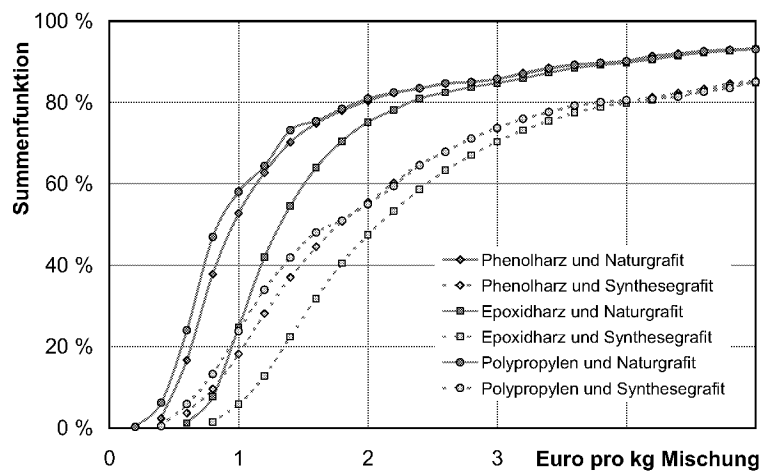


Bild 8.6 : Kosten von Mischungen mit 80 Vol.-% Graphit (EUROSTAT-Daten, MC-Analyse)

Tabellarische Daten zu Bild 5.7 und Bild 5.8 im Text (10 % Ausschuss bei Duroplasten) :

Tabelle 8.2 : Materialkosten, abhängig von Zusammensetzung und Preisen je kg Mischung (D 2 mm)

Volumenanteil Graphit	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	
Grafit + PF, 5 Euro/kg	0,78	0,79	0,81	0,83	0,84	0,86	0,88	Euro / Stück
Grafit + EP, 5 Euro/kg	0,89	0,90	0,90	0,90	0,90	0,91	0,91	Euro / Stück
Grafit + PP, 5 Euro/kg	0,46	0,48	0,50	0,52	0,53	0,55	0,57	Euro / Stück
Grafit + PF, 7 Euro/kg	1,09	1,11	1,14	1,16	1,18	1,2	1,23	Euro / Stück
Grafit + EP, 7 Euro/kg	1,25	1,26	1,26	1,26	1,26	1,27	1,27	Euro / Stück
Grafit + PP, 7 Euro/kg	0,65	0,67	0,70	0,72	0,75	0,77	0,80	Euro / Stück
Grafit + PF, 13 Euro/kg	2,02	2,07	2,11	2,15	2,19	2,24	2,28	Euro / Stück
Grafit + EP, 13 Euro/kg	2,32	2,33	2,33	2,35	2,35	2,36	2,36	Euro / Stück
Grafit + PP, 13 Euro/kg	1,200	1,25	1,29	1,34	1,39	1,44	1,48	Euro / Stück

Tabelle 8.3 : Materialkosten, abhängig von Zusammensetzung und Preisen je kg Mischung (D 1,5 mm)

Volumenanteil Graphit	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	
Grafit + PF, 5 Euro/kg	0,63	0,64	0,65	0,67	0,68	0,69	0,71	Euro / Stück
Grafit + EP, 5 Euro/kg	0,72	0,72	0,72	0,73	0,73	0,73	0,73	Euro / Stück
Grafit + PP, 5 Euro/kg	0,35	0,37	0,38	0,39	0,41	0,42	0,43	Euro / Stück
Grafit + PF, 7 Euro/kg	0,88	0,9	0,92	0,94	0,95	0,97	0,99	Euro / Stück
Grafit + EP, 7 Euro/kg	1,01	1,01	1,01	1,02	1,02	1,02	1,02	Euro / Stück
Grafit + PP, 7 Euro/kg	0,49	0,51	0,53	0,55	0,57	0,59	0,61	Euro / Stück
Grafit + PF, 13 Euro/kg	1,63	1,67	1,70	1,74	1,77	1,81	1,84	Euro / Stück
Grafit + EP, 13 Euro/kg	1,88	1,88	1,88	1,89	1,89	1,90	1,90	Euro / Stück
Grafit + PP, 13 Euro/kg	0,91	0,95	0,99	1,02	1,06	1,09	1,13	Euro / Stück

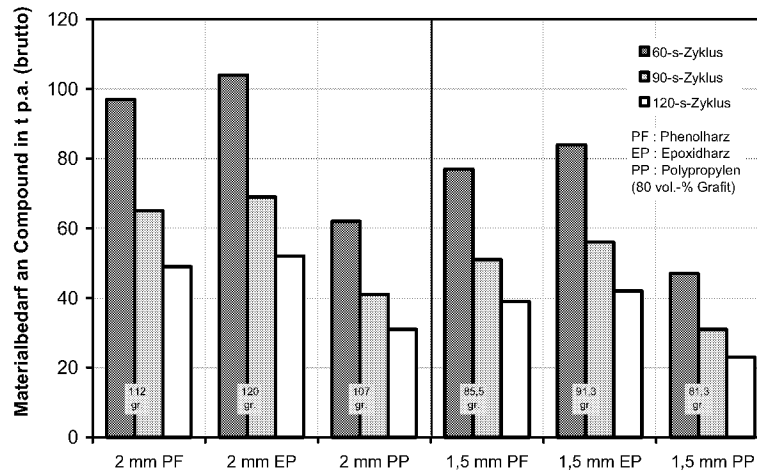


Bild 8.7 : jährlich verarbeitete Mengen an Compound in Abhängigkeit von der Zykluszeit

Diese Grafik zeigt den unterschiedlichen Jahresbedarf an Compound-Masse. Er liegt zwischen 20 und 100 Tonnen p.a. - je nach Plattendicke, Kunststoff und Zykluszeit. Duroplaste besitzen relativ zu PP einen merklich höheren Bruttoverbrauch, da Verluste in Anguss und Ausschuss nicht wieder verwendbar sind, sondern direkt entsorgt werden müssen.

Ergänzend zum Text auf Seite 77 zeigen die nachfolgenden Tabellen die mit den untersuchten Platten realisierbaren Leistungsgewichte - unter der Annahme von 5 kW/m² Spitzenleistung in einer 300 cm² großen Aktivfläche ($\alpha \sim 0,8$). Es mögen alle Zellen kühlbar, das heißt als BPEs ausgeführt sein.

Tabelle 8.4 : leistungsbezogenes Gewicht [kg/kW_{el.brutto}] bei 2 mm Dicke (Tabelle 5.3)

Volumenanteil Grafit	60 %	65 %	70 %	75 %	80 %	85 %	90 %
Grafit und Phenolharz	1,38	1,41	1,44	1,47	1,50	1,53	1,55
Grafit und Epoxidharz	1,58	1,59	1,59	1,60	1,60	1,61	1,61
Grafit und Polypropylen	1,23	1,28	1,33	1,38	1,42	1,47	1,52

Tabelle 8.5 : leistungsbezogenes Gewicht [kg/kW_{el.brutto}] bei 1,5 mm Dicke (siehe Tabelle 5.4)

Volumenanteil Grafit	60 %	65 %	70 %	75 %	80 %	85 %	90 %
Grafit und Phenolharz	1,05	1,07	1,09	1,12	1,14	1,16	1,18
Grafit und Epoxidharz	1,21	1,21	1,21	1,22	1,22	1,22	1,22
Grafit und Polypropylen	0,94	0,98	1,01	1,05	1,08	1,12	1,16

8.9 Ionomersynthesen : Rückrechnung auf benötigte Eduktmengen

Zu Abschnitt 6.1 (Nafion®), Seiten 93 bis 105

Synthese von 1 Mol Nafion™ Ionomer			
Zusammenfassung			
benötigte Menge TFE	14,8	mol TFE / mol Nafion	für FDA und Polymerisation
benötigte Menge SO ₃	7,5	mol SO ₃ / mol Nafion	für FDA
benötigte Menge NaOCl	44,1	mol NaOCl / mol Nafion	für HFPO
benötigte Menge NaOH	17,9	mol NaOH / mol Nafion	für HFPO
benötigte Menge HFP	23,2	mol HFP / mol Nafion	für HFPO
Polymerisation			
Äquivalentgewicht >	1100	g / mol SO ₃ H-Ionomer	Quellen :
benötigte Menge TFE für Polymerisation	6,5583	je mol PSEPVE	folgt aus Molekulargewicht
Ausbeute an PSEPVE (verkäufliches Polymer)	90,0	[%]	Annahme
benötigte Menge PSEPVE, rein	1,1111	mol PSEPVE / mol Nafion	
Ausbeute an TFE (verkäufliches Polymer)	90,0	[%]	Annahme
benötigte Menge TFE	7,2870	mol TFE / mol Nafion	
Reinigung des PSEPVE			
Verlust infolge der Zersetzung von iso-PSEPVE	15,0	[%]	Re. 29,534 Ex. 7
benötigte Menge PSEPVE-Mischung	1,3072	mol PSEPVE Mischung / mol Nafion	
Decarboxylierung des Diaddukts			
Verlust bei Decarboxylierung und Reinigung	33,1	[%]	Re. 29,534 Ex. 1
benötigte Menge Diaddukt	1,9546	mol Diaddukt / mol Nafion	
benötigte Menge Na ₂ CO ₃	1,9546	mole Na ₂ CO ₃ / mol Nafion	Re. 29,534 Ex. 1 stoich 1:1
Bildung des Diaddukts aus FDA + 2 x HFPO			
Ausbeute an HFPO	22,6	[%]	US 3,301,893 Ex. 2
Ausbeute an FDA	28,1	[%]	US 3,301,893 Ex. 2
benötigte Menge HFPO	17,334	mol HFPO / mol Nafion	
benötigte Menge FDA	6,9472	mol FDA / mol Nafion	
Katalysatormaterial CsF als recyclingfähig angenommen, daher unberücksichtigt.			
FDA-Synthese			
Verlust Umlagerung und Destillation des Sultons	0,0	[%]	Annahme , dass 75 % = Umsatz
benötigte Menge zyklisches Sulton (CCOS-Ring)	6,9472	mol Sulton / mol Nafion	
Katalysator Triethylaminea sowie unreactiertes Sulton als recyclingfähig angenommen, daher unberücksichtigt.			
Ausbeute an SO ₃	92,7	[%]	US 2,852,554 Ex. 1 Part A
Ausbeute an TFE	92,6	[%]	US 2,852,554 Ex. 1 Part A
benötigte Menge SO ₃	7,4959	mol SO ₃ / mol Nafion	
benötigte Menge TFE für FDA	7,5008	mol TFE / mol Nafion	
HFPO-Synthese: Basis Asahi 1979/1990			
Ausbeute an HFPO während der Feinextraktion	96,9	[%]	US 4,134,796 Ex. 1
benötigte Menge HFPO vor der Feinreinigung	17,888	mol HFPO / mol Nafion	
Ausbeute an HFP während der Oxidation mit NaOCl	77,1	[%] (Durchschnitt 1-2 h nach dem Start)	US 4,925,961 Ex. 55
benötigte Menge HFP	23,188	mol HFP / mol Nafion	US 4,925,961 Ex. 55
benötigte Menge NaOCl (12 wt% Cl ₂ + H ₂ O + NaOH)	44,058	mol NaOCl / mol Nafion	US 4,925,961 Ex. 55
benötigte Menge NaOH	17,855	mol NaOH / mol Nafion	US 4,925,961 Ex. 55

Zu Abschnitt 6.2 (BAM3G-SC und -HT), Seiten 105 bis 119

Synthese von 1 Mol of BAM3G-SC Polymer (Sulfoniertes Copolymer)

Molekulargewicht des Copolymers	858,6	g / mol	wichtige Definition: Wdh.Einheit = $1 \times \text{mCF3} + n \times \text{TFS}$
Molekulargewicht des SC	1038,1	g / mol	Sulfonierungsgrad : siehe "n SO ₃ H pro CF ₃ -Einheit"
GESAMTÜBERSICHT			
benötigte Menge OP(OEt) ₃ Carrier	1,29	kg OP(OEt) ₃ / mol BAM3G-SC	nur SC: Sulfonierung des Polymers
benötigte Menge an SO ₃	2,23	kg SO ₃ / mol BAM3G-SC	nur SC: Sulfonierung des Polymers
benötigte Menge an CHCl ₃	45,4	kg CHCl ₃ / mol BAM3G-SC	nur SC: Sulfonierung des Polymers
benötigte Menge Wasser für 100°C-Wäsche	764	kg H ₂ O / mol BAM3G-SC	nur SC: Sulfonierung des Polymers
benötigte Menge K ₂ S ₂ O ₈ je mol BAM3G-SC	0,04	mol K ₂ S ₂ O ₈ / mol BAM3G-SC	Polymerisation
benötigte Menge Emulgator je mol BAM3G-SC	0,72	mol DA-HCl / mol BAM3G-SC	Polymerisation
benötigte Menge an deionisiertem Wasser	8,58	kg H ₂ O / mol BAM3G-SC	Polymerisation
benötigte Menge R-134a je mol BAM3G-SC	23,1	mol R-134a / mol BAM3G-SC	TFS + mCF ₃ -TFS
benötigte Menge ZnCl ₂ je mol BAM3G-SC	19,2	mol ZnCl ₂ / mol BAM3G-SC	TFS + mCF ₃ -TFS
benötigte Menge an DIPA	38,5	mol DIPA / mol BAM3G-SC	LDA
benötigte Menge an Lithiumsand	38,5	mol Li / mol BAM3G-SC	LDA
benötigte Menge an Isopren	19,2	mol Isopren / mol BAM3G-SC	LDA
benötigte Menge Iod	6,77	mol I ₂ / mol BAM3G-SC	Iodbenzol + mCF ₃ -Iodbenzol
H ₂ SO ₄ , 98 %	2,54	Liter H ₂ SO ₄ / mol BAM3G-SC	mCF ₃ -Iodbenzol
Verbrauch an F ₂	3,49	mol F ₂ / mol BAM3G-SC	mCF ₃ -Iodbenzol
Verbrauch an Natriumbisulfid	1,59	kg Na ₂ S ₂ O ₅ / mol BAM3G-SC	mCF ₃ -Iodbenzol
benötigte Menge HF (stöchiometrisch)	8,57	mol HF / mol BAM3G-SC	Benzotrifluorid
benötigte Menge Toluol	3,03	mol Toluol / mol BAM3G-SC	Benzotrichlorid
benötigte Menge Chlor	9,08	mol Cl ₂ / mol BAM3G-SC	Benzotrichlorid
benötigte Menge an Benzol	9,53	mol Benzol / mol BAM3G-SC	Iodbenzol
benötigte Menge an Sauerstoff	2,47	mol O ₂ / mol BAM3G-SC	Iodbenzol
NEBENPRODUKTE			
entstehendes Nebenprodukt LiF	19,2	mol LiF / mol BAM3G-SC	TFS + mCF ₃ -TFS
entstehendes Nebenprodukt LiCl	19,2	mol LiCl / mol BAM3G-SC	TFS + mCF ₃ -TFS
entstehendes Nebenprodukt (ZnCl ₂ -I)	19,2	mol ZnCl ₂ / mol BAM3G-SC	TFS + mCF ₃ -TFS
entstehendes Nebenprodukt 2-Methyl-2-Buten	19,2	mol 2-Methyl-2-Buten / mol BAM3G-SC	LDA
entstehendes Nebenprodukt HCl	17,7	mol HCl / mol BAM3G-SC	mCF ₃ -Ph-J
entstehendes Nebenprodukt 1,2-Diodbenzol	0,36	mol Diiodbenzol / mol BAM3G-SC	Iodbenzol

Sulfonierung des Copolymers

Ex. #17

Quellen :

mol Copolymer 20:80 im Experiment	0,0087	mol unsulfoniertes Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 17)
benötigtes Volumen OP(OEt) ₃ Carrier	0,9044	Liter OP(OEt) ₃ / mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 17)
Dichte des OP(OEt) ₃	1,07	kg / Liter OP(OEt) ₃	Acros/Aldrich
benötigte Menge OP(OEt) ₃ Carrier	0,9677	kg OP(OEt) ₃ / mol Copolymer	
benötigtes Volumen SO ₃	0,8586	Liter SO ₃ / mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 17)
Dichte des SO ₃	1,95	kg / Liter SO ₃	Acros/Aldrich: 1,92-1,97
benötigte Menge SO ₃	1,674	kg SO ₃ / mol Copolymer	
benötigtes Volumen an Chloroform	22,79	Liter CHCl ₃ / mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 17)
Dichte von CHCl ₃	1,495	kg / Liter CHCl ₃	Acros/Aldrich: 1,50-1,49
benötigte Menge an CHCl ₃	34,01	kg CHCl ₃ / mol Copolymer	
Molverhältnis SO ₃ /OP(OEt) ₃	3,9		Berechnung
Molverhältnis SO ₃ /TFS im Copolymer	4,2		alle Phenylringe, auch mit -CF ₃
Äquivalenzgewicht des sulfonierten Polymers	463	g / mol SO ₃ H	US 5,773,480 (Ex. 17): 463 g/mol SO ₃ H
n = SO ₃ H pro mCF ₃ -Einheit	2,24	mol SO ₃ H / mol Wdh.einheit	$= [\text{Mw}(\text{unsulf. Polym.}) / (\text{Äq. gew.} - \text{Mw}(\text{SO}_3))] - 0,224 \dots 5$
Molekulargewicht des sulfonierten Polymers	1038	g / mol Wdh.einheit SC	$= \text{Wdh.einheit} + n \times \text{SO}_3$
Wassergehalt im sulfonierten Polymer	81	%	US 5,773,480 (Ex. 17): 81%
Aubeute an SC in Gramm	6,8	g wasserfreies SC	
erhaltene Mole sulfonierter Wdh.einheiten	0,0065	Mol n-sulfoniertes Copolymer	
Ausbeute sulf. Polymer / unsulfoniertes Polymer	75%	[mol-%]	US 5,773,480 (Ex. 17): 75%
benötigte Menge an TFS-mCF ₃ TFS Copolymer	1,334	mol Copolymer / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge OP(OEt) ₃ Carrier	1,291	kg OP(OEt) ₃ / mol BAM3G-SC	Annahme, dass zu 90 % rückgewinnbar
benötigte Menge an SO ₃	2,234	kg SO ₃ / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge an CHCl ₃	45,38	kg CHCl ₃ / mol BAM3G-SC	Annahme, dass zu 90 % rückgewinnbar
benötigte Menge Wasser für 100°C-Wäsche	763,8	kg H ₂ O / mol BAM3G-SC	US 5,773,480 (Ex. 10)

Co-Polymerisation

TFS	0,5059	mol TFS	US 5,773,480 (Ex. 7)
TFS je gewählter Wdh-einheit	4	mol TFS / mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 7) : 80 % molar
mol an produzierbarem BAM3G	0,1265	mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 7)
erhaltene Mole an BAM3G	0,1067	mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 7)
Ausbeute an TFS	84,3	[mol-%]	US 5,773,480 (Ex. 7) : 84,3 %
mCF3-TFS	0,1269	mol mCF3-TFS	US 5,773,480 (Ex. 7)
mCF3-TFS je Wdh-Einheit	1	mol mCF3-TFS / mol Copolymer	= 1 per definitionem
Ausbeute an mCF3-TFS	84,1	[mol-%]	
benötigte Menge TFS je mol Copolymer	4,742	mol TFS / mol Copolymer	
benötigte Menge mCF3-TFS je mol Copolymer	1,190	mol mCF3-TFS / mol Copolymer	
benötigte Menge K ₂ S ₂ O ₈ je mol Copolymer	0,033	mol K ₂ S ₂ O ₈ / mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 7)
benötigte Menge Emulgator je mol Copolymer	0,537	mol DA-HCl / mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 7)
benötigte Menge an deionisiertem Wasser	6,430	kg H ₂ O / mol Copolymer	US 5,773,480 (Ex. 7)
benötigte Menge TFS je mol BAM3G-SC	6,328	mol TFS / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge mCF3-TFS je mol BAM3G-SC	1,588	mol mCF3-TFS / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge K ₂ S ₂ O ₈ je mol BAM3G-SC	0,044	mol K ₂ S ₂ O ₈ / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge Emulgator je mol BAM3G-SC	0,716	mol DA-HCl / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge an deionisiertem Wasser	8,580	kg H ₂ O / mol BAM3G-SC	

Synthese von TFS

Ausbeute an Iodbenzol	69%		Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, Table 1
benötigte Menge Iodbenzol	9,171	mol Iodbenzol / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge R-134a je mol BAM3G-SC	18,34	mol R-134a / mol BAM3G-SC	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge ZnCl ₂ je mol BAM3G-SC	15,29	mol ZnCl ₂ / mol BAM3G-SC	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge LDA je mol BAM3G-SC	30,57	mol LDA / mol BAM3G-SC	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
Gesamtausbeute an R-134a	35%	[mol-%]	
Gesamtausbeute an ZnCl ₂	41%	[mol-%]	
Gesamtausbeute an LDA	41%	[mol-%]	
entstehendes Nebenprodukt LiF	15,29	mol LiF / mol BAM3G-SC	
entstehendes Nebenprodukt LiCl	15,29	mol LiCl / mol BAM3G-SC	
entstehendes Nebenprodukt (ZnCl-I)	15,29	mol ZnCl-I / mol BAM3G-SC	

Synthese von mCF3-TFS

Ausbeute an mCF3-Iodbenzol	67%	[mol-%]	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, Table 1
benötigte Menge mCF3-Iodbenzol	2,3694	mol mCF3-Ph-J / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge R-134a je mol BAM3G-SC	4,74	mol R-134a / mol BAM3G-SC	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge ZnCl ₂ je mol BAM3G-SC	3,95	mol ZnCl ₂ / mol BAM3G-SC	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge LDA je mol BAM3G-SC	7,90	mol LDA / mol BAM3G-SC	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
Ausbeute an R-134a	34%	[mol-%]	
Ausbeute an ZnCl ₂	40%	[mol-%]	
Ausbeute an LDA	40%	[mol-%]	
entstehendes Nebenprodukt LiF	3,95	mol LiF / mol BAM3G-SC	
entstehendes Nebenprodukt LiCl	3,95	mol LiCl / mol BAM3G-SC	
entstehendes Nebenprodukt (ZnCl-I)	3,95	mol ZnCl-I / mol BAM3G-SC	

Synthese von LDA

benötigte Menge an LDA	38,47	mol LDA / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge an DIPA	38,47	mol DIPA / mol BAM3G-SC	unter Umständen wiederverwendbar (Li-Carrier)
benötigte Menge an Lithiumsand	38,47	mol Li / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge an Isopren	19,23	mol Isopren / mol BAM3G-SC	
entstehendes Nebenprodukt 2-Methyl-2-Buten	19,23	mol 2-Methyl-2-Buten / mol BAM3G-SC	

Synthese von mCF3-Ph-I

Ausbeute an Benzotrifluorid	82,9%	[%]	US 5,734,073, Ex. 8
Ausbeute an Iod	65,0%	[%]	US 5,734,073, Ex. 9 : mol Produkt / 2 / mol I2
benötigte Menge Benzotrifluorid	2,8582	mol Ph-CF3 / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge Iod	1,8226	mol I2 / mol BAM3G-SC	
H2SO4, 98 %	2,5373	Liter H2SO4 / mol BAM3G-SC	US 5,734,073 - col. 5 (Durchlauf)
R-113	0,63	Liter C2Cl3F3 / mol BAM3G-SC	US 5,734,073 - col. 5 (Kreislauf)
Verbrauch an F2	3,4907	mol F2 / mol BAM3G-SC	US 5,734,073 - col. 5
Verbrauch an Natriumbisulfit	1,5867	kg Na2S2O5 / mol BAM3G-SC	US 5,734,073 - col. 5
Dichlormethan, CH2Cl2	6,35	Liter CH2Cl2 / mol BAM3G-SC	US 5,734,073 - col. 5 (Kreislauf)
Bereitstellung Benzotrifluorid :			
benötigte Menge Benzotrichlorid	2,8582	mol Ph-CCl3 / mol BAM3G-SC	US 4,393,257
benötigte Menge HF (stöchiometrisch)	8,575	mol HF / mol BAM3G-SC	US 4,393,257 - Kreislauf angenommen
HF im Kreislauf durch den Reaktor	16,58	mol HF / mol BAM3G-SC	US 4,393,257
Cl2 im Kreislauf durch den Reaktor	0,45	mol Cl2 / mol BAM3G-SC	US 4,393,257
entstehendes Nebenprodukt HCl	8,5746	mol HCl / mol BAM3G-SC	äquimolar zu HF
Bereitstellung Benzotrichlorid :			
Ausbeute an Benzotrichlorid	94,4%	[%]	DE 2227337, Tabelle 2
benötigte Menge Toluol	3,0277	mol Toluol / mol BAM3G-SC	DE 2227337
benötigte Menge Chlor	9,0832	mol Cl2 / mol BAM3G-SC	Annahme vollen Umsatzes zu Ph-CCl3,
entstehendes Nebenprodukt HCl	9,0832	mol HCl / mol BAM3G-SC	jedoch nicht ganz entsprechend der Realität

Synthese von Iodbenzol

benötigte Menge Iodbenzol je Wdh.einheit SC	9,1713	mol Iodbenzol / mol BAM3G-SC	siehe oben
Ausbeute an Iodbenzol	96,2%	[%]	EP 183 579 A1 (Ex.10) : 96,2 % nach 6 h Betrieb
benötigte Menge an Benzol	9,5336	mol Benzol / mol BAM3G-SC	
benötigte Menge an Iod	4,9479	mol I2 / mol BAM3G-SC	= N Iodbenzol / 2 + N Diiodbenzol
benötigte Menge an Sauerstoff	2,4740	mol O2 / mol BAM3G-SC	= N Iodbenzol / 4 + N Diiodbenzol / 2
entstehendes Nebenprodukt 1,2-Diiodbenzol	0,3623	mol Diiodbenzol / mol BAM3G-SC	

Synthese von 1 Mol of BAM3G-HT Polymer (Hydrolisiertes Terpolymer)

Molekulargewicht des SO2F-Terpolymers	864,6	g / mol	Definition: Wdh.Einheit = TFS + mCF3 + 2 x pSO2F
Molekulargewicht des SO3H-Terpolymers	860,6	g / mol	alle SO2F-Einheiten mit KOH umgewandelt
GESAMTÜBERSICHT			
benötigte Menge K2S2O8 je mol BAM3G-HT	0,02	mol K2S2O8 / mol BAM3G-HT	Polymerisation
benötigte Menge Emulgator je mol BAM3G-HT	0,32	mol DA-HCl / mol BAM3G-HT	Polymerisation
benötigte Menge an deionisiertem Wasser	4,12	kg H2O / mol BAM3G-HT	Polymerisation
benötigte Menge R-134a je mol BAM3G-HT	11,2	mol R-134a / mol BAM3G-HT	TFS + mCF3-TFS
benötigte Menge ZnCl2 je mol BAM3G-HT	9,3	mol ZnCl2 / mol BAM3G-HT	TFS + mCF3-TFS
benötigte Menge an DIPA	18,7	mol DIPA / mol BAM3G-HT	LDA
benötigte Menge an Lithiumsand	18,7	mol Li / mol BAM3G-HT	LDA
benötigte Menge an Isopren	9,3	mol Isopren / mol BAM3G-HT	LDA
benötigte Menge Iod	3,53	mol I2 / mol BAM3G-HT	Iodbenzol + mCF3-Iodbenzol
H2SO4, 98 %	1,60	Liter H2SO4 / mol BAM3G-HT	mCF3-Iodbenzol
Verbrauch an F2	2,20	mol F2 / mol BAM3G-HT	mCF3-Iodbenzol
Verbrauch an Natriumbisulfit	1,00	kg Na2S2O5 / mol BAM3G-HT	mCF3-Iodbenzol
benötigte Menge HF (stöchiometrisch)	5,40	mol HF / mol BAM3G-HT	Benzotrifluorid
benötigte Menge Toluol	1,91	mol Toluol / mol BAM3G-HT	Benzotrichlorid
benötigte Menge Chlor	5,72	mol Cl2 / mol BAM3G-HT	Benzotrichlorid
benötigte Menge an Benzol	4,59	mol Benzol / mol BAM3G-HT	Iodbenzol
benötigte Menge an Sauerstoff	1,19	mol O2 / mol BAM3G-HT	Iodbenzol
benötigte Menge HClSO3	6,55	mol HClSO3 / mol BAM3G-HT	nur HT: pSO2F-Iodbenzol
benötigte Menge Chloroform	4,55	liter CHCl3 / mol BAM3G-HT	nur HT: pSO2F-Iodbenzol
benötigte Menge KF	3,29	mol KF / mol BAM3G-HT	nur HT: pSO2F-Iodbenzol
benötigte Menge Aceton	3,79	liter Aceton / mol BAM3G-HT	nur HT: pSO2F-Iodbenzol

NEBENPRODUKTE			
entstehendes Nebenprodukt LiF	9,3	mol LiF / mol BAM3G-HT	TFS + mCF3-TFS
entstehendes Nebenprodukt LiCl	9,3	mol LiCl / mol BAM3G-HT	TFS + mCF3-TFS
entstehendes Nebenprodukt (ZnCl-I)	9,3	mol ZnCl-I / mol BAM3G-HT	TFS + mCF3-TFS
entstehendes Nebenprodukt 2-Methyl-2-Buten	9,3	mol 2-Methyl-2-Buten / mol BAM3G-HT	LDA
entstehendes Nebenprodukt HCl	14,1	mol HCl / mol BAM3G-HT	mCF3-Ph-J + pSO2F-Ph-J
entstehendes Nebenprodukt 1,2-Diodbenzol	0,17	mol Diodbenzol / mol BAM3G-HT	Iodbenzol
entstehendes Nebenprodukt H2SO4	2,97	mol H2SO4 / mol BAM3G-HT	pSO2F-Iodbenzol

Co-Polymerisation

TFS je gewählter Wdh.-einheit	1	mol TFS / mol BAM3G-HT	US 5,684, 192 (Ex.2)
mCF3-TFS je gewählter Wdh.-einheit	1	mol TFS / mol BAM3G-HT	quantitative yield
pSO2F-TFS je gewählter Wdh.-einheit	2	mol TFS / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge K2S2O8 je mol BAM3G-HT	0,021	mol K2S2O8 / mol BAM3G-HT	US 5,684, 192 (Ex.2)
benötigte Menge Emulgator je mol BAM3G-HT	0,318	mol DA-HCl / mol BAM3G-HT	US 5,684, 192 (Ex.2)
benötigte Menge an deionisiertem Wasser	4,118	kg H2O / mol BAM3G-HT	US 5,684, 192 (Ex.2)

Quellen**Synthese von TFS**

Ausbeute an Iodbenzol	69%		Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, Table 1
benötigte Menge Iodbenzol	1,449	mol Iodbenzol / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge R-134a je mol BAM3G-HT	2,90	mol R-134a / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge ZnCl2 je mol BAM3G-HT	2,42	mol ZnCl2 / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge LDA je mol BAM3G-HT	4,83	mol LDA / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
Gesamtausbeute an R-134a	35%	[mol-%]	
Gesamtausbeute an ZnCl2	41%	[mol-%]	
Gesamtausbeute an LDA	41%	[mol-%]	
entstehendes Nebenprodukt LiF	2,42	mol LiF / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt LiCl	2,42	mol LiCl / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt (ZnCl-I)	2,42	mol ZnCl-I / mol BAM3G-HT	

Synthese von mCF3-TFS

Ausbeute an mCF3-Iodbenzol	67%	[mol-%]	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, Table 1
benötigte Menge mCF3-Iodbenzol	1,4925	mol mCF3-Ph-J / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge R-134a je mol BAM3G-HT	2,99	mol R-134a / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge ZnCl2 je mol BAM3G-HT	2,49	mol ZnCl2 / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge LDA je mol BAM3G-HT	4,98	mol LDA / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
Ausbeute an R-134a	34%	[mol-%]	
Ausbeute an ZnCl2	40%	[mol-%]	
Ausbeute an LDA	40%	[mol-%]	
entstehendes Nebenprodukt LiF	2,49	mol LiF / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt LiCl	2,49	mol LiCl / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt (ZnCl-I)	2,49	mol ZnCl-I / mol BAM3G-HT	

Synthese von pSO2F-TFS

Ausbeute an pSO2F-Iodbenzol	75%	[mol-%]	keine Angabe! Annahme: 60-75 %
benötigte Menge pSO2F-Iodbenzol	2,6667	mol pSO2F-Ph-J / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge R-134a je mol BAM3G-HT	5,33	mol R-134a / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge ZnCl2 je mol BAM3G-HT	4,44	mol ZnCl2 / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
benötigte Menge LDA je mol BAM3G-HT	8,89	mol LDA / mol BAM3G-HT	Anilkumar / Burton, TH Letter 43, p. 2732, note 17
Ausbeute an R-134a	38%	[mol-%]	
Ausbeute an ZnCl2	45%	[mol-%]	
Ausbeute an LDA	45%	[mol-%]	
entstehendes Nebenprodukt LiF	4,44	mol LiF / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt LiCl	4,44	mol LiCl / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt (ZnCl-I)	4,44	mol ZnCl-I / mol BAM3G-HT	

Synthese von LDA

benötigte Menge an LDA	18,69	mol LDA / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge an DIPA	18,69	mol DIPA / mol BAM3G-HT	unter Umständen wiederverwendbar (Li-Carrier)
benötigte Menge an Lithiumsand	18,69	mol Li / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge an Isopren	9,35	mol Isopren / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt 2-Methyl-2-Buten	9,35	mol 2-Methyl-2-Buten / mol BAM3G-HT	

Synthese von mCF₃-Ph-I

Ausbeute an Benzotrifluorid	82,9%	[%]	US 5,734,073, Ex. 8
Ausbeute an Iod	65,0%	[%]	US 5,734,073, Ex. 9 : mol Produkt / 2 / mol I2
benötigte Menge Benzotrifluorid	1,8004	mol Ph-CF ₃ / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge Iod	1,1481	mol I ₂ / mol BAM3G-HT	
H ₂ SO ₄ , 98 %	1,5983	Liter H ₂ SO ₄ / mol BAM3G-HT	US 5,734,073 - col. 5 (Durchlauf)
R-113	0,40	Liter C ₂ Cl ₃ F ₃ / mol BAM3G-HT	US 5,734,073 - col. 5 (Kreislauf)
Verbrauch an F ₂	2,1988	mol F ₂ / mol BAM3G-HT	US 5,734,073 - col. 5
Verbrauch an Natriumbisulfit	0,9995	kg Na ₂ S ₂ O ₅ / mol BAM3G-HT	US 5,734,073 - col. 5
Dichlormethan, CH ₂ Cl ₂	4,00	Liter CH ₂ Cl ₂ / mol BAM3G-HT	US 5,734,073 - col. 5 (Kreislauf)
Bereitstellung Benzotrifluorid :			
benötigte Menge Benzotrichlorid	1,8004	mol Ph-CCl ₃ / mol BAM3G-HT	US 4,393,257
benötigte Menge HF (stöchiometrisch)	5,401	mol HF / mol BAM3G-HT	US 4,393,257 - Kreislauf angenommen
HF im Kreislauf durch den Reaktor	10,44	mol HF / mol BAM3G-HT	US 4,393,257
Cl ₂ im Kreislauf durch den Reaktor	0,28	mol Cl ₂ / mol BAM3G-HT	US 4,393,257
entstehendes Nebenprodukt HCl	5,4012	mol HCl / mol BAM3G-HT	äquimolar zu HF
Bereitstellung Benzotrichlorid :			
Ausbeute an Benzotrichlorid	94,4%	[%]	DE 2227337, Tabelle 2
benötigte Menge Toluol	1,9072	mol Toluol / mol BAM3G-HT	DE 2227337
benötigte Menge Chlor	5,7216	mol Cl ₂ / mol BAM3G-HT	Annahme vollen Umsatzes zu Ph-CCl ₃ , auch wenn
entstehendes Nebenprodukt HCl	5,7216	mol HCl / mol BAM3G-HT	nicht ganz entsprechend der Realität

Synthese von pSO₂F-Ph-J

Iodbenzol	1,96	mol	US 5,684,192 / US 5,602,185 (Ex. 1a)
HCISO ₃	4,32	mol	US 5,684,192 / US 5,602,185 (Ex. 1a)
Menge an Chloroform (LM)	3,0	liter	US 5,684,192 / US 5,602,185 (Ex. 1a)
erhaltenes pSO ₂ Cl-Ph-J	1,96	mol	US 5,684,192 / US 5,602,185 (Ex. 1a)
Ausbeute Iodbenzol	100%	[%-mol]	
Ausbeute Chlorsulfonsäure	45%	[%-mol]	
Nebenprodukt HCl	1,96	mol	
Nebenprodukt H ₂ SO ₄	1,96	mol	
KF	2,17	mol	US 5,684,192 / US 5,602,185 (Ex. 1b)
Menge an Aceton (LM)	2,5	liter	US 5,684,192 / US 5,602,185 (Ex. 1b)
erhaltenes pSO ₂ F-Ph-J	1,76	mol	US 5,684,192 / US 5,602,185 (Ex. 1b)
Ausbeute an pSO ₂ Cl-Ph-J (inkl. Destillation)	89,8%	[%-mol]	
Ausbeute KF	81,1%	[%-mol]	
benötigte Menge HCISO ₃	6,5455	mol HCISO ₃ / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge Chloroform	4,5	liter CHCl ₃ / mol BAM3G-HT	zu rezyklieren
Menge des Intermediats pSO ₂ Cl-Ph-J	2,97	mol pSO ₂ Cl-Ph-J / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge KF	3,2879	mol KF / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge Aceton	3,8	liter Aceton / mol BAM3G-HT	zu rezyklieren
benötigte Menge Iodbenzol	2,9697	mol Iodbenzol / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt HCl	2,9697	mol HCl / mol BAM3G-HT	
entstehendes Nebenprodukt H ₂ SO ₄	2,9697	mol H ₂ SO ₄ / mol BAM3G-HT	

Synthese von Iodbenzol

benötigte Menge Iodbenzol je Wdh.einheit HT	4,4190	mol Iodbenzol / mol BAM3G-HT	siehe oben
Ausbeute an Iodbenzol	96,2%	[%]	EP 183 579 A1 (Ex.10) : 96,2 % nach 6 h Betrieb
benötigte Menge an Benzol	4,5935	mol Benzol / mol BAM3G-HT	
benötigte Menge an Iod	2,3840	mol I ₂ / mol BAM3G-HT	= N Iodbenzol / 2 + N Diiodbenzol
benötigte Menge an Sauerstoff	1,1920	mol O ₂ / mol BAM3G-HT	= N Iodbenzol / 4 + N Diiodbenzol / 2
entstehendes Nebenprodukt 1,2-Diiodbenzol	0,1746	mol Diiodbenzol / mol BAM3G-HT	

Zu Abschnitt 6.3 (PEEK), Seiten 119 bis 126

Synthese von 1 Mol PEEK-Ionomer

PEEK Molekulargewicht ==>	288,31	g / mol	
sulfoniertes PEEK Molekulargewicht ==>	344,35	g / mol	
Zusammenfassung			
benötigte Menge Hydrochinon	1,01	mol Hydrochinon / mol PEEK	Polykondensation
benötigte Menge MDA	1,28	mol MDA / mol PEEK	Difluor-benzophenon
benötigte Menge NaNO ₂	7,17	mol NaNO ₂ / mol PEEK	Difluor-benzophenon
verbrauchte Menge an HF	12,29	mol HF / mol PEEK	Difluor-benzophenon
benötigte Menge Na ₂ CO ₃	1,02	mol Na ₂ CO ₃ / mol PEEK	Polykondensation
benötigte Menge an konzentrierter Schwefelsäure	0,70	mol H ₂ SO ₄ / mol PEEK	Sulfonierung des Polymers
Sulfonierung			
PEEK	1	mol Wiederholungseinheiten	
benötigte Menge an konzentrierter Schwefelsäure	0,7	mol H ₂ SO ₄ / mol PEEK	DS = 70 %
<i>Annahme, dass Schwefelsäure völlig rezyklierbar ist.</i>			
Polykondensation			
Ausbeute an Hydrochinon	99,5	[%]	US 5,051,495
benötigte Menge Hydrochinon	1,0050	mol Hydrochinon / mol PEEK	
Ausbeute an DFB	99,5	[%]	US 5,051,495
benötigte Menge DFB	1,0050	mol DFB / mol PEEK	
benötigte Menge Na ₂ CO ₃	1,0151	mol Na ₂ CO ₃ / mol PEEK	US 5,051,495 (**)
<i>(**) Menge Hydrochinon + 1 %</i>			
Diazotierungsreaktion			
$C_{13}H_{14}N_2$ (MDA) + 6 HF + 4 NaNO ₂ ==> $C_{13}F_2H_8O$ (DFB) + 6 H ₂ O + 2 N ₂ + N ₂ O + 4 NaF			
Ausbeute an MDA	78,5	[%]	US 4,263,458 (Ex. II)
benötigte Menge MDA	1,2803	mol MDA / mol PEEK	+ EP0004710B1
benötigte Menge NaNO ₂	7,1696	mol NaNO ₂ / mol PEEK	US 4,263,458 (Ex. II)
benötigte Menge an HF (stöchiometrisches Minimum)	4,0000	mol HF / mol MDA	US 4,263,458 (Ex. II)
benötigte Menge an HF (stöchiometrisches Minimum)	1,0000	mol HF / mol NaNO ₂	
benötigte Menge an HF (stöchiometrisches Minimum)	12,2908	mol HF / mol PEEK	(Umlauf höher, da zugleich LM)

Zu Abschnitt 6.4 (PBI), Seiten 126 bis 134

Synthese von 1 Mol PBI Polymer

PBI molecular weight ==>	308,36	g./mole	n(H3PO4) / n(PBI)	Ma.-% H3PO4
SUMMARY			16	83,6%
benötigte Stoffmenge an Isophthalsäure	1,0203	mol Isophthalsäure / mol PBI		DPA
benötigte Stoffmenge an Phenol	2,4907	mol Phenol / mol PBI		DPA
benötigte Stoffmenge an DCB	1,1395	mol DCB / mol PBI		TAB
benötigte Stoffmenge NH3(aq)	50,6471	mol NH3 / mol PBI		TAB
benötigte Stoffmenge an NH4Cl	2,2467	mol NH4Cl / mol PBI		TAB
benötigte Menge Aktivkohle	9,6159	g Aktivkohle / mol PBI		TAB
benötigte Stoffmenge Na2S2O3	0,0166	mole Na2S2O3 / mole PBI		TAB
benötigte Menge Katalysator (Diphenyl-Phosphinsäure)	0,0126	mole DPhosAc / mole PBI		Polycondensation catalyst
Nebenprodukte				
erzeugte Stoffmenge Phenol	2	moles Phenole / mole PBI		Polycondensation

Polykondensation

Ausbeute TAB	99,5 [%]		Quellen :
benötigte Menge TAB	1,0050	mole TAB / mole PBI	US 4,485,232
Ausbeute DPI	99,5 [%]		US 4,485,232
benötigte Menge DPI	1,0050	mole DPI / mole PBI	
benötigte Menge Katalysator (Diphenyl-Phosphinsäure)	0,0126	mole DPhosAc / mole PBI	US 4,485,232 (Ex. I)
erzeugte Stoffmenge Phenol	2,0	moles Phenole / mole PBI	
erzeugte Stoffmenge Wasser	2,0	moles H2O / mole PBI	

Synthese von DPI

Ausbeute Isophthalsäure	98,5 [%]		US 4,737,569
benötigte Stoffmenge an Isophthalsäure	1,0203	mol Isophthalsäure / mol PBI	
Verlust an Phenol während der Rückgewinnung	5 [%]		Annahme
benötigte Stoffmenge an Phenol	2,4907	mol Phenol / mol PBI	US 4,737,569
catalyst SnO assumed to be recoverable (solution)			

Synthese von TAB

Ausbeute an DCB	88,2 [%]		US 5,235,105 (Ex.)
benötigte Stoffmenge an DCB	1,1395	mol DCB / mol PBI	
benötigte Masse NH3(aq)	179,5	kg / 60 kg DCB	US 5,235,105 (Ex.)
benötigte Stoffmenge NH3(aq)	44,4474	mol NH3 / mol DCB	
benötigte Stoffmenge NH3(aq)	50,6471	mol NH3 / mol PBI	NH4OH-regeneration required
benötigte Masse an NH4Cl	25	kg / 60 kg DCB	US 5,235,105 (Ex.)
benötigte Stoffmenge an NH4Cl	1,9717	mol NH4Cl / mol DCB	
benötigte Stoffmenge an NH4Cl	2,2467	mol NH4Cl / mol PBI	
Reinigung des Roh-TAB			
zugegebene Masse Aktivkohle	2	kg / 60 kg DCB	US 5,235,105 (Ex.)
benötigte Menge Aktivkohle	9,6159	g Aktivkohle / mol PBI	
zugegebene Masse Na-Dithionit	0,6	kg / 60 kg DCB	US 5,235,105 (Ex.)
benötigte Stoffmenge Na2S2O3	0,0145	moles Na2S2O3 / mole DCB	
benötigte Stoffmenge Na2S2O3	0,0166	mole Na2S2O3 / mole PBI	

8.10 Ionomersynthesen : Berechnung des Anlagen-Kapitalbedarfs

Ansatz der Methode von ZEVIK UND BUCHANAN [112]

$$\text{Investition I} = N \cdot \text{CPF} \cdot 1,33 \cdot \frac{\text{Kostenindex Jahr J}}{\text{Kostenindex 1963}} \quad (\text{Gl. 8.5})$$

mit N = Anzahl der Funktionseinheiten und CPF = Investition je Funktionseinheit (*cost per functional unit*). Der Faktor 1,33 berücksichtigt einen Aufschlag von 33 % für Nebenanlagen (*off-sites*). Der Zahlenwert gilt dann für US-\$(1963) und ist mit dem Verhältnis zweier entspre-

chender Kostenindices für den Chemieanlagenbau (beispielsweise CEPCI, Seite 71) zu multiplizieren. CPF folgt aus einem Nomogramm als Funktion der Produktionskapazität und eines Komplexitätsfaktors CF (*complexity factor*) der Anlage :

$$CF = 2 \cdot 10^{(F_t + F_p + F_a)} \quad (\text{Gl. 8.6})$$

F_t , F_p und F_a sind Summanden zur Berücksichtigung von Temperatur, Druck und benötigten Werkstoffen. Die Bestimmung erfolgt anhand von Nomogrammen beziehungsweise Tabellen. Je nach Bedingungen haben sie einen Wertebereich von $\{0 \dots 0,6\}$, $\{0 \dots 0,3\}$ und $\{0 \dots 0,4\}$.

Für Nafion® 1100 ergibt sich nach dieser Methode folgendes Ergebnis :

$$I_{\text{Nafion / Zevnik und Buchanan}} = 19 \cdot 0,13 \cdot 1,33 \cdot \frac{395,6}{102,4} \text{ Mio. US-}\$(2002) = \underline{12,7 \text{ Mio. US-}\$(2002)} \quad (\text{Gl. 8.7})$$

Dabei haben F_t / F_p / F_a und CF Werte von 0,19 / 0,08 / 0,3 und 7,48.

Ansatz der Methode von STALLWORTHY [113]

$$\text{Investition } I = 1,35 \cdot \frac{0,0075}{A} \cdot \sum_{i=1}^S (N_i \cdot F_m \cdot F_p \cdot F_t \cdot R_i) \quad (\text{Gl. 8.8})$$

mit S = Anzahl der Haupt- und Nebenströme, R_i = Mengenverhältnis zwischen S_i und dem Hauptstrom, N_i = Anzahl der Verfahrensschritte, die S_i durchläuft. F_m , F_p und F_t sind wie schon bei ZEVIK UND BUCHANAN Zuschlagfaktoren für Konstruktionsmaterial, Druck und Temperatur, die aus Nomogrammen abgelesen werden; Wertebereiche sind $\{1 \dots 2\}$, $\{1 \dots 1,3\}$ und $\{1 \dots 1,5\}$. Der Faktor 1,35 berücksichtigt einen Aufschlag von 35 % für Nebenanlagen (*off-sites*). Der Skalierungsfaktor A berechnet sich zu

$$A = 6,2 \cdot 10^{-5} \cdot \left(\frac{\text{Anlagenkapazität } V}{[\text{long tons p.a.}]} \right)^{-0,65} \quad (\text{Gl. 8.9}) [114]$$

Für Nafion® 1100 ergibt sich nach dieser Methode folgendes Ergebnis :

Tabelle 8.6 : Bewertung der Einzelströme für Nafion® 1100 nach STALLWORTHY

	[kg/h]	N_i [-]	F_m [-]	F_p [-]	F_t [-]	R_i [-]	Summand
Strom 1: SO ₃ -TFE-Addition	450	2	1,65	1	1	1,3	4
Strom 2: HFP-Oxidation	15.475	2	1,5	1	1,1	43	142
Strom 3: MAIN (360 Nafion)	360	6	1,5	1	1,1	1,0	10
Strom 4: LM R-113	28.250	1	1,5	1	1	78	118
Strom 5: LM Dichlormethan	1900	1	1,5	1	1	5,3	8

$$I_{\text{Nafion / Stallworthy}} = \frac{1,35 \cdot 0,0075}{3,9 \cdot 10^{-7}} \cdot (4 + 142 + 10 + 118 + 8) \text{ £}(1968) \quad (\text{Gl. 8.10})$$

$$= 18,4 \cdot 10^6 \text{ £}(1968) \cdot \frac{\text{\$(1968)}}{0,4 \text{ £}(1968)} \cdot \frac{395,6 \text{ US-}\$(2002)}{113,6 \text{ US-}\$(1968)} = \underline{64,0 \text{ Mio. US-}\$(2002)}$$

Dabei beträgt die Anlagenkapazität 2461 long tons p.a.

Ansatz der Methode von WILSON [114]

$$I_{\text{Wilson}} = (\text{AUC}) \cdot N \cdot f \cdot F_M \cdot F_P \cdot F_T \cdot 1,3 \quad (\text{Gl. 8.11})$$

mit AUC = mittlere Investition je Apparat (*average unit cost*) aus einer Korrelation mit dem mittleren Durchsatz eines Apparats :

$$\text{AUC} = 21 \cdot \left(\frac{\text{mittlerer Apparatedurchsatz}}{[\text{long tons p.a.}]} \right)^{0,675} \quad (\text{Gl. 8.12})$$

N = Anzahl wichtiger Apparate (ohne Pumpen) und f = Investitionsfaktor (*investment factor*) aus einem Nomogramm. Für mittlere und große Anlagen mit Feststoff-Fluid-Mischungen gilt $f \sim 1,53$. Die Zuschlagfaktoren F_M , F_P und F_T für Konstruktionsmaterial, Druck und Temperatur sind wie schon bei den Methoden zuvor aus Nomogrammen oder Tabellen abzulesen. Dabei ist ein anzahlgemittelter Wert der Einzelapparate anzusetzen. 1,3 = Aufschlag für Nebenanlagen.

Für Nafion® 1100 ergibt sich nach dieser Vorgehensweise folgendes Ergebnis :

Tabelle 8.7 : Bewertung der Einzelapparate für Nafion® 1100 nach WILSON

Apparat	V / kg/h	F _M	P / bar	T / °C	Anzahl Apparate
SO ₂ -Trockner	200	1,65	1	25	6
TFE-Additionsreaktor	450	1,65	2,8	80	12
Umlagerungsreaktor	540	1,65	1	40	
Destillationskolonne	540	1,65	1	42	
Mischer	43.725	1,5	1	-10	
Rohrreaktor	43.725	1,5	1	-10	
Dekanter	43.725	1,5	1	-10	
L-Entsorgung	14.345	1	1	25	
R-113 Destillation	29.380	1,5	2,1	48	
R-113 Tank	28.250	1,5	1	48	
Extraktor	2.805	1,5	2,1	17	
HFP-Stripper	1.881	1,5	1	83	6
HFPO-Additionsreaktor	1.740	1,5	1,3	0	10
Destillationskolonne	1.740	1,5	1	180	
Oligomer-Entsorgung	1.015	1,15	1	25	
Eliminierungsreaktor	395	1,5	1	165	
Wäscher	465	1,5	1	40	
NaF-Entsorgung	215	1	1	25	
Destillationskolonne	250	1,5	1	100	
Pyrolysereaktor	190	1,5	1	300	
Extraktor	190	1,5	1	40	
Rückstandsentsorgung	90	1	1	25	
Polymerisationsreaktor	2.400	1,5	6,2	45	10
Verdampfer	2.400	1,5	1	50	44 (Summe)
Filmgießanlage	7.200	1,5	1	50	
Arithmetisches Mittel	9.114	1,45	1,4	57	

$$I_{\text{Nafion / Wilson}} = 21 \cdot (62.800)^{0,675} \cdot 44 \cdot 1,53 \cdot 1,45 \cdot 1,0 \cdot 1,035 \cdot 1,3 \text{ £(1971)}$$

$$= 3,7 \cdot 10^6 \text{ £(1971)} \cdot 1,3 \cdot \frac{\text{\$(1971)}}{0,41 \text{ £(1971)}} \cdot \frac{395,6 \text{ US-\$(2002)}}{132,3 \text{ US-\$(1971)}} = 34,8 \text{ Mio. US-\$(2002)} \quad (\text{Gl. 8.13})$$

Ansatz der Methode von ALLEN UND PAGE [115]

$$I_{\text{Allen und Page}} = \frac{1}{\{0,15 \dots 0,21 \dots 0,30\}} \cdot \text{DEC}$$

$$\text{DEC} = N \cdot \text{SF} \cdot \text{BIC}(\text{TP})$$

$$\text{SF} = F_{T,\text{max}} \cdot F_{P,\text{max}} \cdot F_{m,\text{mean}} \quad (\text{Gl. 8.14})$$

$$\text{TP} = \text{CAP} \cdot \text{FF} \cdot \text{PF}$$

$$\text{PF} = 0,0075 + \frac{VI}{N}$$

Die Investitionskosten berechnen sich auf Basis der Kosten für fertig gelieferte Hauptaggregate (DEC, *delivered equipment cost*), welche erfahrungsgemäß zwischen 15 und 30 % der Gesamtkosten ausmachen (Mittelwert etwa 21 %). Für die Berechnung von DEC gilt N = Anzahl wichtiger Apparate (inklusive Pumpen) und SF = Produkt dreier Zuschlagfaktoren für Temperatur, Druck und Konstruktionswerkstoffe wie von STALLWORTHY oder WILSON vorgegeben (*state factor*). BIC = mittlere Kosten eines Einzelapparats als Funktion einer im mittel durchgesetzten Stoffmenge TP (Nomogramm). Dieser Durchsatz TP (*throughput*) folgt aus der insgesamt in die Apparate eintretenden Stoffmengen CAP (*total feed capacity*, in lb-mol p.a.), welche mit zwei Faktoren multipliziert wird:

- ♦ FF (*flow factor*) ist das arithmetische Mittel ein- und austretender Ströme eines Apparats
- ♦ PF (*phase factor*) berücksichtigt den Einfluss von Gasen geringer Dichte in den Apparaten, die sie durchsetzen müssen (VI = Anzahl der "Volumenapparate", *volume items*).

Dimensionsbehaftet sind nur CAP und TP [lb-mol/a] sowie DEC und BIC [US-\$(1975)]\$. Es besteht die Möglichkeit, für die Korrelation zwischen BIC und TP anlagenspezifische Exponenten zu verwenden, an deren Stelle in diesem Fall aber eine Betrachtung der im Nomogramm auftretenden Minima und Maxima trat.

Für Nafion® 1100 führt die Methode zu folgendem Ergebnis :

Tabelle 8.8 : Eintretende Stoffmengenströme für Nafion® 1100 nach ALLEN UND PAGE

Strom	kg/h	10 ⁶ [lb/a]	Molekulargewicht [lb/lb-mol]	CAP [10 ⁶ lb-mol/a]
TFE	490	7,6	100,01	0,1
SO ₃	200	3,1	80,06	0,0
NaOCl	1.065	16,4	74,44	0,2
NaOH	230	3,5	40	0,1
Wasser	13.050	201,4	18,02	11,2
HFP	1.130	17,4	150,02	0,1
Na ₂ CO ₃	70	1,1	106	0,0
Wasser	70	1,1	18,02	0,1
LM R-113	30.290	467,4	187,37	2,5
LM Diglyme	305	4,7	134,17	0,0
LM Dichlorethan	1.900	29,3	98,95	0,3
LM Alkohol-Wasser	6.840	105,6	~ 30	3,5
Summe =				18,1

Tabelle 8.9 : Bewertung der Einzelapparate für Nafion® 1100 nach ALLEN UND PAGE

Apparat	F _M	P / bar	T / °C	Anzahl Apparate	FF	VI
SO ₃ -Trockner	1,65	1	25	11	2	
TFE-Additionsreaktor	1,65	2,8	80		3	2
Umlagerungsreaktor	1,65	1	40		3	
Destillationskolonne	1,65	1	42		3	1
Mischer	1,5	1	-10	18	4	
Rohrreaktor	1,5	1	-10		2	
Dekanter	1,5	1	-10		3	
L-Entsorgung	1	1	25		2	
R-113 Destillation	1,5	2,1	48		3	1
R-113 Tank	1,5	1	-10		2	
Extraktor	1,5	2,1	17		4	
HFP-Stripper	1,5	1	83		3	1
HFPO-Additionsreaktor	1,5	1,3	0	11	5	1
Destillationskolonne	1,5	1	180		5	1
Oligomer-Entsorgung	1,15	1	25		2	
Eliminierungsreaktor	1,5	1	165	14	3	
Wäscher	1,5	1	40		4	
NaF-Entsorgung	1	1	25		2	
Destillation	1,5	1	100		3	
Pyrolysereaktor	1,5	1	300		2	
Extraktor	1,5	1	40		3	
Rückstandsentsorgung	1	1	25		2	
Polymerisationsreaktor	1,5	6,2	45	13	7	2
Verdampfer	1,5	1	48		3	2
Filmgießanlage	1,5	1	50		4	1
Mittel	1,45	Max.	Max.	Summe	Mittel	Summe
	1,45	6,2	300	67	3,16	12

$$I_{\text{Nafion / Allen und Page}} = \frac{1}{\{0,15 \dots 0,21 \dots 0,30\}} \cdot \text{DEC} \cdot \frac{395,6 \text{ US-}\$(2002)}{182,4 \text{ US-}\$(1975)}$$

$$\text{DEC} = 67 \cdot 1,58 \cdot \{14,7 \dots 20,0 \dots 25,2\} \cdot 10^3 \text{ US-}\$(1975)$$

$$\text{SF} = 1,09 \cdot 1,00 \cdot 1,45$$

$$\text{TP} = 18,1 \text{ Mio. lb-mol/a} \cdot 3,16 \cdot 0,19$$

$$\text{PF} = 0,0075 + \frac{12}{67}$$

$$I_{\text{Nafion / Allen und Page}} = \{11,3 \dots 21,8 \dots 38,6\} \text{ Mio. US-}\$(2002)$$
(Gl. 8.15)

Ansatz der Methode von TAYLOR [116]

$$I_{\text{Taylor}} = 42 \cdot \text{CI} \cdot \left(\frac{\text{Produktionskapazität}}{[\text{long tons p.a.}]} \right)^{0,39} \cdot 1,3$$

$$\text{CI} = \sum_{i=1}^N 1,3^{S_i}$$
(Gl. 8.16)

Der Faktor CI (costliness index) ist ein Kostenaufwandsindex, der für jeden der N "bedeutenden Prozessschritte" beziehungsweise Substanzen zunächst einzeln ermittelt und dann aufsummiert

wird. Jeder Wert S_i (*complexity score*) folgt ebenfalls summarisch aus Beiträgen für den relativen Durchsatz, Konstruktionswerkstoffe, Temperatur- und Druck, Reaktionszeit und Lagerungsdauer sowie besondere Umstände. Hierzu können zählen :

- ◆ Explosionsgefahr, Staubbelastung, Giftigkeit, Geruchsbelästigung
- ◆ Rektifikation von Substanzen mit ähnlichen Siedepunkten (Azeotrope)
- ◆ Anforderung hoher Reinheitsgrade
- ◆ Fließbettreaktionen, Filmverdampfung und dergleichen

Für Nafion[®] 1100 sieht die Anwendung der Methode folgendermaßen aus :

Tabelle 8.10 : Auswertung für die Synthese von Nafion[®] 1100 nach TAYLOR

Prozessschritt beziehungsweise Substanz	Durchsatz [kg/h]	Relativer Durchsatz	Verweilzeit [h]	Temperatur [°C]	Druckniveau [bar]	S - relativer Durchsatz	S - Verweilzeit	S - min. Temperatur	S - max. Temperatur	S - Werkstoffe	S - besondere Umstände	Gesamtsumme S_i	Kostenaufwandsindex Cl_i
Trocknung von SO ₃	200	0,6		20		-1,1				2		0,9	1,3
Reaktion (TFE-Addition)	450	1,3	1,0	80	2,8	0,4			0,3	2	1	3,7	2,7
Reaktion (Umlagerung)	540	2		40		0,8				2		2,8	2,1
Destillation	540	2		42	1,0	0,8				2		2,8	2,1
Mischen	43.725	121		-10		9,1		0,7		1		10,8	16,9
Reaktion (Epoxidierung)	43.725	121	0,045	-10		9,1		0,7		1		10,8	16,9
Phasentrennung	43.725	121		-10		9,1		0,7		1		10,8	16,9
Entsorgung Na ⁺	13.050	36		20		6,8				1		7,8	7,8
Destillation R-113	30.675	85		-27	2,1	8,5		1,0		1		10,5	15,6
Speicherung R-113	28.250	78	0,5	-10		8,3		0,7		1		10,0	13,6
Extraktion	2.805	8		17	2,1	3,9		0,1		1	1	6,0	4,8
Strippen von HFP	1.881	5		83		3,1			0,3	1		4,5	3,2
Reaktion (HFPO-Addition)	1.740	5	0,5	0	1,3	3,0		0,4		1		4,4	3,2
Destillation	1.740	5		180		3,0			0,5	1		4,5	3,2
Entsorgung Oligoether	1.015	3		20		2,0				0		2,0	1,7
Reaktion (Eliminierung)	395	1,1	8,0	165		0,2	1,9		0,4	1		3,5	2,5
Wäsche	465	1,3		40		0,5				1		1,5	1,5
Entsorgung NaF-CO ₂	215	0,6		20		-1,0				0		-1,0	0,8
Destillation	250	0,7		100		-0,7			0,3	1		0,6	1,2
Entsorgung Rückstand	60	0,2		20		-3,4				0		-3,4	0,4
Reaktion (Pyrolyse)	190	0,5	0,07	300		-1,2			0,7	1		0,5	1,1
Extraktion (Carbonat)	380	1,1		40		0,1				1		1,1	1,3
Reaktion (Polymerisation)	2.440	7	3	45	6,2	3,6				1	1	5,6	4,4
Verdampfung	2.440	7		48		3,6				1		4,6	3,4
Filmgießen	7.200	20		50		5,7				1	1	7,7	7,5
Umgang mit TFE	490	1,4		20	9,0	0,6				1	1	2,6	2,0
Umgang mit SO ₃	200	0,6		20		-1,1				0		-1,1	0,7
Umgang mit NaOCl	14.350	40		-10		7,0		0,7		0		7,7	7,5
Umgang mit HFP	1.130	3		-10		2,2		0,7		1	1	4,8	3,5
Umgang mit R-113 (1)	28.250	78		-10		8,3		0,7		0	0,5	9,5	11,9
Umgang mit R-113 (2)	2.040	6		45		3,3				1	0,5	4,8	3,5
Umgang mit n-Addukten	1.015	3		20		2,0				0	1	3,0	2,2
Umgang mit LM (Filmguss)	6.840	19		50		5,6				0		5,6	4,3
Umgang mit C ₂ H ₄ Cl ₂	1.900	5		20		3,2				0	0,5	3,7	2,6

Anstelle der allgemeinen durchschnittlichen Korrelation wie oben angegeben wurden aus der Publikation von TAYLOR in Anlehnung an 14 Anlagen mit ähnlicher Kapazität Unter- und Obergrenzen für den Quotienten aus Kapitalbedarf und Kostenaufwandsindex bestimmt. Für eine Kapazität von 2461 long tons p.a. folgen hieraus leicht überdurchschnittliche Werte :

$$I_{\text{Taylor}} = \{47,5 \dots 68,1 \dots 88,6\} \cdot 10^3 \text{ £(1977)} \cdot \text{CI} \cdot \frac{\text{US-}\$(1977)}{0,58 \text{ £(1977)}} \cdot \frac{395,6 \text{ US-}\$(2002)}{204,1 \text{ US-}\$(1977)} \cdot 1,3 \quad (\text{Gl. 8.17})$$

Der Zusatzfaktor von 1,3 berücksichtigt wiederum 30 % Aufschlag für Nebenanlagen. Die Gesamtsumme von CI = 174 (siehe Tabelle 8.10) führt dann zu folgendem Mittelwert beziehungsweise folgenden Unter- und Obergrenzen :

$$I_{\text{Nafion / Taylor}} = \{35,7 \dots 51,2 \dots 66,6\} \text{ Mio. US-}\$(2002) \quad (\text{Gl. 8.18})$$

Tabelle 8.11 : Auswertung für die Synthese von sulfoniertem PEEK nach TAYLOR

Prozessschritt beziehungsweise Substanz	Durchsatz [kg/h]	Relativer Durchsatz	Verweilzeit [h]	Temperatur [°C]	Druckniveau [bar]	S - rel. Durchsatz	S - Verweilzeit	S - min. Temperatur	S - max. Temperatur	S - min. Druck	S - max. Druck	S - Werkstoffe	S - bes. Umstände	Gesamtsumme S _i	Kostenaufwand C _i
Lösen (MDA in HF)	970	3		20		1,9						2		3,9	2,8
Lösen (NaNO ₂ in HF)	3.230	9		-10		4,2		0,7				2		6,8	6,0
Reaktion (Diazotierung)	4.200	12	2	-15		4,7		0,8				2	0,5	7,9	8,0
Reaktion (N ₂ -Eliminierung)	4.200	12	3	55		4,7			0,3			2		6,9	6,2
Extraktion	8.570	24		50		6,0						2		8,0	8,2
Verdampfung CCl ₄	4.730	13		60		4,9			0,3			1		6,2	5,0
Destillation HF	3.840	11		100		4,5			0,3			2	0,5	7,3	6,9
Entsorgung Salzlösung	670	2		20		1,2						0		1,2	1,4
Reaktion (Polykondens.)	1.460	4	4,5	270		2,7	0,8		0,6			1		5,1	3,8
Extraktion mit Wasser	2.960	8	1	220	23	4,0			0,5		0,5	1	0,5	6,5	5,6
Entfernen von Restwasser	1.300	4		240	1	2,4			0,6			1		4,0	2,9
Verdampfung DPS	1.300	4		200	0,001	2,4			0,5	3		1		6,9	6,2
Abtrennen von DPS	1.660	5		20		2,9						1		3,9	2,8
Entsorgung Salzlösung	1.660	5		20		2,9						0		2,9	2,1
Mahlen von PEEK	300	1		20		-0,4						1		0,6	1,2
Reaktion (Sulfonierung)	650	2	4	55		1,1	0,5		0,3			2		3,9	2,8
Trennen sPEEK-H ₂ SO ₄	650	2		40		1,1						2		3,1	2,3
Aufkonzentrieren H ₂ SO ₄	280	1		150		-0,5			0,4			2		1,9	1,7
Partikelwäsche mit H ₂ O	720	2		20		1,3						1		2,3	1,8
Verdampfung Restfluide	360	1		200	0,1	0,0			0,5	1		1		2,5	1,9
Lösen (sPEEK in NMP)	3.600	10		150		4,4			0,4			1		5,8	4,6
Filmgießen	3.600	10		150		4,4			0,4			1	2	7,8	7,7
Verdampfung NMP	3.240	9		200		4,2			0,5			1		5,7	4,4
Umgang mit MDA	260	0,7		20		-0,6						0	1	0,4	1,1
Umgang mit NaNO ₂	510	1,4		20		0,7						0		0,7	1,2
Umgang mit HF	3.430	9,5		20		4,3						2	0,5	6,8	5,9
Umgang mit CCl ₄	4.500	12,5		20		4,8						1	0,5	6,3	5,2
Umgang mit Hydr./Na ₂ CO ₃	230	0,6		20		-0,9						0		-0,9	0,8
Umgang mit DPS	1.000	2,8		200		1,9			0,5			1		3,4	2,5
Umgang mit H ₂ SO ₄	350	1,0		50		-0,1						2		1,9	1,7
Umgang mit NMP	3.240	9,0		100		4,2			0,3			0		4,5	3,3

Mit Tabelle 8.11 ergibt sich für sulfoniertes PEEK folgendes Ergebnis :

$$I_{\text{sulf,PEEK / Taylor}} = \{24,1 \dots 34,6 \dots 54,0\} \text{ Mio. US-}\$(2002) \quad (\text{Gl. 8.19})$$

Tabelle 8.12 : Auswertung für die Synthese von BAM3G-SC nach TAYLOR

Prozessschritt beziehungsweise Substanz	Durchsatz [kg/h]	Rel. Durchsatz	Verweilzeit [h]	Temperatur [°C]	Druck [bar]	S - rel. Durchsatz	S - Verweilzeit	S - min. Temp.	S - max. Temp.	S - min. Druck	S - Werkstoffe	S - Besonderes	Gesamtsumme S _i	Kostenaufw. C _i
Reaktion (Iodierung)	2.600	7,2	16,0	20	1,0	3,8	3,2				3	1	10,9	17,6
Reaktion (I ₂ -Reduktion)	4.525	12,6		20		4,8					2		6,8	6,0
Entsorgung NaI	3.955	11,0		20		4,6					0		4,6	3,3
Extraktion CH ₂ Cl ₂	3.470	9,6		20		4,3					1		5,3	4,0
Trocknung	3.120	8,7		20		4,1					1		5,1	3,8
Vakuumverdampfung	3.120	8,7		30	0,001	4,1				3	1		8,1	8,4
Kondensation CH ₂ Cl ₂	2.900	8,1		20		4,0					1		5,0	3,7
Reinigung mCF ₃ -Ph-I	220	0,6		60		-0,9			0,3		2		1,3	1,4
Reaktion (LDA-Synthese)	1.880	5,2	2,5	45		3,1					2	1	6,1	5,0
Destillation LDA	1.880	5,2		40		3,1					2		5,1	3,9
Entsorgung C ₅ H ₁₀	460	1,3		20		0,5					0		0,5	1,1
Mischen R134a + ZnCl ₂	5.660	15,7		15		5,2		0,1			1	0,5	6,9	6,1
Reaktion (Vinylisierung I)	7.080	19,7	1,5	20	1	5,7					2		7,7	7,5
Reaktion (Vinylisierung II)	7.950	22,1	3	65		5,9			0,3		2		8,2	8,5
Auftrennung Produkte	7.950	22,1		65		5,9			0,3		2		8,2	8,5
Entsorgung DIPA + NP	1.580	4,4		20		2,8					0		2,8	2,1
Entsorgung Salze	1.950	5,4		20		3,2					0		3,2	2,3
Reaktion (Polymerisation)	3.480	9,7	72	50		4,3	6,0				2	0,5	12,9	29,2
Reaktion (Emulgatorabbau)	3.550	9,9	1	75		4,4			0,3		1		5,6	4,4
Filtration	3.550	9,9		20		4,4					1		5,4	4,1
Entsorgung H ₂ O-Phase	3.150	8,8		20		4,1					0		4,1	3,0
Extraktion (Methanol)	800	2,2	2	20		1,5					1		2,5	1,9
Filtration	800	2,2		20		1,5					1		2,5	1,9
Reaktion (Sulfon.agens)	1.220	3,4		0		2,3		0,4			2		4,8	3,5
Reaktion (Sulfonierung)	5.220	14,5	4	20		5,1	0,5				1		6,6	5,7
Wäsche mit H ₂ O	8.820	24,5	1	100		6,1			0,3		1		7,4	7,0
Filtration	8.820	24,5		20		6,1					1		7,1	6,4
Rückgewinnung Chloroform	8.460	23,5		60		6,0			0,3		1		7,3	6,7
Entsorgung L-Phase	4.410	12,3		20		4,8					0		4,8	3,5
Vakuumtrocknung, Filmgießen	360	1,0		50	0,001	0,0				3	1		4,0	2,9
Umgang mit Ph-CF ₃	145	0,4		20		-1,7					1		-0,7	0,8
Umgang mit Iod-H ₂ SO ₄	1.760	4,9		20		3,0					1		4,0	2,9
Umgang mit F ₂ -N ₂	345	1,0		20		-0,1					1	0,5	1,4	1,4
Umgang mit Na ₂ S ₂ O ₅	1.925	5		20		3,2					0		3,2	2,3
Umgang mit R-113	350	1,0		20		-0,1					0	0,5	0,4	1,1
Umgang mit CH ₂ Cl ₂	2.900	8,1		40		4,0					1	0,5	5,5	4,2
Umgang mit Lithium	90	0,3		20		-2,6					1	1	-0,6	0,8
Umgang mit DIPA	1.340	4		20		2,5					1	0,5	4,0	2,9
Umgang mit Isopren	450	1,3		20		0,4					0		0,4	1,1
Umgang mit R-134a	810	2		20		1,5					0	0,5	2,0	1,7
Umgang mit THF	3.950	11		20		4,6					1	1	6,6	5,6
Umgang mit ZnCl ₂	900	3		20		1,7					0		1,7	1,6
Umgang mit MeOH	400	1,1		20		0,2					1		1,2	1,4
Umgang mit OP(OEt) ₃	450	1,3		20		0,4					1		1,4	1,5
Umgang mit CHCl ₃	3.600	10		20		4,4					1	0,5	5,9	4,7
Umgang mit SO ₃	770	2		20		1,4					0		1,4	1,5

Mit Tabelle 8.12 ergibt sich für BAM3G-SC folgendes Ergebnis :

$$I_{\text{BAM3G-SC/Taylor}} = \{42,7 \dots 61,2 \dots 79,7\} \text{ Mio. US-}\$(2002) \quad (\text{Gl. 8.20})$$

Tabelle 8.13 : Auswertung für die Synthese von BAM3G-HT nach TAYLOR

Prozessschritt beziehungsweise Substanz	Durchsatz [kg/h]	Rel. Durchsatz	Verweilzeit [h]	Temperatur [°C]	Druck [bar]	S - rel. Durchsatz	S - Verweilzeit	S - min. Temp.	S - max. Temp.	S - min. Druck	S - Werkstoffe	S - Besonderes	Gesamtsumme $\bar{s}$	Kostenaufw. Cl _i
Reaktion (Iodierung)	1.975	5,5	16,0	20	1,0	3,2	3,2				3	1	10,4	15,4
Reaktion (I ₂ -Reduktion)	3.430	9,5		20		4,3					2		6,3	5,2
Entsorgung NaI	3.000	8,3		20		4,0					0		4,0	2,9
Extraktion CH ₂ Cl ₂	2.640	7,3		20		3,8					1		4,8	3,5
Trocknung	2.380	6,6		20		3,6					1		4,6	3,3
Vakuumverdampfung	2.380	6,6		30	0,001	3,6				3	1		7,6	7,3
Kondensation CH ₂ Cl ₂	2.210	6,1		20		3,5					1		4,5	3,2
Reinigung mCF ₃ -Ph-I	170	0,5		60		-1,4		0,3			2		0,8	1,2
Mischen Iodbenzol-CHCl ₃	3.070	8,5		20		4,1					1		5,1	3,8
Reaktion (zu R-SO ₂ Cl)	3.385	9,4		60		4,3		0,3			2		6,5	5,5
Entsorgung HCl	45	0,1		20		-4,0					0		-4,0	0,4
Trennung Flüssigphasen	3.340	9,3		20		4,2					1		5,2	4,0
Entsorgung H ₂ SO ₄	120	0,3		20		-2,1					0		-2,1	0,6
Trocknung	3.220	8,9		20		4,2					1		5,2	3,9
Verdampfung CHCl ₃	3.220	8,9		60		4,2		0,3			1		5,4	4,2
Reaktion (zu R-SO ₂ F)	1.690	4,7		55		2,9		0,3			2		5,2	3,9
Filtration	1.690	4,7		20		2,9					1		3,9	2,8
Verdampfung Aceton	1.370	3,8		55		2,5		0,3			1		3,8	2,7
Entsorgung KCl	130	0,4		20		-1,9					0		-1,9	0,6
Reinigung pSO ₂ F-Ph-I	320	0,9		50	0,001	-0,2				3	2		4,8	3,5
Reaktion (LDA-Synthese)	1.100	3,1	2,5	45		2,1					2	1	5,1	3,8
Destillation LDA	1.100	3,1		40		2,1					2		4,1	2,9
Entsorgung C ₆ H ₁₀	270	0,8		20		-0,6					0		-0,6	0,9
Mischung R134a + ZnCl ₂	3.325	9,2		15		4,2		0,1			1	0,5	5,9	4,7
Reaktion (Vinylisierung I)	4.155	11,5	1,5	20	1	4,7					2		6,7	5,7
Reaktion (Vinylisierung II)	4.765	13,2	3	65		4,9		0,3			2		7,2	6,6
Auftrennung Produkte	4.765	13,2		65		4,9		0,3			2		7,2	6,6
Entsorgung DIPA + NP	940	2,6		20		1,8					0		1,8	1,6
Entsorgung Salze	1.145	3,2		20		2,2					0		2,2	1,8
Reaktion (Polymerisation)	2.090	5,8	72	50		3,3	6,0				2	0,5	11,9	22,6
Reaktion (Emulgatorabbau)	2.125	5,9	1	75		3,4		0,3			1		4,7	3,4
Filtration	2.125	5,9		20		3,4					1		4,4	3,2
Entsorgung H ₂ O-Phase	1.765	4,9		20		3,0					0		3,0	2,2
Extraktion (Methanol)	720	2,0	2	20		1,3					1		2,3	1,8
Filtration	720	2,0		20		1,3					1		2,3	1,8
Dispergieren im LM	7.200	20,0		40		5,7					1		6,7	5,8
Filmgießen	7.200	20,0		60		5,7		0,3			2	1	9,0	10,5
Kondensation LM	6.840	19,0		40		5,6					1		6,6	5,7
Reaktion (alk. Hydrolyse)	720	2,0		20		1,3					1		2,3	1,8
Wäsche mit H ₂ O	720	2,0		20		1,3					1		2,3	1,8
Entsorgung Salze	720	2,0		20		1,3					0		1,3	1,4
Umgang mit Ph-CF ₃	110	0,3		20		-2,3					1		-1,3	0,7
Umgang mit Iod-H ₂ SO ₄	1.340	3,7		20		2,5					1		3,5	2,5
Umgang mit F ₂ -N ₂	265	0,7		20		-0,6					1	0,5	0,9	1,3
Umgang mit Na ₂ S ₂ O ₅	1.455	4,0		20		2,7					0		2,7	2,0
Umgang mit R-113	260	0,7		20		-0,6					0	0,5	-0,1	1,0
Umgang mit CH ₂ Cl ₂	2.210	6,1		40		3,5					1	0,5	5,0	3,7
Umgang mit Iodbenzol	370	1,0		20		0,0					0		0,0	1,0
Umgang mit HClSO ₃	315	0,9		20		-0,3					1		0,7	1,2

Umgang mit Chloroform	2.820	8	20	3,9	0	3,9	2,8
Umgang mit Aceton	1.240	3	20	2,3	0	2,3	1,9
Umgang mit Lithium	55	0	20	-3,6	1	1	-1,6
Umgang mit DIPA	785	2	20	1,5	1	0,5	3,0
Umgang mit Isopren	260	0,7	20	-0,6	0	0	-0,6
Umgang mit R-134a	475	1,3	20	0,5	0	0,5	1,0
Umgang mit THF	2.320	6	20	3,5	1	1	5,5
Umgang mit ZnCl ₂	530	1,5	20	0,7	0	0	0,7
Umgang mit MeOH	7.200	20	40	5,7	1	1	6,7
Umgang mit KOH	395	1,1	20	0,2	0	0	0,2

210

Mit Tabelle 8.13 ergibt sich für BAM3G-HT folgendes Ergebnis :

$$I_{\text{BAM3G-HT / Taylor}} = \{43,0 \dots 61,6 \dots 80,2\} \text{ Mio. US-}\$(2002) \quad (\text{Gl. 8.21})$$

Tabelle 8.14 : Auswertung für die Synthese von H₃PO₄-dotiertem PBI nach TAYLOR

Prozessschritt beziehungsweise Substanz	Durchsatz [kg/h]	Rel. Durchsatz	Verweilzeit [h]	Temperatur [°C]	Druck [bar]	S - rel. Durchsatz	S - Verweilzeit	S - max. Temp.	S - min. Druck	S - max. Druck	S - Werkstoffe	S - Besonderes	Gesamtsumme S _i	Kostenaufw. C _i
Reaktion (TAB)	1.462	4	8	200	65	2,7	1,9	0,5		2,9	2	0,5	10,4	15,4
Abtrennung Roh-TAB	1.462	4		20		2,7					1	0,5	4,2	3,0
Wäsche	1.583	4		20		2,8					1	0,5	4,3	3,1
Entsorgung Ammonsalze	2.959	8		20		4,0					0		4,0	2,9
Feinreinigung Dithionit	1.243	3	0,75	120		2,4		0,4			1,5	0,5	4,7	3,5
Filtration, heiß	1.263	4		100		2,4		0,3			1,5	0,5	4,7	3,5
TAB-Fällung	1.253	3		20		2,4					1,5	0,5	4,4	3,1
Abtrennung Rein-TAB	1.253	3		20		2,4					1,5	0,5	4,4	3,1
Entsorgung/Recycling Filtrat	1.210	3		20		2,3					1		3,3	2,4
Vakuumtrocknung TAB	43	0,1		70	0,023	-4,1		0,3	1,5		1,5		-0,8	0,8
Reaktion (DPI)	340	0,9	4,5	300	17	-0,1	0,8	0,7			1,5		2,8	2,1
Fällung DPI	157	0,4		65		-1,6		0,3			1		-0,3	0,9
Abtrennung DPI	157	0,4		65		-1,6		0,3			1		-0,3	0,9
Rückgewinnung Phenol	277	0,8		180	1	-0,5		0,5			1	1	2,0	1,7
Reaktion (Polykondensation)	108	0,3	1,5	300		-2,3		0,7			2	0,5	0,9	1,3
Mahlen des Vorpolymerisats	85	0,2		20		-2,8					1,5		-1,3	0,7
Reaktion (Polykond.+H ₃ PO ₄)	1.065	3	24	270		2,1	4	0,6			2		8,6	9,6
Kondensation (Phenol+H ₂ O)	50	0,1		50		-3,8					1		-2,8	0,5
Filmgießen der Membran	1.045	3	10	90		2,0	2	0,3			2	1	7,6	7,4
Entsorgung H ₃ PO ₄	685	2		20		1,2					0		1,2	1,4
Umgang mit DCB	60	0,2		20		-3,4					2	1	-0,4	0,9
Umgang mit NH ₃ -NH ₄ Cl (aq)	2.907	8,1		20		4,0					1		5,0	3,7
Umgang mit Na ₂ S ₂ O ₃	600	1,7		20		1,0					1		2,0	1,7
Umgang mit Phenol	50	0,1		20		-3,8					1	1	-1,8	0,6
Umgang mit Isophthalsäure	35	0,1		20		-4,4					1		-3,4	0,4
Umgang mit P-115 / H ₃ PO ₄	980	2,7		20		1,9					1	0,5	3,4	2,4
Umgang mit Phenol	43	0,1		20		-4,1					0	0,5	-3,6	0,4

77

Mit Tabelle 8.14 ergibt sich für Phosphorsäure-dotiertes PBI folgendes Ergebnis :

$$I_{\text{dot.PBI / Taylor}} = \{15,8 \dots 22,7 \dots 29,6\} \text{ Mio. US-}\$(2002) \quad (\text{Gl. 8.22})$$

8.11 Materialwert des Platins in Katalysatoren

Bei der Materialauswahl für den Katalysator bestehen wenige technologische Alternativen. Platin und gegebenenfalls Ruthenium auf Rußpartikeln sind der einzige bisher praktikable Lösungsweg. Unabhängig vom Verfahren, über das der Edelmetallkatalysator hergestellt wird, steht den Fertigungskosten in jedem Fall ein beträchtlicher Materialwert gegenüber. Diesen stellt die folgende Tabelle zu Vergleichszwecken mit den Ergebnissen für Composit-Bipolarplatten und Polymermembranen (Kapitel 5 und 6) als Funktion seiner wesentlichen Einflussgrößen dar. Berücksichtigt man die Gesamtbeladung von Anode und Kathode, eine angenommene maximale Leistungsdichte sowie den für das Edelmetall zu entrichtenden Preis, so folgen direkte Materialkosten gemäß der folgenden Aufstellung.

Tabelle 8.15 : Materialkosten für Platin in US-\$ je kW als Funktion von drei Parametern

	15			20			25			30			[\$ / g Pt]
	425			567			709			850			[\$ / oz Pt]
[g Pt/m ²]	3	4	5	3	4	5	3	4	5	3	4	5	[kW / m ²]
2	10	7,5	6,0	13	10	8,0	17	13	10	20	15	12	[\$ / kW]
3	15	11	9,0	20	15	12	25	19	15	30	23	18	[\$ / kW]
4	20	15	12	27	20	16	33	25	20	40	30	24	[\$ / kW]
5	25	19	15	33	25	20	42	31	25	50	38	30	[\$ / kW]
6	30	23	18	40	30	24	50	38	30	60	45	36	[\$ / kW]
7	35	26	21	47	35	28	58	44	35	70	53	42	[\$ / kW]

Die mit einer bestimmten Platinbeladung (linke Spalte) erreichbare Leistungsdichte in kW/m² (3. Spalte von oben) ergibt sich aus dem technischen Entwicklungsstand, der in Gleichung 4.10 (Seite 52) mit dem "Leistungsvermögen im Betrieb" beschrieben ist. Die Tabelle nimmt vier verschiedene Preisstufen für das reine Platin an. Das untere Bild 8.8 zeigt als ergänzende Information hierzu die Preisentwicklung für Platin am London Metal Exchange (LME) seit 1960 :

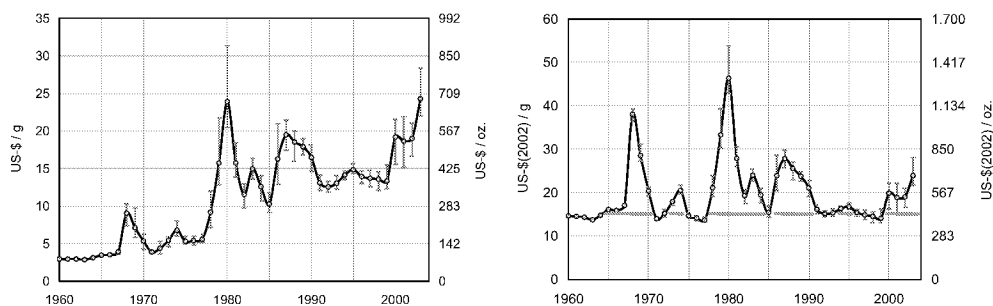


Bild 8.8 : Entwicklung des Platinpreises seit 1960. links: Originaldaten, rechts: US-\$(2002)

Der linke Teil gibt die Originaldaten an. Auf der rechten Seite sind diese Preise in US-\$(2002) ausgedrückt, wobei als Kompensationsfaktor der Preisbereinigungsindex für das Bruttoinlandsprodukt der USA verwendet worden ist (*gross domestic product implicit price deflator*) [183]. Hierbei ist zu sehen, dass auch in früheren Dekaden der Preis meist auf einem unteren Niveau

von etwa 15 US-\$(2002) basierte, das von einzelnen Peaks überlagert worden ist. Sie lassen sich meist Ereignissen zuordnen, die mit Platin als strategischer Reserve in Verbindung standen. Mögliche Beispiele hierfür sind :

1973 – 1. Ölkrise

1975 – Einführung des 3-Wege-Katalysators für Neuzulassungen in Kalifornien

1980 – 2. Ölkrise

1988 – 3-Wege-Katalysator wird Pflicht für Pkw-Neuzulassungen in Österreich

1993 – 3-Wege-Katalysator wird Pflicht für Pkw-Neuzulassungen in der EU (Beschluss: 6-89)

1996 – Verschärfung der EU-Abgasnormen für Neufahrzeuge

1998 – Verschärfung der Emissionsgrenzwerte in Teilen der USA (Kat. für Rasenmäher u.ä.)

2000 – Brennstoffzellen-Euphorie

2003 – 2. Irak-Krieg / Spekulation / absehbare Verzögerung neuer Minenprojekte in Südafrika

8.12 Literaturverzeichnis

- [1] Schirmeister, E. et al. "Auswirkungen des Einsatzes der Brennstoffzelle im Kraftfahrzeug auf die Industrie in Nordrhein-Westfalen" Bericht an das Ministerium für Wirtschaft und Mittelstand, Energie und Verkehr Nordrhein-Westfalen (Monografie). Fraunhofer Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung (ISI), Oktober 2002
- [2] Waidhas, M. et al. "Materials and Construction Principles for PEM Fuel Cells" in: Büchi, F.N., Scherer, G.G. und Wokaun, A. "Proceedings of the international conference with exhibition 1st European PEFC Forum Lucerne 2001", pp. 285-295
- [3] Williams, M.C., Hitchings C. et al. "Fuel Cell Handbook (sixth edition)" U.S. Department of Energy, National Energy Technology Laboratory (NETL), November 2002
- [4] Martini, K. et al. "Brennstoffzellentechnologie - Energie für die Mobilität von morgen" Adam Opel AG, Öffentlichkeitsarbeit Rüsselsheim, Nr. 0864153
- [5] Carlson, E., Thijssen, J. und Kumar, R., "Cost Analysis of Fuel Cell System for Transportation - 2001 System Cost Estimate. Report to Department of Energy, Reference 49739" Arthur D. Little, Argonne National Lab, U.S. Department of Energy 2001
- [6] Büchi, F.N., Ruge, M. "Bipolar Elements for PE Fuel Cell Stacks Based on the Mould to Size Process of Carbon-Polymer Mixtures" in: ibid 2, p. 299-308
- [7] Chalk, S. et al. "FY 2001 - Progress Report for Fuel Cells for Transportation" U.S. Department of Energy, Office of Advanced Automotive Technologies, EERE-OTT, Dezember 2001
- [8] Schirmeister, E., Wengel, J. et al. "Innovationsprozess vom Verbrennungsmotor zur Brennstoffzelle" Fraunhofer Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung Karlsruhe, Februar 2000
- [9] Wagner, N. et al. "Entwicklungslinien auf dem Gebiet der Membran-Brennstoffzellen (PEFC)" in: "Themen 1999/2000: Zukunftstechnologie Brennstoffzellen" Forschungsverbund Sonnenenergie, Berlin - Februar 2000, p. 11-18
- [10] Zawodinsky, C., Wilson, M.S. und Gottesfeld, S. "Corrosion testing of stainless steel fuel cell hardware" in: Courtesy Assoc., Washington D.C. "Fuel Cell Seminar 1998 Abstracts, Palm Springs 1998", pp. 647-650
- [11] Makkus, R.C. et al. "Use of stainless steel for cost competitive bipolar plates in the SPFC" Journal of Power Sources 86(2000), pp. 274-282
- [12] "System Nr. 41: Titan" in: Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie, 8. Auflage 1951

- [13] Chalk, S. et al. "FY 2002 - DoE Fuel Cells for Transportation Program: R & D Project Abstracts" U.S. Department of Energy, Office of Advanced Automotive Technologies, EERE-OTT February 2002
- [14] Keijzer, M. et al. "TiCN and metallic coatings for corrosion protection of separator plates in MCFCs" *Journal of applied Electrochemistry* 30(12), Dezember 2000, pp. 1421-1431
- [15] Hodgson, D.R. "Stainless steel substrate treatment" Patent Nr. WO 02/13300 A1, Anmelder Ineos Chlor Ltd., veröffentlicht am 14. Februar 2002
- [16] N.N. "Injection Moulding Technology - HM Series" Firmenprospekt der Battenfeld Kunststoffmaschinen GmbH, 2002
- [17] Johannaber, F. und Michaeli, W. "Handbuch Spritzgießen" November 2001
- [18] Knothe, J.M. "Elektrische Eigenschaften von spritzgegossenen Kunststoffformteilen aus leitfähigen Compounds" Dissertation an der Fakultät für Maschinenwesen der RWTH Aachen, Juni 1996
- [19] Onishak, M. et al. "Molded graphite bipolar separator plates for fuel cells" Dokument Nr. 2000-01-1554, Society of Automotive Engineers (SAE), Future Car Congress, Crystal City, VA, April 2000
- [20] Heinzl, A. et al. "Low-cost composite bipolar plates for PEM fuel cells" in: Courtesy Assoc., Washington D.C. "2002 Fuel Cell Seminar Abstracts", Palm Springs, November 2002, pp. 153-156
- [21] Ehrenberg, S. et al. "One-piece bipolar plate with cold plate cooling", in: ibid 20, pp. 858-861
- [22] Berg, N. "Auf dem Weg zur Serie - Mit kostengünstigen Brennstoffzellen-Komponenten zum Marktdurchbruch" *Brennstoff-Wärme-Kraft* 53(2001) Nr. 12, pp. 49-51
- [23] Mercuri, R.A., Weber, T.W. und Wardrip, M.L. "Fluid permeable flexible graphite article with enhanced electrical and thermal conductivity" United States Patent Application Nr. 6,548,156 von Graftech Inc. - eingereicht März 2002
- [24] Mercuri, R.A. und Gough, J.J. "Electrically conductive seal for fuel cell elements" United States Patent Nr. 6,060,189 von UCAR Carbon Technology Corporation - eingereicht Juni 1998, erteilt Mai 2000
- [25] Turpin, M. und Bilton, B. "Reducing the costs of fuel cell components" in: IQPC (Veranstalter) "F-Cells 2001: Commercialising Stationary Applications" London, 30.-31. August 2001
- [26] Appleby, A.J., Yeager, E.B. "4. Solid polymer electrolyte fuel cells (SPEFCs)" *Energy* 11(1986), pp. 137-151
- [27] Kreuer, K.D. "On the development of proton conducting polymer membranes for hydrogen and methanol fuel cells" *Journal of Membrane Science* 185(2001), pp. 29-39
- [28] Kerres, J.A. "Development of ionomer membranes for fuel cells" *Journal of Membrane Science* 185(2001), pp. 3-27
- [29] Jones, D.J. und Rozière, J. "Recent advances in the functionalisation of polybenzimidazole and polyetherketone for fuel cell applications" *Journal of Membrane Science* 185(2001), pp. 41-58
- [30] Zaidi, S.M.J. et al. "Proton conducting composite membranes from polyether ether ketone and heteropolyacids for fuel cell applications" *Journal of Membrane Science* 173(2000), pp. 17-34
- [31] Staiti, P., Minutoli, M. und Hocevar, S. "Membranes based on phosphotungstic acid and polybenzimidazole for fuel cell application" *Journal of Power Sources* 90(2000), pp. 231-235
- [32] De Jaeger, R. und Gleria, M. "Poly(organophosphazene)s and related compounds: synthesis, properties and applications" *Progress in Polymer Science* 23(1998), pp. 179-276
- [33] Allen, C.W. und Hneihen, A.S. "New aspects of the preparation and polymerization of $\text{Cl}_3\text{PNP}(\text{O})\text{Cl}_2$ " *Phosphorus, Sulfur and Silicon* 146(1999), pp. 213-216
- [34] Allcock, H.R. et al. "Phenyl phosphonic acid functionalized poly[aryloxyphosphazenes] as proton-conducting membranes for direct methanol fuel cells" *Journal of Membrane Science* 201(2002), pp. 47-54
- [35] Guo, Q. et al. "Sulfonated and crosslinked polyphosphazene-based proton-exchange membranes" *Journal of Membrane Science* 154(1999), pp. 175-181

- [36] Genies, C. et al. "Stability study of sulfonated phthalic and naphthalenic polyimide structures in aqueous medium" *Polymer* 42(12), Juni 2001, pp. 5097-5105
- [37] Okuyama, K. und Nishikawa, F. "Oxidation-resistance of hydrocarbon electrolyte membranes for PEFC" *Nippon Kagaku Kaishi* (1), Januar 1997, pp. 69-72
- [38] Schmidt, T.J. et al. "Influence of cross-linking on the performance and stability of radiation grafted membranes in polymer electrolyte fuel cells" in: Wokaun, A. und Daum, C. "Scientific Report 2002 / Volume V: General Energy" Paul Scherrer Institut, Villingen / Schweiz, pp. 81-82
- [39] Kreuer, K.D. "On solids with liquidlike properties and the challenge to develop new proton-conducting separator materials for intermediate-temperature fuel cells" *Chemphyschem* 3(9), 2002, pp. 771-775
- [40] Schuster, M. et al. "Proton mobility in oligomer-bound proton solvents: imidazole immobilization via flexible spacers" *Solid State Ionics* 145(2001), pp. 85-92
- [41] Davis, T.A., Genders, J.D. und Pletcher, D. "A first course in ion permeable membranes" The Electrochemical Consultancy (ECC) England, 1997
- [42] Lovell, K. V. und Page, N.S. "Membrane electrolyte technology for solid polymer fuel cells" Bericht Nr. F/02/00110/REP, Energy Technology support unit (ETSU) des Department of Trade and Industry (DTI), 1997
- [43] Hoogers, G. und Thompsett, D. "Catalysis in proton exchange membrane fuel cell technology" *Cattech* 3(2002), Nr. 2 - Februar 2000
- [44] Paulus, U.A. et al. "Oxygen reduction activity of Pt and Pt-alloy catalysts: a comparison between kinetic measurements and polymer electrolyte fuel cell experiments" in: *ibid* 20, pp. 742-745
- [45] Uribe, F.A. und Zawodinski Jr., T.A. "A study of polymer electrolyte fuel cell performance at high voltages. Dependence on cathode catalyst layer composition and on voltage conditioning" *Electrochimica Acta* 47(2002), pp. 3799-3806
- [46] Brand, R. et al. "Platinum alloy catalyst for fuel cells and method of its production" United States Patent Nr. 5,489,563 der Degussa Aktiengesellschaft - eingereicht Oktober 1994, erteilt Februar 1996
- [47] Keck, L., Buchanan, J. und Hards, G.A. "Catalyst material" United States Patent Nr. 5,068,161 von Johnson Matthey plc - eingereicht März 1990, erteilt November 1991
- [48] Hards, G. et al. "New catalyst and MEA developments for high performance PEM fuel cells" in: *ibid* 20, pp. 854-857
- [49] Ralph, T.R. et al. "Low cost electrodes for proton exchange membrane fuel cells" *Journal of the Electrochemical Society* 144(1997), pp. 3845-3857
- [50] Fulcheri, L. et al. "Plasma processing: a step towards the production of new grades of carbon black" *Carbon* 40(2002), pp. 169-176
- [51] Firmeninformation der Cabot Carbon Corporation, www.cabot-corp.com
- [52] Dorn, F.W., Wolter, M. und Heimer, G. "Apparatus for improving the degree of graphitization of carbon black, and its use" United States Patent Nr. 4,601,887 der Hoechst Aktiengesellschaft - eingereicht September 1982, erteilt Juli 1986
- [53] Crabb, E.M., Marshall, R. und Thompsett, D. "Carbon Monoxide Electrooxidation Properties of Carbon-Supported PtSn Catalysts Prepared Using Surface Organometallic Chemistry" *Journal of the Electrochemical Society* 147(2000), pp. 4440-4447
- [54] Bönemann, H., Brijoux, W. und Jousen, T. "Verfahren zur Herstellung von mikrokristallinen bis amorphen Metall- bzw. Legierungspulvern und ohne Schutzkolloid in organischen Solventien gelösten Metallen bzw. Legierungen" Europäisches Patent EP 423627 B1 - eingereicht 1989, erteilt Oktober 1990
- [55] Hampden-Smith, M. et al. "The manufacture of electrocatalysts for successful PEM fuel cell commercialization" in: *ibid* 20, pp. 790-793

- [56] Hampden-Smith, M. "The design and performance of electrocatalysts produced by spray based routes for fuel cell and battery applications" in: The Knowledge Foundation Inc. "Small Fuel Cell 2002" conference proceedings, Washington, April 2002
- [57] Hampden-Smith et al. "Aerosol method and apparatus, particulate products and electronic devices made therefrom" United States Patent Nr. 6,338,809 von Superior MicroPowders LLC - eingereicht Februar 1998, erteilt Januar 2002
- [58] Kudas et al. "Metal-carbon composite powders, methods for producing powders and devices fabricated from same" United States Patent Nr. 6,103,393 von Superior MicroPowders LLC - eingereicht August 1998, erteilt August 2000
- [59] Kudas et al. "Methods for producing platinum powders" United States Patent Nr. 6,165,247 von Superior MicroPowders LLC - eingereicht Februar 1998, erteilt Dezember 2000
- [60] Bernfeld, G.J. et al. "Pt - Platinum, System Nr. 65, Supplement Volume A1: Technology of Platinum-Group Metals" in: "Gmelin Handbook of Inorganic Chemistry" Gmelin-Institut für Anorganische Chemie der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften, 8. Auflage 1986
- [61] Gilmour, B. "Platinum Group Metals" in: "Mining Annual Review 2000" The Mining Journal Ltd. 2000, pp. 1-6
- [62] Wood, D.L. et al. "Correlation of gas diffusion layer physical properties and PEMFC performance" in: *ibid* 20, pp. 41-44
- [63] Warren, C.D. et al. "Low cost carbon fiber for the next generation of vehicles: novel technologies" Dokument Nr. 2000-01-1906, Society of Automotive Engineers (SAE), Future Car Congress, Crystal City, VA, April 2000
- [64] Schulze, M., Gülzow, E. und Steinhilber, G. "Physical characterization of membrane electrode assemblies for PEFC and DMFC and of their components" in: *ibid* 20, pp. 207-210
- [65] Cavalca, C.A., Arps, J.A. und Murthy, M. "Fuel cell membrane electrode assemblies with improved power outputs and poison resistance" United States Patent Nr. 6,300,000 von Gore Enterprise Holdings - eingereicht Juni 1999, erteilt Oktober 2001
- [66] Bretkopf, R. et al. "Fabricating Pt-containing electrocatalyst layers for PEMFC applications using combustion chemical vapor deposition" in: *ibid* 20, pp. 850-853
- [67] Gülzow, E. et al. "Progress of DMFC development using dry spraying preparation technique" in: *ibid* 20, pp. 212-215
- [68] Ahn, S.Y. und Lee, Y.C. "Fabrication of membrane electrode assemblies for the polymer electrolyte membrane fuel cell using the membrane on electrode (MOE) technique" in: *ibid* 20, pp. 109-112
- [69] Starz, K.-A. et al. "Edelmetall-Nanopartikel, Verfahren zu ihrer Herstellung und Verwendung" Deutsches Patent DE 100 37 071 A1 - eingereicht Juli 2000, erteilt Februar 2002
- [70] Dohle, H. et al. "Coating machinery and technology for the fabrication of components of membrane electrode assemblies for PEM and DMFC fuel cells" in: *ibid* 2, pp. 179-186
- [71] Galli, S., Pozio, A. und Lo Presti, R. "Performance evaluation of a fuel cell with membrane electrode gasket assembly (MEGA) technology" in: *ibid* 20, pp. 200-202
- [72] N.N. "Lab Solutions, Coating Solutions, Turn-Key Solutions - Machinery in perfection..." Firmenprospekt der Coatema GmbH, 2001
- [73] Köhler, J. et al. "Verfahren zur Herstellung einer Membran-Elektrodeneinheit für Brennstoffzellen" Deutsches Patent DE 100 50 467 A1 - eingereicht Oktober 2000, erteilt Mai 2002
- [74] Grube, T. "Analyse und Optimierung der Herstellkosten von Membran-Elektrodeneinheiten (MEA) für Brennstoffzellen am Beispiel eines serienfähigen Beschichtungsprozesses" Diplomarbeit, Rheinische Fachhochschule e.V. Köln, November 2002

- [75] Evertz, J. und Günthart, M. "Structural concepts for light-weight and cost-effective end plates for fuel cell stacks" in: Stolten, D., Emonts, B. und Peters, R. "Proceedings of the international conference with exhibition 2nd European PEFC Forum Lucerne 2003" pp. 469-482
- [76] Boothroyd, G., Dewhurst, P. and Knight, W. "Product Design for Manufacture and Assembly" 2nd edition - revised and expanded.
- [77] Banhardt, V., Rinn, G. und Neuweyer, H. "Development of mass production technologies for advanced graphite-composite bipolar plates" in: ibid 20, pp. 66-69
- [78] Wöhe, G. "Einführung in die Allgemeine Betriebswirtschaftslehre" 21. Auflage 2002
- [79] Carlson, E.J., Thijssen, J. und Kumar, R. "Cost analysis of fuel cell systems for transportation - 2001 System Cost Estimate" Ref. 49739, SFAA-No. DE-SC02-98EE50526, Task 3: Report to Department of Energy, Arthur D. Little Inc., Cambridge MA, August 2001
- [80] Carlson, E.J., Mariano, S.A. und Kumar, R. "Cost analysis of fuel cell systems for transportation - 2000 System Cost Estimate" Ref. 49739, SFAA-No. DE-SC02-98EE50526, Tasks 1 und 2: Final report to Department of Energy, Arthur D. Little Inc., Cambridge MA, März 2000
- [81] Späh, R. et al. "Projekt: PEM-Brennstoffzelle für mobile Anwendungen, Teilprojekt: Systementwicklung" Abschlussbericht DaimlerChrysler zum BMBF-Projekt, Förderkennzeichen 032 9567B, März 1999
- [82] Berg, N. "Aufbau und Kostenentwicklung bei PEFC Brennstoffzellenkomponenten" in: Management Circle AG "Brennstoffzellen im Automobil - Aktueller Entwicklungsstand und Zukunft" Konferenzunterlagen, November 2002
- [83] Waidhas, M., De Bruijn, F. und Scherer, G. "Second generation SPFC - Development of commercially viable stacks" Publishable report Siemens AG / ECN / PSI unter Vertrags-Nr. J0U3-CT95-0027 (The European Commission, Joule III programme), Projektlaufzeit Januar 1996 bis Dezember 1999
- [84] Ekdunge, P. und Råberg, M. "The fuel cell vehicle analysis of energy use, emissions and cost" International Journal of Hydrogen Energy 23(5), pp. 381-385
- [85] Allen, P.W., Bernard, R.M. und Allen, J.P. "Stack design utilizing components produced with continuous high-volume manufacturing techniques" in: ibid 20, pp. 776-779
- [86] Garrett, D.E. "Chemical engineering economics" 1989
- [87] Curtin, D.E. und Watkins, M.A. "High volume, low cost manufacturing process for Nafion[®] membranes" in: ibid 20, pp. 834-837
- [88] Elias, H.G. "Makromoleküle - Band 2: Technologie" 5. Auflage 1990
- [89] Schembra, M. und Schulze J. "Schätzung der Investitionskosten bei der Prozessentwicklung" Chemie-Ingenieur-Technik 65(1993) Nr. 1, pp. 41-47
- [90] U.S. Census Bureau "Statistical Abstract of the United States - The National Data Book 2000" U.S. Department of Commerce, Economics and Statistics Administration, April 2001. Entsprechende Daten unter www.bls.gov/ppi (U.S. Department of Labor, Bureau of Labor Statistics)
- [91] Plastics Technology Online "Resin Pricing" Web-Provider für die kunststoffverarbeitende Industrie, 2002, www.plasticstechnology.com
- [92] Hampden-Smith, M. "A review of component costs for small fuel cells für portable applications" in: The Knowledge Foundation Inc. "Small Fuel Cell 2002 - Conference Workshop" conference proceedings, Washington, April 2002
- [93] Walker, N. "Fuel cells cost reduction through component and materials development" in: ibid 25
- [94] Oanda Inc. und Olsen & Associates "OANDA - The currency site" Web-Provider für Währungs- und Devisendienstleistungen im Internet, www.oanda.com
- [95] Camp, R.C. "Benchmarking" deutsche Ausgabe 1994, 353 Seiten

- [96] Wesselmann, J. "Vorgehensweise zur Kennzahlenentwicklung und zur Durchführung eines Benchmarking in Forschung und Entwicklung" 1997. Herausgeber: Unternehmensverband der Metallindustrie für Dortmund und Umgebung e.V., 110 Seiten
- [97] Pieske, R. "Benchmarking: Das Lernen von anderen und seine Begrenzungen" in Management Zeitschrift 63(1994) Nr. 6, pp. 19-23
- [98] Burckhardt, W. "Lernen durch Benchmarking - in Führung gehen durch Neugestalten" Office Management 10(1994), pp. 70-80
- [99] Burckhardt, W. "Unternehmen wandeln - Wettbewerbsfähiges Neugestalten, Entschlacken und Umsetzen durch Benchmarking" Qualität und Zuverlässigkeit, 40(1995) Nr. 5, pp. 517-520
- [100] Metropolis, N. et al. "Equation of state calculations by fast computing machines" Journal of Chemical Physics 21(1953) Nr. 6, pp. 1087-1092
- [101] Kalos, M.H. und Whitlock, P.A. "Monte Carlo Methods" 1986, Band 1
- [102] Ayyub, B.M. und McCuen, R.H. "Probability, statistics and reliability for engineers and scientists" 2. Auflage 2002
- [103] von Nitzsch, R. "Investitionsrechnung - Grundlagen, Modelle und Kalküle" 2. Auflage 1999
- [104] Council Regulation (EEC) No 3037/1990 vom 9. Oktober 1990, OJ L 293
- [105] Ehrenspiel, K. "Kostengünstig konstruieren - Kostenwissen, Kosteneinflüsse, Kostensenkung" 1. Auflage 1985
- [106] Helfrich, F. und Schubert W. "Ermittlung von Investitionskosten, Einfluss auf die Wirtschaftlichkeitsrechnung" Chemie-Ingenieur-Technik 45(1973) Nr. 13, pp. 891-897
- [107] Festel, G. et al. "BWL für Chemiker" September 2001
- [108] Madauss, B. "Handbuch Projektmanagement" 6. Auflage 2000
- [109] Gröner, L. "Entwicklungsbegleitende Vorkalkulation" 1991
- [110] Gerrard, A.M. "Guide to capital cost estimating" 4th edition 2000
- [111] Gaensslen, H. "Abgekürztes Verfahren zur Vorkalkulation der Investitions- und Produktionskosten von Anlagen der organisch-chemischen Grundstoff-Industrie mit Hilfe thermischer Kenngrößen" Dissertation, Technische Universität Berlin, 1983
- [112] Zevnik, F.C. und Buchanan, R.L. "Generalized correlation of process investment", Chemical Engineering Progress 59(1963) Nr. 2, pp. 70-77
- [113] Stallworthy, E.A. "The viewpoint of a large chemical manufacturing company" The Chemical Engineer 239(1970), pp. CE182-CE189
- [114] Wilson, G.T. "Capital investment for chemical plant" British Chemical Engineering and Process Technology 16(1971) Nr. 10, pp. 931-934
- [115] Allen, D.H. und Page, R.C. "Revised technique for predesign cost estimating" Chemical Engineering 82(1975) Nr. 5, pp. 142-150
- [116] Taylor, J.H. "The 'process step scoring' method for making quick capital estimates" Engineering and Process Economics 2(1977), pp. 259-267
- [117] Petley, G.J. und Edwards, D.W. "Further developments in chemical plant cost estimating using fuzzy matching" Computers and Chemical Engineering 19(1995) Suppl. S, pp. S675-S680
- [118] The Chemical Engineering Magazine, <http://www.che.com/pindex/>
- [119] persönliche Mitteilung, die zuverlässige Quelle ist dem Autor bekannt
- [120] Statistisches Bundesamt der Bundesrepublik Deutschland "Kostenstruktur im Produzierenden Gewerbe" Statistisches Jahrbuch 2002, Kapitel 9.3
- [121] Dudenhöffer, F. "Marktpotenziale für Brennstoffzellen-Antriebssysteme" Automobilwirtschaft 3(2001), pp. 70-71

- [122] Connolly, D.J. und Gresham, W.F. "Fluorocarbon vinyl ether polymers" United States Patent Nr. 3,282,875 von E.I. du Pont de Nemours and Company - eingereicht Juli 1964, erteilt November 1966
- [123] Grot, W.G. "Polymerization of fluorinated copolymers" United States Patent Nr. 5,281,680 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht Januar 1993, erteilt Januar 1994
- [124] persönliche Mitteilung Dr. Bernd Bauer, Telefonat am 3. Juni 2003
- [125] Siegemund, G. und Schwertfeger, W. "Fluorine Compounds, Organic - 4. Fluorinated Olefins" in: "Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry" 7. Auflage 2003 in der Online-Version unter www.mrw.interscience.wiley.com/ueic
- [126] England, D.C. " α -Sulfopolyfluoromonocarboxylic acids and derivatives hydrolyzable thereto" United States Patent Nr. 2,852,554 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht Juli 1956, erteilt September 1958
- [127] Putnam, R.E. und Nicoll, W.D. "Fluorocarbon ethers containing sulfonyl groups" United States Patent Nr. 3,301,893 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht August 1963, erteilt Januar 1967
- [128] Resnick, P.R. "Purification of perfluorosulfonyl fluoride perfluorovinyl ethers by thermal decomposition of unstable isomers" United States Patent Re. 29,534 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht Juni 1976, erteilt Februar 1978
- [129] Milian, A.S. und Resnick, P.R. "Process for synthesizing Hexafluoropropylene Epoxide" United States Patent Nr. 3,600,409 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht 1968, erteilt 1971
- [130] Ikeda, M. und Morikazu, M. "Process for the production of Hexafluoropropylene Oxide" United States Patent Nr. 4,925,961 von Asahi Kasei KKK - eingereicht Mai 1989, erteilt Mai 1990
- [131] Millauer, H., Schwertfeger, W. und Siegemund G. "Hexafluoropropene Oxide - A Key Compound in Organofluorine Chemistry" *Angewandte Chemie, International Edition Englisch* 24(1985), pp. 161-179
- [132] Grot, W.G. "Process for making liquid composition of perfluorinated ion exchange polymer, and product thereof" United States Patent Nr. 4,433,082 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht Mai 1981, erteilt Februar 1984
- [133] N.N. "Nafion Membranes NR-111, NR-112" Produktinformation NAE201 von E.I. Du Pont de Nemours, November 2001
- [134] Oda, Y. Uchida, K und Morikawa, S. "Method of purifying Hexafluoropropylene oxide" United States Patent Nr. 4,134,796 von Asahi Glass Company Ltd. - eingereicht November 1977, erteilt Januar 1979
- [135] Mahler, W. und Resnick, R. "The reversible difluorocarbene elimination from hexafluoropropylene epoxide" *Journal of Fluorine Chemistry* 3(1973/74), pp. 451-452
- [136] Darling, T.R. "Purification and Polymerization of Hexafluoropropylene oxide" United States Patent Nr. 4,356,291 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht April 1981, erteilt Oktober 1982
- [137] Baerns, M., Hofmann, H. und Renken, A. "Chemische Reaktionstechnik", 3. Auflage 1999, Band 1
- [138] Ebnesajjad, S. "Fluoroplastics, Volume 1: Non-melt processible fluoroplastics. The definite user's guide and databook" 2000
- [139] Améduri, B., Boutevin, B. und Kostov, G. "Fluoroelastomers: synthesis, properties and applications" *Progress in Polymer Science* 26(2001) pp. 105-187
- [140] Hals, L.J., Reid, T.S. und Smith, G.H. "The preparation of terminally unsaturated perfluoro olefins by the decomposition of the salts of perfluoro acids" *Journal of the American Chem. Soc.* 73(1951), p. 4054
- [141] Sievert, A.C., Mallikarjuna Rao, V.N. und Walczak, F.J. "Processes for the production of hexafluoropropene and optionally other halogenated hydrocarbons containing fluorine" United States Patent Nr. 6,329,559 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht Juni 1999, erteilt Dezember 2001

- [142] Webster, J.L. et al. "Multistep synthesis of Hexafluoropropylene" United States Patent Nr. 5,057,634 von E.I. Du Pont de Nemours and Company - eingereicht Dezember 1989, erteilt Oktober 1991
- [143] Brennan, D. "Process industry economics" 1998
- [144] Streck, A.E. and Stone C. " α,β,β -Trifluorostyrene-based composite membranes" United States Patent Nr. 6,437,011 von Ballard Power Systems Inc. - eingereicht Juli 2001, erteilt August 2002
- [145] Heinze P.L. und Burton D.J. "Palladium-catalyzed cross-coupling of perfluoroalkenylzinc reagents with aryl iodides. A new, simple synthesis of α,β,β -Trifluorostyrenes and the stereoselective preparation of 1-arylperfluoropropenes" Journal of Organic Chemistry 53(1988), pp. 2714-2720
- [146] Anilkumar, R. und Burton D.J. "A remarkable room temperature preparation of the trifluorovinylzinc reagent from HFC-134a. A cost-effective, high yield synthesis of α,β,β -trifluorostyrenes" Tetrahedron Letters 43(2002), pp. 2731-2733
- [147] Paparatto, G. "Method for the synthesis of iodobenzene" Europäisches Patent EP 183579 A1 - eingereicht Oktober 1985, erteilt Juni 1986
- [148] Streitwieser, A., Heathcock C.H. und Kosower, E.M. "Organische Chemie" 2. Auflage 1994
- [149] Stone, C., Steck, A.E. und Lousenberg R.D. "Substituted trifluorostyrene monomeric compositions" United States Patent Nr. 5,684,192 von Ballard Power Systems Inc. - eingereicht Dezember 1995, erteilt November 1997
- [150] Marhold, A. und Klauke, E. "Process for the preparation of aromatic trifluoromethyl compounds" United States Patent Nr. 4,533,777 von der Bayer AG - eingereicht August 1979, erteilt August 1985
- [151] Inoue, F., Katsuhara, Y. und Okazaki, K. "Process of preparing Metachlorobenzotrifluoride" United States Patent Nr. 4,691,066 von Central Glass Company - eingereicht März 1985, erteilt September 1987
- [152] Marhold, A. und Klauke, E. "m-Bromo-Benzotrifluorides" United States Patent Nr. 4,155,940 von der Bayer AG - eingereicht Februar 1978, erteilt Mai 1979
- [153] Christen, H.R. "Organische Chemie - von den Grundlagen zur Forschung" 1. Auflage 1988
- [154] Sorrell, T.N. "Organic Chemistry" 1999
- [155] Taylor, E.C. und McKillop, A. "Thallic trifluoroacetate and process" United States Patent Nr. 3,594,395 von Smith Kline & French Laboratories - eingereicht Januar 1969, erteilt Juli 1971
- [156] Chambers, R.D. et al. "Halogenation reactions" United States Patent Nr. 5,734,073 von BNFL Fluorochemicals Ltd. - eingereicht Juli 1995, erteilt März 1998
- [157] Böckmann, W., Hornung, R. "Verfahren zur kontinuierlichen Herstellung von Benzotrichlorid mit geringem Benzalchloridgehalt durch Chlorierung von Toluol" Offenlegungsschrift DE 2227337 von der Bayer AG - eingereicht Juni 1972, erteilt Januar 1974
- [158] Nakagawa, T., Hiramatsu, U. und Honda, T. "Process for preparing benzotrifluoride and its derivatives" United States Patent Nr. 4,393,257 von Daikin Kogyo - eingereicht Juni 1979, erteilt Juli 1983
- [159] Stone, C., Steck, A.E. und Wei, J. "Trifluorostyrene and substituted trifluorostyrene copolymeric compositions and ion-exchange membranes formed therefrom" United States Patent Nr. 5,773,480 von Ballard Power Systems Inc. - eingereicht Dezember 1996, erteilt Juni 1998
- [160] Corella, J.A. "Method of preparation of alkali-metal amides" United States Patent Nr. 6,169,203 von Mine Safety Appliances Company - eingereicht Februar 1998, erteilt Januar 2001
- [161] Morrison, R.C., Hall, R.W. und Rathman, T.L. "Stable lithium diisopropylamide and method of preparation" United States Patent Nr. 4,595,779 von der Lithium Corporation of America - eingereicht Dezember 1984, erteilt Juni 1986
- [162] persönliche Mitteilung von Donald J. Burton, Email vom 24. Februar 2003
- [163] Rose, J.B. und Staniland, P.A. "Thermoplastic aromatic polyetherketones" United States Patent Nr. 4,320,224 von Imperial Chemical Industries Limited (ICI) - eingereicht Oktober 1978, erteilt März 1982

- [164] Staniland, P., Gilbert, A.H. und Henderson, I.R.M. "Production and/or handling of aryl polyethers and thioethers polymers" United States Patent Nr. 5,051,495 von Imperial Chemical Industries plc - eingereicht Mai 1988, erteilt September 1991
- [165] Bowden R.D., Burgess, L. und Clark, R.J. "Preparation of aromatic fluoro-compounds" United States Patent Nr. 4,263,458 von Imperial Chemical Industries Limited - eingereicht 1979, erteilt April 1981
- [166] Hollemann, A.F. und Wiberg E. "Lehrbuch der Anorganischen Chemie" 101. Auflage 1995
- [167] Clark, J.H. und Adams, D. "Process for preparation of aromatic compounds" United States Patent Nr. 6,274,770 von Victrex Manufacturing Limited - eingereicht März 1998, erteilt August 2001
- [168] Aigueperse, J. "Fluorine Compounds, Inorganic - 1.1.2. Aqueous solutions" in: ibid 125
- [169] Shibuya, N. und Porter, R.S. "A kinetic study of PEEK sulfonation in concentrated sulfuric acid by ultraviolet-visible spectroscopy" Polymer 35(15), pp. 3237-3242
- [170] Müller, H. "Sulfuric acid and sulfur trioxide - 2. Properties" in: ibid 125
- [171] Aigueperse, J. "Fluorine Compounds, Inorganic - 1.3.3 Corrosion resistant materials" in: ibid 125
- [172] Maki, H. "Process for the production of an aromatic hydrazo compound" United States Patent Nr. 5,808,154 von Toyo Ink Manufacturing - eingereicht Juli 1992, erteilt September 1998
- [173] N.N. "3,3'-Dichlorobenzidine chemical backgrounder" US National Safety Council, www.nsc.org/library/chemical/33dichlo.htm
- [174] Vorwerk, E. "Process for the production of pure 3,3',4,4'-Tetraaminobiphenyl" United States Patent Nr. 5,235,105 von der Hoechst AG - eingereicht Juli 1992, erteilt August 1993
- [175] Chenevey, E.C., Druin, M.L. und Oringer, K. "Synthesis of 3,3'-Diaminobenzidine from 3,3'-Dichlorobenzidine" United States Patent Nr. 3,865,876 von Celanese Corporation - eingereicht Oktober 1969, erteilt Februar 1975
- [176] Cawse, J.N. "Process for the production of substantially monoester-free diaryl esters of aromatic dicarboxylic acids" United States Patent Nr. 4,737,569 von General Electric Company - eingereicht Dezember 1986, erteilt April 1988
- [177] Jordan, W. et al. "Phenol - 2. Physical properties" in: ibid 125
- [178] Calundann, G. et al. "Protonenleitende Membran und deren Verwendung" Offenlegungsschrift DE 10117687A1 von Celanese Ventures - eingereicht April 2001, erteilt Oktober 2002
- [179] persönliche Mitteilung Dr. Wagner, Telefonat am 1. Dezember 2003
- [180] Gilliat, B.S. und Mesland, J-M. "The European chloro-alkali industry - On the move towards sustainable development" Monografie von Eurochlor (www.eurochlor.org), Januar 2002
- [181] Tindemans, L. "Council directive of 22 march 1982 on limit values and quality objectives for mercury discharges by the chloro-alkali electrolysis industry" Official Journal of the European communities Nr. L 81/29, 27.3.1982
- [182] Zwicker, R. "Kosten- und Leistungsrechnung im Werkzeug- und Formenbau" in: "VDWF aktuell" Fach- und Informationsmagazin des Verbandes Deutscher Werkzeug- und Formenbauer e.V., Nov. 2001
- [183] N.N. "Gross Domestic Product: implicit price deflator" Economic Research Division, Federal Reserve Bank of St. Louis, <http://research.stlouisfed.org>

DANKSAGUNG

Die vorliegende Dissertation ist während meiner Tätigkeit am Institut für Energieverfahrenstechnik (IWW 3) des Forschungszentrums Jülich entstanden, dem ich für finanzielle Unterstützung sowie hervorragende Arbeitsbedingungen dankbar bin.

Ich danke Herrn Prof. Dr.-Ing. Detlef Stolten, dem Direktor des IWW 3, für die Idee zu dem Promotionsthema sowie die fachlich wie methodisch exzellente Betreuung meiner Arbeit als Doktorvater.

Bei Herrn Prof. Dr. rer. pol. Georg Erdmann von der Technischen Universität Berlin und Herrn Prof. Dr.-Ing. Thomas Melin von der RWTH Aachen bedanke ich mich für deren Übernahme des Koreferats beziehungsweise des Prüfungsvorsitzes.

Herrn Prof. Dr. Bernd Höhle, dem Leiter der Abteilung für Verfahrens- und Systemanalyse (VSA), gilt mein außerordentlicher Dank. Er war in Fragen fachlicher, methodischer oder administrativer Art immer ansprechbar und stand mir mit konstruktiven Lösungsvorschlägen zur Seite. Seine Begabung zur Motivation anderer und das Vertrauen in die Fähigkeiten seiner Mitarbeiter haben sicherlich auch zum Gelingen meiner Arbeit beigetragen.

Die freundliche und hilfsbereite Arbeitsatmosphäre am IWW 3 im Allgemeinen sowie der Abteilung VSA im Besonderen hat mich immer wieder neu inspiriert und motiviert. Ich danke allen, die dazu beigetragen und mich unterstützt haben. Dabei möchte ich folgende Personen nicht unerwähnt lassen :

Mein Abteilungskollege Dipl.-Ing. Dipl. Wirt.-Ing. Thomas Grube ist mir bei der Bearbeitung der verschiedensten Fragestellungen immer ein kompetenter, kooperativer und zuverlässiger Partner gewesen. Hierfür gilt ihm mein besonderer Dank.

Frau Denise Kalkreuth hat technische Informationen zur Herstellung von Membran-Elektroden-Einheiten bereitgestellt, die eine entsprechende ökonomische Planungsrechnung erst möglich machten.

Dr. Peter Biedermann, Dr. Ahmet Lokurlu, Dr. Ernst Riensche und Dipl.-Ing. Reinhard Menzer werden mir als erfahrene und stets hilfsbereite Kollegen in Erinnerung bleiben.

Die gemeinsame Zeit mit meinen Promotionskollegen Ackmann, Bewer, Finkenrath, Montel, Nölke, Stalling, Wedershoven und Wüster bedeutete stets ein nettes Zusammensein mit der Möglichkeit zu informellen Gesprächen fachlicher wie privater Natur.

Nicht zu vergessen sind abschließend auch Mitarbeiter verschiedener Industrieunternehmen, die an der Weiterentwicklung der Brennstoffzellentechnologie arbeiten und für meine Arbeit wichtige Hinweise zu Aspekten der praktischen Umsetzung gegeben haben.

1. **Fusion Theory**
Proceedings of the Seventh European Fusion Theory Conference
edited by A. Rogister (1998); X, 306 pages
ISBN: 3-89336-219-3
2. **Radioactive Waste Products 1997**
Proceedings of the 3rd International Seminar on Radioactive Waste Products
held in Würzburg (Germany) from 23 to 26 June 1997
edited by R. Odoj, J. Baier, P. Brennecke et al. (1998), XXIV, 506 pages
ISBN: 3-89336-225-8
3. **Energieforschung 1998**
Vorlesungsmanuskripte des 4. Ferienkurs „Energieforschung“
vom 20. bis 26. September 1998 im Congressentrum Rolduc und
im Forschungszentrum Jülich
herausgegeben von J.-Fr. Hake, W. Kuckshinrichs, K. Kugeler u. a. (1998),
500 Seiten
ISBN: 3-89336-226-6
4. **Materials for Advances Power Engineering 1998**
Abstracts of the 6th Liège Conference
edited by J. Lecomte-Beckers, F. Schubert, P. J. Ennis (1998), 184 pages
ISBN: 3-89336-227-4
5. **Materials for Advances Power Engineering 1998**
Proceedings of the 6th Liège Conference
edited by J. Lecomte-Beckers, F. Schubert, P. J. Ennis (1998),
Part I XXIV, 646, X pages; Part II XXIV, 567, X pages; Part III XXIV, 623, X
pages
ISBN: 3-89336-228-2
6. **Schule und Energie**
1. Seminar Energiesparen, Solarenergie, Windenergie. Jülich, 03. und
04.06.1998
herausgegeben von P. Mann, W. Welz, D. Brandt, B. Holz (1998), 112 Seiten
ISBN: 3-89336-231-2

7. **Energieforschung**
Vorlesungsmanuskripte des 3. Ferienkurses „Energieforschung“
vom 22. bis 30. September 1997 im Forschungszentrum Jülich
herausgegeben von J.-Fr. Hake, W. Kuckshinrichs, K. Kugeler u. a. (1997),
505 Seiten
ISBN: 3-89336-211-8
8. **Liberalisierung des Energiemarktes**
Vortragsmanuskripte des 5. Ferienkurs „Energieforschung“
vom 27. September bis 1. Oktober 1999 im Congressentrum Rolduc und
im Forschungszentrum Jülich
herausgegeben von J.-Fr. Hake, A. Kraft, K. Kugeler u. a. (1999), 350 Seiten
ISBN: 3-89336-248-7
9. **Models and Criteria for Prediction of Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Hydrogen-Air-Steam-Systems under Severe Accident Conditions**
edited by R. Klein, W. Rehm (2000), 178 pages
ISBN: 3-89336-258-4
10. **High Temperature Materials Chemistry**
Abstracts of the 10th International IUPAC Conference, April 10 - 14 2000, Jülich
edited by K. Hilpert, F. W. Froben, L. Singheiser (2000), 292 pages
ISBN: 3-89336-259-2
11. **Investigation of the Effectiveness of Innovative Passive Safety Systems for Boiling Water Reactors**
edited by E. F. Hicken, K. Verfondern (2000), X, 287 pages
ISBN: 3-89336-263-0
12. **Zukunft unserer Energieversorgung**
Vortragsmanuskripte des 6. Ferienkurs „Energieforschung“
vom 18. September bis 22. September 2000 im Congressentrum Rolduc und
im Forschungszentrum Jülich
herausgegeben von J.-Fr. Hake, S. Vögele, K. Kugeler u. a. (2000),
IV, 298 Seiten
ISBN: 3-89336-268-1

13. **Implementing Agreement 026**
For a programme of research, development and demonstration on advances fuel cells
Fuel Cell Systems for Transportation
Annex X. Final Report 1997 - 1999
edited by B. Höhle; compiled by P. Biedermann (2000), 206 pages
ISBN: 3-89336-275-4
14. **Vorgespannte Guß-Druckbehälter (VGD) als berstsichere Druckbehälter für innovative Anwendungen in der Kerntechnik**
Prestressed Cast Iron Pressure Vessels as Burst-Proof Pressure Vessels for Innovative Nuclear Applications
von W. Fröhling, D. Bounin, W. Steinwarz u. a. (2000) XIII, 223 Seiten
ISBN: 3-89336-276-2
15. **High Temperature Materials Chemistry**
Proceedings of the 10th International IUPAC Conference
held from 10 to 14 April 2000 at the Forschungszentrum Jülich, Germany
Part I and II
edited by K. Hilpert, F. W. Froben, L. Singheiser (2000), xvi, 778, VII pages
ISBN: 3-89336-259-2
16. **Technische Auslegungskriterien und Kostendeterminanten von SOFC- und PEMFC-Systemen in ausgewählten Wohn- und Hotelobjekten**
von S. König (2001), XII, 194 Seiten
ISBN: 3-89336-284-3
17. **Systemvergleich: Einsatz von Brennstoffzellen in Straßenfahrzeugen**
von P. Biedermann, K. U. Birnbaum, Th. Grube u. a. (2001), 185 Seiten
ISBN: 3-89336-285-1
18. **Energie und Mobilität**
Vorlesungsmanuskripte des 7. Ferienkurs „Energieforschung“
vom 24. September bis 28. September 2001 im Congresszentrum Rolduc und im Forschungszentrum Jülich
herausgegeben von J.-Fr. Hake, J. Linßen, W. Pfaffenberger u. a. (2001), 205 Seiten
ISBN: 3-89336-291-6
19. **Brennstoffzellensysteme für mobile Anwendungen**
von P. Biedermann, K. U. Birnbaum, Th. Grube u. a. (2002)
PDF-Datei auf CD
ISBN: 3-89336-310-6

20. **Materials for Advances Power Engineering 2002**
Abstracts of the 7th Liège Conference
edited by J. Lecomte-Beckers, M. Carton, F. Schubert, P. J. Ennis (2002),
c. 200 pages
ISBN: 3-89336-311-4

21. **Materials for Advances Power Engineering 2002**
Proceedings of the 7th Liège Conference
Part I, II and III
edited by J. Lecomte-Beckers, M. Carton, F. Schubert, P. J. Ennis (2002),
XXIV, 1814, XII pages
ISBN: 3-89336-312-2

22. **Erneuerbare Energien: Ein Weg zu einer Nachhaltigen Entwicklung?**
Vorlesungsmanuskripte des 8. Ferienkurs „Energieforschung“
vom 23. bis 27. September 2002 in der Jakob-Kaiser-Stiftung, Königswinter
herausgegeben von J.-Fr. Hake, R. Eich, W. Pfaffenberger u. a. (2002),
IV, 230 Seiten
ISBN: 3-89336-313-0

23. **Einsparpotenziale bei der Energieversorgung von Wohngebäuden durch
Informationstechnologien**
von A. Kraft (2002), XII, 213 Seiten
ISBN: 3-89336-315-7

24. **Energieforschung in Deutschland**
Aktueller Entwicklungsstand und Potentiale ausgewählter nichtnuklearer
Energietechniken
herausgegeben von M. Sachse, S. Semke u. a. (2002), II, 158 Seiten,
zahlreiche farb. Abb.
ISBN: 3-89336-317-3

25. **Lebensdaueranalysen von Kraftwerken der deutschen Elektrizitäts-
wirtschaft**
von A. Nollen (2003), ca. 190 Seiten
ISBN: 3-89336-322-X

26. **Technical Session: Fuel Cell Systems of the World Renewable Energy
Congress VII**
Proceedings
edited by D. Stolten and B. Emonts (2003), VI, 248 pages
ISBN: 3-89336-332-7

27. **Radioactive Waste Products 2002 (RADWAP 2002)**
Proceedings
edited by R. Odoj, J. Baier, P. Brennecke and K. Kühn (2003), VI, 420 pages
ISBN: 3-89336-335-1

28. **Methanol als Energieträger**
von B. Höhle, T. Grube, P. Biedermann u. a. (2003), XI, 109 Seiten
ISBN: 3-89336-338-6

29. **Hochselektive Extraktionssysteme auf Basis der Dithiophosphinsäuren:
Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Actinoiden(III)-
Abtrennung**
von S. A. H. Nabet (2004), VI, 198 Seiten
ISBN: 3-89336-351-3

30. **Benchmarking-Methodik für Komponenten in Polymerelektrolyt-Brenn-
stoffzellen**
von Matthias Gebert (2004), 194 Seiten
ISBN: 3-89336-355-6

Für die Brennstoffzellen-Technologie ist die Erreichbarkeit vorgegebener Kostenziele neben Aspekten der Lebensdauer, des Wirkungsgrades und der Umweltverträglichkeit mit die wichtigste Fragestellung. Dieses Buch beschreibt daher ein techno-ökonomisches Kostenmodell für die in PEFC-Stacks der kW-Klasse enthaltenen Bauteile. Die neue Analyseverfahren findet Anwendung auf das Spritzgießen von Compositplatten zur Herstellung von Bipolarelementen und auf die Synthese verschiedener Ionomer-Membranen.

Autor:

Matthias Gebert hat an der TH Karlsruhe Chemieingenieurtechnik studiert, wobei er 10 Monate an der französischen Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris in Sophia Antipolis tätig war. Am Forschungszentrum Jülich begann er im Jahr 2001 systemanalytische Arbeiten zur Kostenuntersuchung der Produktion von PEFC-Komponenten. Der Inhalt dieses Buches wurde von der RWTH Aachen als Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften genehmigt.

Institut:

Die Forschungsaufgaben des Instituts für Energieverfahrenstechnik (IWW-3) sind auf die Realisierung von Hoch- und Niedertemperatur-Brennstoffzellen sowie von entsprechenden Stacks oder Systemen für stationäre, portable oder mobile Anwendungen ausgerichtet. Ferner umfassen die verfahrens- und systemtechnischen Entwicklungen die Bereitstellung von Apparaten zur Brenngaserzeugung. Diese Arbeiten werden von physikalisch-chemischen Grundlagenuntersuchungen sowie systemanalytischen Studien der Energieverfahrenstechnik begleitet.

Forschungszentrum Jülich
in der Helmholtz-Gemeinschaft



Band/Volume 30
ISBN 3-89336-355-6

Energietechnik
Energy Technology