

## Pressemitteilung

Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI

Dipl.-Journalist (TU Dortmund) Michael Krapp

10.02.2020

<http://idw-online.de/de/news731292>



Forschungs- / Wissenstransfer, Forschungsprojekte  
Chemie, Energie, Informationstechnik, Mathematik, Umwelt / Ökologie  
überregional

## »SONAR« entwickelt neue Methode zur Suche nach elektroaktiven Substanzen für organische Redox-Flow-Batterien

Um erneuerbare Energiequellen wie Solarzellen (Photovoltaik) und Windturbinen effektiv zu nutzen, braucht man große Energiespeichersysteme, die Schwankungen in der Energieerzeugung ausgleichen. Redox-Flow-Batterien (RFBs) gelten dabei als eine vielversprechende Lösung. RFBs sind chemische Energiespeicher, die die gesammelte Energie mit einem hohen Wirkungsgrad auch wieder abgeben, indem Elektronen zwischen den chemischen Reaktanten über einen elektrischen Leiter ausgetauscht werden. Die große Bandbreite an elektroaktiven Substanzen – von denen viele in der Natur vorkommen – bedeutet, dass noch eine Vielzahl an potenziellen Systemen zu erforschen ist.

Das von der EU geförderte Projekt SONAR, das vom Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie ICT in Pfinztal koordiniert wird, will mit Hilfe physikalischer sowie datenbasierter Modelle gezielt gut geeignete Substanzen identifizieren.

Die größte Herausforderung besteht darin, die Tauglichkeit auf allen Ebenen sicherzustellen. Eine Substanz kann zwar – für sich betrachtet – hervorragende Eigenschaften haben, aber das Zusammenwirken zwischen den Materialien, dem Batteriedesign und der Funktionsweise ist sehr komplex. Auch wirtschaftliche Überlegungen können dazu führen, dass elektroaktive Substanzen für industrielle Anwendungen ungeeignet sind. SONAR wird Modelle auf mehreren Skalen integrieren, von der atomistischen Skala bis hin zum Batteriesystem. Um die großen Datenmengen, die sich aus den Computersimulationen von Materialien und Redox-Flow-Zellen ergeben, zu verarbeiten, nutzt das Projekt statistische Methoden, Datenanalyse und maschinelle Lern-Verfahren. Die berechneten Ergebnisse werden in jeder Phase mit experimentellen Messungen verglichen.

Das Endergebnis wird ein neuartiger mehrstufiger Screening-Service für organische Redox-Flow-Batterien sein, der aussagekräftige Vergleiche zwischen konkurrierenden organischen RFB-Systemen in Bezug auf Kosten, Lebensdauer und Leistung (so genannte „levelized cost of storage“) ermöglicht.

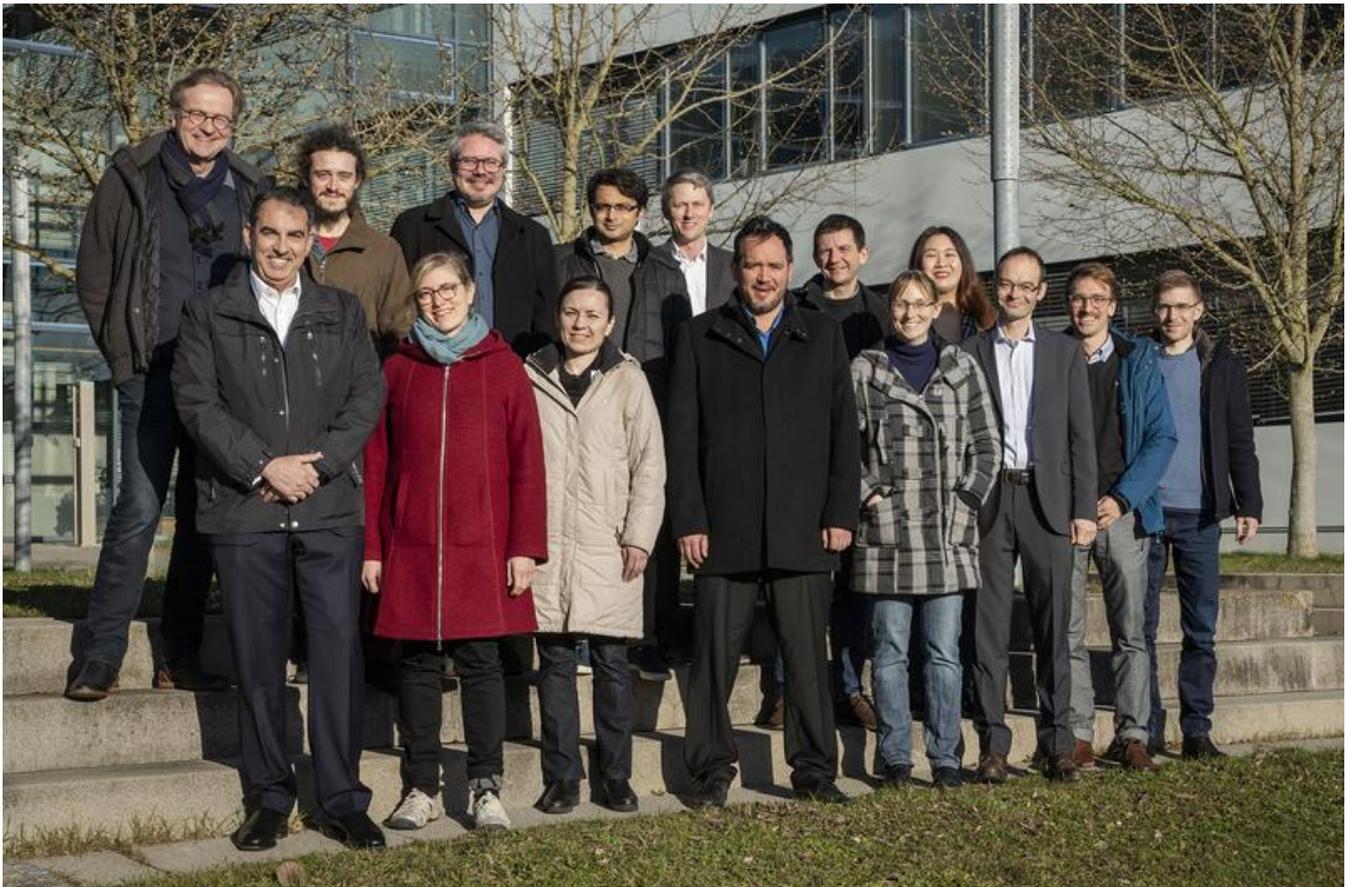
Die Projektpartner sind Experten für die Modellierung elektrochemischer Zellen auf allen Skalen. Dazu gehören das Fraunhofer-Institut ICT mit dem Standort der größten Redox-Flow-Batterie Europas, das Fraunhofer-Institut SCAI, die Abteilung für Energiewandlung und -speicherung der DTU in Dänemark, die LCRS der Universität de Picardie Jules Verne und des CNRS in Frankreich, die Zürcher Hochschule für Angewandte Wissenschaften, das Karlsruher Institut für Technologie und die australische Universität von New South Wales als Erfinder der heute am häufigsten verwendeten Vanadium-RFB. Die Partner arbeiten eng mit fünf assoziierten Industrieunternehmen zusammen. Das von der EU im Programm Horizon 2020 unter Grant Agreement Nr. 875489 geförderte Projekt startete am 1. Januar 2020 und läuft vier Jahre.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Dr. Jan Hamaekers

Leiter des Geschäftsfelds Virtual Material Design  
Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI  
53754 Sankt Augustin  
E-Mail: [jan.hamaekers@scai.fraunhofer.de](mailto:jan.hamaekers@scai.fraunhofer.de)  
<https://www.scai.fraunhofer.de/vmd>

URL zur Pressemitteilung: <https://www.sonar-redox.eu>



Teilnehmerinnen und Teilnehmer der Kick-off-Veranstaltung zum Projekt SONAR.  
@ Fraunhofer ICT