

Hannover, 30.03.2026

**Verbundvorhaben H2Giga\_QT1.4\_HyThroughGen: Beschleunigung der  
Entwicklungszyklen für die Wasserelektrolyse mit saurer  
Festelektrolytmembran durch Hochdurchsatzverfahren**

**Teilprojekt LUH: Entwicklung eines Hochdurchsatzverfahrens zur Bewertung  
einer großen Anzahl von technischen Vollzellen**

**Sachbericht zum Verwendungsnachweis - Teil II: Eingehende Darstellung**

---

Stand:	30.03.2026
Einreichungsdatum TIB (Teil I+II):	30.03.2026
Partnerin/Partner:	Leibniz Universität Hannover
Autorinnen/Autoren:	Richard Hanke-Rauschenbach, Boris Bensmann, Alexander Rex
Fördertitel:	QT1.4 HyThroughGen: – Teilprojekt LUH
Laufzeit:	01.04.2021 bis 30.09.2025
Förderkennzeichen:	03HY108C
Disclaimer:	Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

---

Gefördert durch:



Bundesministerium  
für Forschung, Technologie  
und Raumfahrt



Finanziert von der  
Europäischen Union  
NextGenerationEU

## Teil II. Eingehende Darstellung (wird veröffentlicht)

### 1. Eingehende Darstellung der durchgeführten Arbeiten und Ergebnisse

Das Projekt hatte zum Ziel, die langwierigen, sequenziellen Entwicklungs- und Bewertungsprozesse für Materialien und Komponenten der PEM-Wasserelektrolyse (PEMWE) grundlegend zu beschleunigen und damit belastbare Eignungsentscheidungen deutlich früher zu ermöglichen. Ausgangspunkt war die Beobachtung, dass der technologische Fortschritt in der PEMWE, trotz hoher Relevanz für die Energiewende, weniger an fehlenden Konzepten scheitert als an limitierter Testkapazität und einer klassischen Abfolge von Prozessschritten: Auf Materialsynthese und erste Materialtests folgen typischerweise Komponentenherstellung und erst danach die zeit- und ressourcenintensiven Vollzelltests. Gerade die Vollzelle bildet jedoch die entscheidende Referenz, weil sich erst dort das Zusammenspiel von Material, Komponente und Betriebsbedingungen validieren lässt. Die etablierte Entwicklungskette erzeugt daher zwei Verlustmechanismen: ressourcenbedingten Ausschuss, wenn vielversprechende Kandidaten aufgrund knapper Teststände verzögert oder gar nicht in belastbare Prüfungen gelangen, sowie wissenschaftlichen Ausschuss, wenn Ansätze mangels ausreichender oder rechtzeitig verfügbarer Daten voreilig verworfen werden. HyThroughGen adressierte diese Engpässe durch den Aufbau einer integrierten Hochdurchsatz-Entwicklungskette, die Screening, Selektion und Validierung eng koppelt und Materialtests, Komponentenherstellung sowie Performance- und Alterungsbewertung als parallelisierbaren Gesamtprozess versteht. Damit sollte die Zahl systematisch untersuchbarer Varianten entlang der gesamten Kette signifikant erhöht und der Zeithorizont bis zur belastbaren Eignungsbewertung von typischerweise rund zehn Jahren auf etwa zwei bis drei Jahre reduziert werden. Inhaltlich wurde das Verbundvorhaben entsprechend in vier Teilprojekte strukturiert; von der Herstellung variiertes Materialbibliotheken (TP1) über Komponentenbibliotheken und Prozessierungsoptimierung (TP2) bis hin zu hochdurchsatzfähigen Performance- (TP3) und Alterungstests (TP4). Durch erhöhte Testkapazitäten, standardisierte Bewertungsprotokolle und datenbasierte Auswertung sollten geeignete Kandidaten frühzeitig identifiziert, Vollzelltests gezielt zur Validierung eingesetzt und Iterationsschleifen deutlich verkürzt werden.

Die Rolle der LUH (FKZ: 03HY108C) im Projekt HyThroughGen ist in die drei bereits oben genannten Hauptbereiche zu unterteilen. Diese werden nun im Folgenden den einzelnen Arbeitspaketen zugeordnet und anschließend beschrieben. Auf Grund der Größe des Verbundprojekts, ist das Projekt in Teilprojekte untergliedert. Diese tauchen daher in der folgenden Gruppierung ebenfalls auf. Die LUH war vor allem in TP3 (übergeordnetes Thema Performanz) und TP4 (übergeordnetes Thema Alterung) beteiligt. Die Arbeitspakete sind nach Projektpartnern vergeben, der LUH ist jeweils AP3 zugeordnet.

Die Entwicklung und der Aufbau der Teststände für HyThroughGen (i)) erfolgte in (TP3.AP3.2.1). Die Weiterentwicklung der Charakterisierungsmethoden inkl. der Modellierung und der Auswertung (ii)) war Inhalt von TP3.AP3.2.2-3.2.5. Die Alterungsuntersuchungen in TP4 untergliederten sich ebenfalls in die Bestandteile Entwicklung von Protokollen, unterstützende Modellierung und Automatisierung (TP4.AP3.2.1-3.2.3) sowie die Durchführung von Langzeittests (TP4.AP3.2.4). Zudem gab es übergeordnetes TP0, das hier nachfolgend zuerst beschrieben wird.

#### Zugehörig TP 0 (Management, Zusammenarbeit H2Giga, Verwertung)

Innerhalb dieses Teilprojekts standen der fachliche Austausch über die H2Giga-Plattform und mit weiteren Projekten aus dem Innovationspool sowie die Verwertung der erzielten Ergebnisse in Publikationen und auf Konferenzen im Vordergrund.

Die LUH beteiligte sich hierzu an den H2Giga-Arbeitsgruppen, solange diese aktiv waren. Dazu zählten die Arbeitsgruppe 2 „in-situ Qualitätskontrollen und ex-situ Messmethoden“, die Arbeitsgruppe 3 „Handling von MEA- oder Stack-Komponenten“, die Diskussionsplattform „Testung und Normung“ sowie der Innovationspool Cluster 2.1 „Lebensdauer und Zelltests“.

Zudem gab es guten Austausch mit einigen anderen Forschungsprojekten. Ein sehr konstruktiver Bestandteil des Austauschs war die Zusammenarbeit mit dem Projekt Deriel (FKZ: 03HY122G). Der Schwerpunkt lag auf der experimentellen Untersuchung und modelltheoretischen Betrachtung reversibler und irreversibler Beiträge der Performanceentwicklung sowie auf deren Bedeutung für belastbare Aussagen zur Degradation. Die hieraus gewonnenen Erkenntnisse bildeten eine wesentliche Grundlage für weiterführende Untersuchungen zu diesem Themenfeld im Rahmen des Vorhabens.

Darüber hinaus wurden Synergien mit dem Projekt Evolver (FKZ: 03SF0765) genutzt. In Richtung HyThroughGen wurden Proben für Zelltests mit Gasrekombinationslage bereitgestellt, um Besonderheiten dieser Tests zu untersuchen. Für Evolver wiederum konnten wichtige Langzeittests auf der Infrastruktur durchgeführt werden.

Ergänzend fanden Zusammenarbeiten im Kontext des H2Mare zugehörigen Verbunds H2Wind (FKZ: 03HY301H) statt. Diese erfolgten gemeinsam mit dem Institut für Solarenergieforschung GmbH, dem Institut für Technische Chemie und Polymerchemie am Karlsruher Institut für Technologie sowie dem Institut für Entwerfen und Konstruieren der Leibniz Universität Hannover, jeweils mit Bezug zur Alterungsuntersuchung des Elektrolysesystems.

Darüber hinaus wurden zwei neue Kooperationspartnerschaften aufgebaut. Die Technische Universität Wien mit dem Institut für Chemische Technologien und Analytik wurde als Kooperationspartner für die im nächsten Berichtsjahr geplanten Synchrotron-basierten Röntgenfluoreszenz-Messungen (X-ray fluorescence spectroscopy, XRF) einbezogen, um die Elementmigration innerhalb katalysatorbeschichteter Membranen zu untersuchen. Mit der Energy Conversion Group des Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Kalifornien, USA, bestand eine intensive Zusammenarbeit zur reversiblen Leistungsdynamik, aus der gemeinsame Analysen im Kontext der Umgebungsdruck-Röntgenphotoelektronenspektroskopie (atmospheric pressure X-ray photoelectron spectroscopy, AP-XPS) hervorgingen.

#### Zugehörig TP3: High-Throughput Performancetests

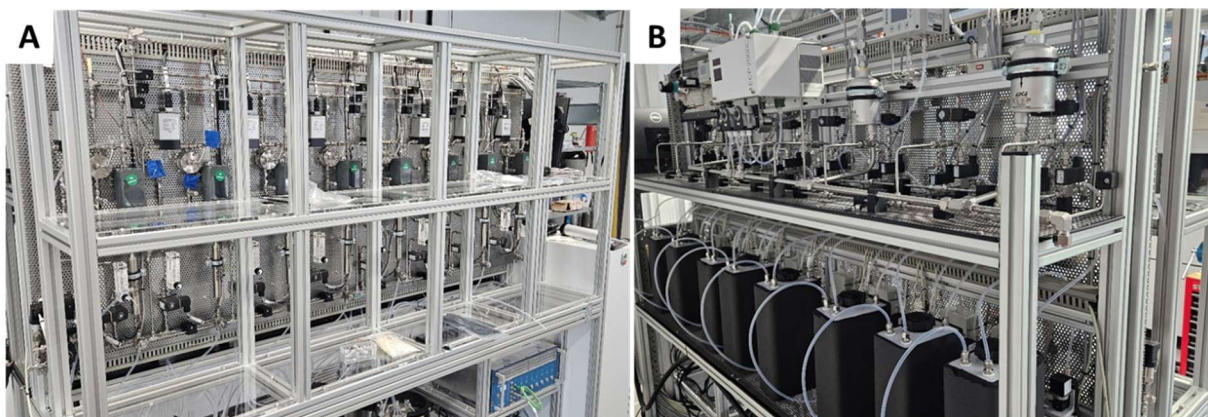
Die wichtigsten Erkenntnisse und Ergebnisse aus TP3 lassen sich wie folgt zusammenfassen: (i) Es ist gelungen, ein vergleichsweise günstiges Teststandkonzept zu entwickeln, das die Anforderungen der Wissenschaft und der Industrie an Genauigkeit und Verlässlichkeit erfüllt und gleichzeitig einen hohen Durchsatz ermöglicht. (ii) Es konnte ein kombiniertes experimentelles und modelltheoretisches Umfeld geschaffen werden, in dem aufwendige Parameterstudien experimentell schneller durchführbar sind und dass die Auswertung der zugehörigen Messdaten sowie deren Interpretation zugleich beschleunigt.

Im Folgenden werden die durchgeführten Tätigkeiten und Ergebnisse den in der Vorhabenbeschreibung formulierten Zielen zugeordnet und entlang der Arbeitspakete beschrieben.

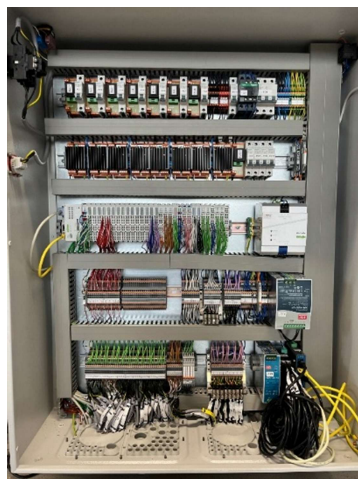
#### AP3.2.1 Infrastrukturaufbau

Der Aufbau der Teststandinfrastruktur war Bestandteil des Projekts und adressierte unmittelbar das Ziel der Mitentwicklung und Bereitstellung von Messkapazitäten auf Zelllevel. In den Laboren sind bislang häufig Einzelteststände vorhanden, entweder als kommerzielle Systeme oder als einfache Eigenbauten, oftmals ohne umfassende Automatisierung. Für Hochdurchsatztests sind kommerzielle Einzelzellteststände in der Regel nicht ausgelegt, da Wiederholungen und Parametervariationen nur eingeschränkt möglich sind. Zudem hat die Forschung der letzten Jahre gezeigt, dass Tests unter 100 h, teilweise auch darüber hinaus, für einen Vergleich zwischen unterschiedlichen Materialsystemen nur eingeschränkt geeignet sind, da Einfahrprozesse die Vergleichbarkeit beeinflussen. Die daraus resultierende Notwendigkeit längerer Tests erfordert neue Teststandkonzepte, damit Langzeitmessungen nicht Teststände blockieren und andere Messprogramme behindern.

Da ein entsprechender Teststand nicht industriell zu erwerben war und eine gemeinsame Entwicklung eines geeigneten Teststandkonzepts zusammen mit der Industrie nicht möglich war, fiel die Entscheidung, den Teststand selbst zu planen und aufzubauen. Hieraus ist ein 8-Kanal-Teststandskonzept entstanden, das insgesamt dreimal aufgebaut wurde und somit 24 Messkanäle realisiert. Abbildung 3 zeigt die Stellplätze für die Testzellen im 8-Kanal-Teststand. Bzgl. der Leistungsmerkmale wurden die im Projektantrag genannten Zielgrößen erreicht. Der Teststand verfügt über eine Automatisierung, die insbesondere für Langzeittests von besonderer Bedeutung ist und einen 24/7-Betrieb erlaubt (s. Abbildung 4).



**Abbildung 3.** **A** Vorderansicht des 8-Kanal-Teststands mit Messkapazität für acht parallel betriebene Einzelzellen. **B** Rückansicht des 8-Kanal-Teststands mit Peripherie und Medienführung.



**Abbildung 4.** Offener Schaltschrank des 8-Kanal-Teststands (Automatisierungs- und Steuerungskomponenten).

### Fazit zu AP3.2.1.

Im Projekt konnte ein Teststandkonzept entwickelt und aufgebaut werden, das für die Weiterentwicklung der Wasserelektrolyse von großer Bedeutung ist. Es ermöglicht viele gleichzeitige Tests auch längerer Dauer und liefert damit wertvolle Daten. Dies gilt zum einen für Leistungsdaten zur Einschätzung neuer Entwicklungen, zum anderen für Langzeitmessdaten zur Beurteilung der Degradation und Haltbarkeit neuer Materialien. Das Teststandkonzept stößt daher auch auf Interesse bei industriellen Partnern (s. auch Verwertung).

### AP3.2.2 Charakterisierungsverfahren für Hochdurchsatztests

Im Laufe des Projekts wurden zahlreiche Charakterisierungsmethoden genauer untersucht, teilweise im Ablauf verbessert oder auch für konkrete Hochdurchsatzmessungen im Rahmen von Vollzellmessungen als weniger bedeutend bewertet. Insgesamt wurden vier Methoden detailliert untersucht und intern bewertet:

- (i) Polarisationskurven
- (ii) Elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS)
- (iii) Cyclo-Voltammetrie
- (iv) Stromunterbrechungsmethode (Current Interrupt)
- (v) Fremdgasmessungen

**(i) Polarisationskurven.** Im Rahmen des Projekts wurde der interne Standard zur Aufnahme und Auswertung von Polarisationskurven deutlich verbessert, um Messungen reproduzierbar durchzuführen und Ergebnisse zwischen unterschiedlichen Materialsystemen besser vergleichen zu können. Dies betrifft insbesondere die Auswertung der kinetischen Verluste aus der Tafelsteigung. (siehe detaillierte Ausführung unten – Veröffentlichung eingereicht).

Die Polarisationskurve beschreibt die Abhängigkeit der Zellspannung von der Stromdichte. Die gemessene Gesamtzellspannung wird dabei in eine reversible Referenzspannung nach Nernst sowie in Verlustanteile zerlegt. Diese Verlustanteile werden als kinetische Verluste, ohmsche Verluste und residuale Verluste beschrieben. Die residualen Verluste fassen insbesondere Massentransportverluste sowie weitere nicht separat zuordenbare Beiträge zusammen.

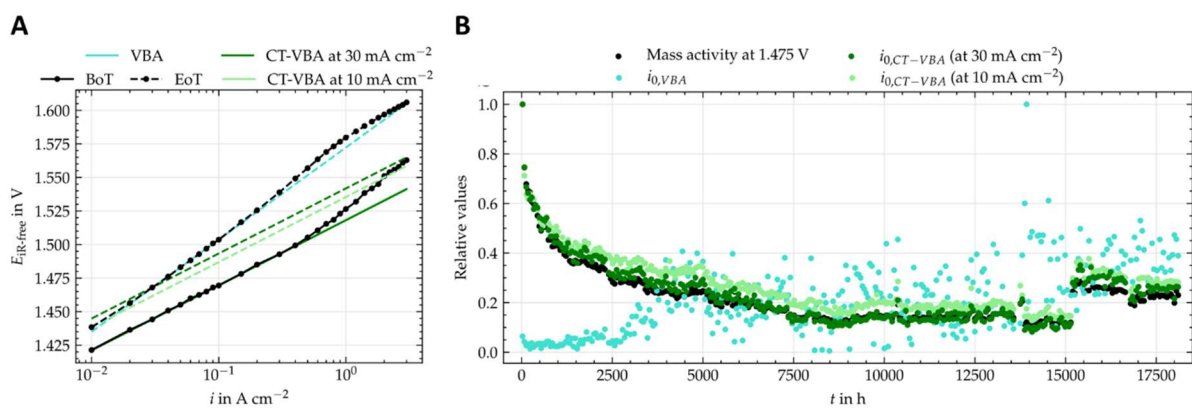
Für die Auswertung wird zunächst die Nernstspannung unter Berücksichtigung der jeweiligen Betriebstemperatur und des Betriebsdrucks berechnet. Anschließend wird eine um den Hochfrequenzwiderstand (HFR) bereinigte Zellspannung bestimmt, indem der HFR aus Messungen der EIS herangezogen wird (s. (ii) folgend) und die Zellspannung entsprechend korrigiert wird. Zur Bestimmung der kinetischen Verluste wird eine Tafelanalyse im kinetisch dominierten Stromdichtebereich von 0,01 bis 0,1 A/cm<sup>2</sup> durchgeführt. Hierzu wird die HFR bereinigte Zellspannung gegen die logarithmisch dargestellte Stromdichte aufgetragen. Ein Standardansatz ist, dass aus der Steigung der Tafelgeraden (Fit an die Daten) die Tafelsteigung bestimmt und aus der linearen Extrapolation (gegen log. Achse) die augenscheinliche Austauschstromdichte abgeleitet wird. Dies ist eigentlich wichtige Größe, da diese ein Maß für die aktive Fläche des Katalysators ist und in Langzeitmessungen Informationen für die Alterung des Katalysators gibt. Schließlich werden dann noch die residualen Verluste bestimmt die sich aus der Differenz zwischen der gemessenen Zellspannung und der Summe aus Nernstspannung, kinetischen und ohmschen Verlusten ergeben.

Allerdings wird dieses Vorgehen in der Wissenschaft aktuell diskutiert und zwischen drei Optionen unterschieden:

- Dem Standardansatz. Aus dem Tafel-Fit werden die Tafelparameter über die komplette Messdauer (sofern Polarisationskurven vorliegen) immer noch bestimmt, Dies sind die Steigung

der Geraden (Tafelsteigung, in mV/dec) und der x-Achsen-Abschnitt (Austauschstromdichte  $i_0$ , A/cm<sup>2</sup>),

- Annahme einer konstanten Tafelsteigung (CT-VBA in der folgenden Abbildung) nach Rogler et al.<sup>1</sup>: Für alle Messungen wird ausgehend vom kleinsten für Tafelanalyse verwendeten Stromdichtewert die Steigung von Polarisationskurve zu Beginn des Tests definiert. Die Austauschstromdichte,  $i_0$ , wird dann zu den jeweiligen Zeitpunkten aus aktuellen Polarisationskurven und dieser einmal definierten Tafelsteigung ermittelt.
- Eine dritte Variante zur Einschätzung der Veränderung der Aktivität des Katalysators ist Massenaktivität bei einer festen Zellspannung zu bestimmen. Diese Zellspannung sollte bei kleinen Stromdichten liegen ( $i < 0.1$  A cm<sup>-2</sup>). Die abgelesene Stromdichte wird normiert auf die Beladung.



**Abbildung 5. A** Vergleich der drei untersuchten Methoden hinsichtlich der Auswirkung auf die Tafelsteigung zu Beginn des Tests (Begin of Test, BoT) und zum Ende des Tests (End of Test, EoT); **B** Relative Änderungen der Massenaktivität und der Austauschstromdichten  $i_0$  der drei unterschiedlichen Methoden.

In Abbildung 5 zeigt das Ergebnis dieser drei Methoden auf eine aktuelle Messung die bereits seit fast 19.000 h läuft (Publikation ist in Vorbereitung). In Abbildung 5 A ist in schwarz die HFR-freie Stromdichte zu Beginn der Messung (BOT) und nach 18.000 h (EOT) zu sehen. In Cyan wurde die konventionelle Methode (VBA) angewendet. Die CT-VBA wurde einmal für die kleinste Stromdichte 10 mA cm<sup>-2</sup> (hellgrün) bzw. die Untergrenze des Fitbereichs für den Tafel-Fit (30 mA cm<sup>-2</sup>, dunkelgrün) angewendet. Interessant zu sehen ist, dass die zweite Methode offensichtlich kein angemessener Fit der EOT-Messdaten ergibt. Zwar liegen BOT alle Varianten übereinander, aber EoT zeigen sich die Unterschiede: Die VBA-Methode scheint zwar den besten Fit zu liefern, allerdings weicht die gesamte Kurve kaum von dieser Fit-Geraden ab. Damit ergeben sich bei hohen  $i$  Residualverluste gegen  $\sim 0$  mV. Zudem ist die Tafelsteigung mit Werten von fast 70 mV dec<sup>-1</sup> unrealistisch hoch. Hingegen passt der CT-VBA-Fit im kleinen Stromdichte-Bereich nicht zum Anstieg der Kurve.

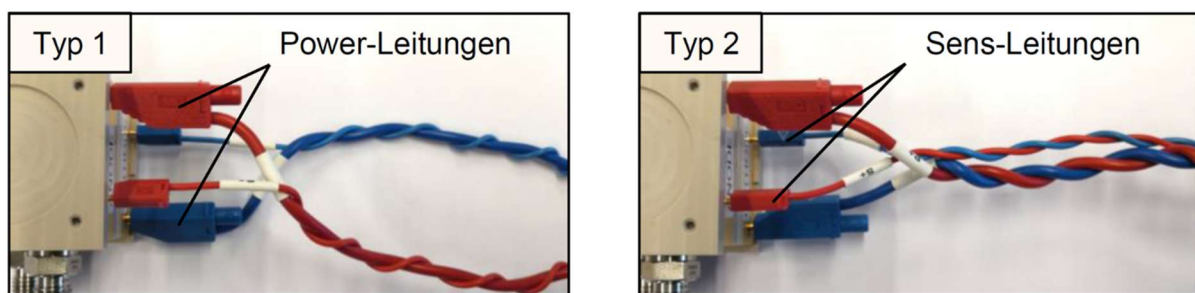
In Abbildung 5 B ist die Änderung der Austauschstromdichte über alle Polarisationskurven mit den drei genannten Methoden durchgeführt worden. Dazu ist die Austauschstromdichte auf den BOT-Wert normiert. Es ist zu erkennen, dass der aus der VBA-Methode ermittelte Wert sehr stark schwankt. Aus der CT-VBA-Methode ergibt sich allerdings ein sehr scharfer Trend sinkender Austauschstromdichten über die Zeit, was einer Verringerung der aktiven Fläche gleichkommen würde, die in gewisser Weise zu erwarten war. Zusätzlich ist hier nun auch die Massenaktivität dargestellt (schwarz). Hierfür wurde die Stromdichte

gewählt, die in der HFR-freien Kennlinie bei 1.475 V abzulesen ist. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Werte sehr am Ergebnis der CT-VBA-Methode liegen.

Daher lässt sich abschließend sagen, dass zur Auswertung vor allem die letzten beiden Methoden anzuwenden sind.

**(ii) Elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS).** Die EIS-Messung wurde im Projekt als ergänzendes Charakterisierungswerkzeug eingesetzt. Im Fokus stand dabei der HFR, da dieser als zentrale Größe zur Beschreibung der ohmschen Verluste dient und direkt in die Auswertung der Polarisationskurven einfließt (s. obigen Abschnitt).

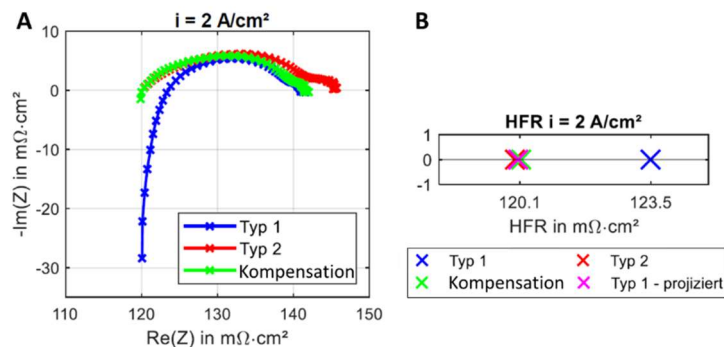
Eine wesentliche Erkenntnis der Untersuchungen war, dass der Messaufbau einen erheblichen Einfluss auf die EIS-Ergebnisse haben kann. Insbesondere die Kabelführung und Verdrahtung der Power- und Sense-Leitungen beeinflusst den Hochfrequenzbereich der Nyquist-Darstellung und damit die Ableitung des HFR. Hierzu wurden zwei Verdrahtungsvarianten verglichen (s. Abbildung 6). Bei Typ 1 treten induktiv geprägte Effekte im Hochfrequenzbereich auf, die die Spektren und die daraus abgeleiteten HFR-Werte beeinflussen. Bei Typ 2 tritt kein induktiv bedingter Nulldurchtritt auf, sodass der HFR nicht über den Realachsen Nulldurchtritt bestimmt werden kann, wenn das Frequenzfenster den Nulldurchtritt nicht erfasst.



**Abbildung 6.** Angewandte Kabelverdrillungstypen: Typ 1: Verdrillung der Sense- und Powerleitung der jeweiligen Elektrode. Typ 2: Verdrillung jeweils der Sense-Leitungen und der Powerleitungen.

Zur Behandlung dieser Effekte wurden zwei Ansätze betrachtet. Einerseits wurde die HFR-Bestimmung für Typ 2 über eine modellgestützte Auswertung der Spektren vorgenommen. Andererseits wurde geprüft, inwieweit induktive Leitungsanteile bei Typ 1 über eine Kompensation auf Basis Vorversuchen ohne Zellaufbau reduziert werden können. Die Vergleichsergebnisse der Nyquist-Diagramme und der HFR-Werte unter Variation der Stromdichte sind in Abbildung 7 A bzw. 7 B dargestellt. Aus den Untersuchungen wurde abgeleitet, dass für eine belastbare und vergleichbare HFR-Bestimmung eine eindeutig definierte Verdrahtung sowie ein konsistenter Auswertungsweg erforderlich sind. Dies ist insbesondere relevant, da der HFR als Eingangsgröße für die Polarisationskurvenauswertung genutzt wird und damit die Einordnung der ohmschen Verluste und die Vergleichbarkeit von Messreihen unmittelbar beeinflusst. Für Hochdurchsatzmessungen ist diese Standardisierung zusätzlich entscheidend, da nur so eine konsistente Vergleichbarkeit zwischen parallel betriebenen Kanälen und über verschiedene Messkampagnen hinweg gewährleistet werden kann. Aufgrund der Wichtigkeit der Messergebnisse

dieser Methode, wird es für sinnvoll erachtet, die elektrochemische Impedanzspektroskopie weiterhin für entsprechende Analysen einzusetzen.



**Abbildung 7. A** Vergleich der Nyquist-Diagramme mit Typ 1-Verdrillung, Typ 2-Verdrillung und Kompensation der Induktivität. **B** Abgeleitete HFR-Werte basierend auf den unterschiedlichen Methodiken. Beide Abbildungen zeigen die Werte für die Stromdichte von  $2 \text{ A/cm}^2$ .

**(iii) Cyclo-Voltammetrie.** Die Cyclo-Voltammetrie ist grundsätzlich eine aufschlussreiche Methode zur Einordnung von Katalysatorsystemen auf der Anode. Sie ermöglicht es, charakteristische Merkmale von Iridium-basierten Systemen, beispielsweise Ir-black, IrO<sub>x</sub> oder IrO<sub>2</sub>, zu erfassen und Übergänge zwischen Oxidationszuständen des Iridiums qualitativ zu bewerten.

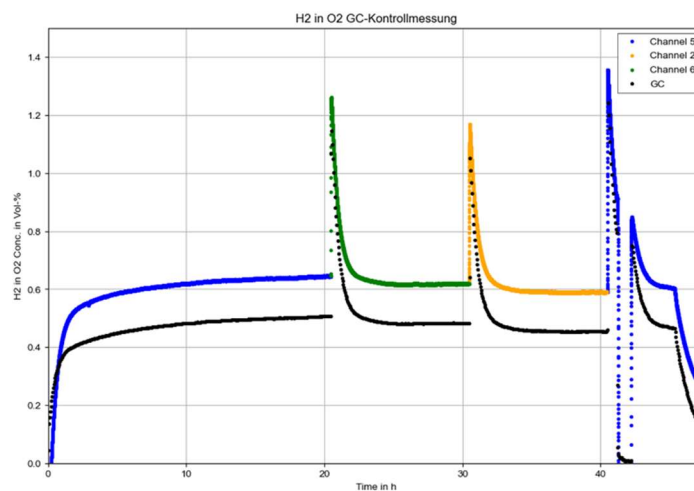
Allerdings kann der während der Methode durchgeführte Potentialbereich von nahe 0 V bis zu 1,5 V das Zellverhalten und insbesondere die Katalysatoreigenschaften über längere Zeithorizonte deutlich beeinflussen. Dieser Effekt ist für die Interpretation von Messreihen relevant und steht im Zusammenhang mit der Einordnung reversibler und irreversibler Beiträge (s. Abschnitt AP3.2.3-AP3.2.5). Da im Rahmen von Alterungsuntersuchungen die Charakterisierung des untersuchten Materialsystems in der Regel nicht verändern soll, wird die Cyclo-Voltammetrie nicht als Standardwerkzeug während einer Alterungsuntersuchung empfohlen. Sie eignet sich vielmehr für gezielte, separat geplante Analysen zur Einordnung von Katalysatorsystemen.

**(iv) Stromunterbrechungsmethode (Current Interrupt).** Die Stromunterbrechungsmethode wurde als ergänzendes Charakterisierungsverfahren eingesetzt, da sie insbesondere bei größeren Zell- bzw. Stack-Formaten eine Alternative darstellt, wenn EIS-basierte Verfahren nur eingeschränkt praktikabel sind. Zur Sicherstellung der Vergleichbarkeit wurde die Methode auch an kleinen Zellen als sinnvoll eingeordnet. Im Projekt wurde ein Vorgehen erarbeitet, bei dem neben dem unmittelbaren Spannungssprung nach der Stromunterbrechung auch die anschließende Spannungsrelaxation für die Auswertung genutzt wird. Das in HyThroughGen mitentwickelte Vorgehen konnte erfolgreich im Projekt Segiwa (FKZ: 03HY121G) angewendet werden und zeigt damit die Eignung der Methode für eine schnelle und vergleichbare Charakterisierung in unterschiedlichen Testumgebungen.

**(v) Fremdgasmessungen.** Das Thema der Wasserstoffpermeation zur Anode hat in den vergangenen Jahren an Bedeutung gewonnen, insbesondere im Hinblick auf Sicherheitsaspekte, die Faraday-Effizienz und mögliche Zusammenhänge mit Alterungsphänomenen. Zur Quantifizierung solcher Fremdgase liefern Gaschromatographen sehr genaue und belastbare Messergebnisse. Für einen 8-Kanal-Teststand ist eine Ausstattung aller Kanäle mit Gaschromatographen jedoch kostenintensiv. Daher wurden im Projekt unterschiedliche Messansätze geprüft und miteinander verglichen.

Auf dieser Basis wurde ein Konzept erarbeitet, das auf günstigeren Sensoren in Kombination mit einer Multiplex-Lösung beruht. Der Sensoransatz ist dabei nicht als Ersatz der gaschromatographischen Referenzmessung ausgelegt, sondern als praktikable Lösung für den Routinebetrieb mit regelmäßigem

Abgleich der Sensorsignale gegenüber dem Gaschromatographen. Dadurch kann die Fremdgasmessung im Hochdurchsatzkontext ressourcenschonend umgesetzt werden, ohne auf ein verlässliches Referenzieren zu verzichten. Die Funktionsweise dieses Vorgehens ist in Abbildung 8 exemplarisch anhand des zeitlichen Verlaufs von H<sub>2</sub>-in-O<sub>2</sub>-Werten dargestellt. Gezeigt sind Messreihen für drei Kanäle des 8-Kanal-Teststands, jeweils im Vergleich zwischen multiplexed durchgeführter Gaschromatographie und dem Sensor-Multiplex-Konzept. Den gaschromatographischen Messwerten wird hierbei die Referenzfunktion zugrunde gelegt. Es zeigt sich, dass die Kurvenverläufe des Sensoransatzes qualitativ mit den GC-Verläufen übereinstimmen. Gleichzeitig ist unter quasi-stationären Bedingungen ein konstanter Offset der Sensordaten gegenüber der Gaschromatographie erkennbar. Für eine quantitative Auswertung wird daher in regelmäßigen Intervallen der Offset zwischen GC und Sensorwerten bestimmt und bei der Auswertung der Sensordaten korrigiert. Auf diese Weise können mit dem Sensor-Multiplex-Konzept auch quantitative Aussagen zum H<sub>2</sub>-in-O<sub>2</sub>-Gehalt abgeleitet werden.



**Abbildung 8.** Zeitlicher Verlauf des H<sub>2</sub>-in-O<sub>2</sub>-Gehalts an drei Messkanälen (2, 5, 6) des 8-Kanal-Teststands. Gegenübergestellt sind Ergebnisse eines sensorbasierten Multiplex-Messkonzepts und einer multiplexed realisierten Gaschromatographie als Referenz. Die Legende weist die Sensordaten kanalweise (Channel 2, Channel 5, Channel 6) und die gaschromatographische Referenzmessung als GC aus.

#### Fazit zu AP3.2.2

Im Arbeitspaket AP3.2.2 wurden Charakterisierungsverfahren für Hochdurchsatztests in Vollzellen untersucht, weiterentwickelt und für den Routineeinsatz eingeordnet. Detailliert betrachtet wurden (i) Polarisationskurven mit verbessertem internem Auswertestandard, (ii) elektrochemische Impedanzspektroskopie als zentrales Analysewerkzeug unter Berücksichtigung des Einflusses des Versuchsaufbaus auf die HFR Bestimmung, (iii) Cyclo-Voltammetrie zur Einordnung von Katalysatorsystemen, die jedoch nicht als Standardwerkzeug empfohlen wird, sowie (iv) die Stromunterbrechungsmethode als praktikable Ergänzung, insbesondere wenn EIS-basierte Verfahren nur eingeschränkt anwendbar sind. Ergänzend wurden Fremdgasmessungen adressiert, wobei ein sensorbasiertes Multiplex-Konzept mit regelmäßiger Referenzierung gegenüber Gaschromatographie erarbeitet wurde. Insgesamt wurde damit eine belastbare und hochdurchsatzfähige Charakterisierungsbasis geschaffen, die die Vergleichbarkeit von Messreihen unterstützt.

### AP3.2.3-AP3.2.5 Modelltheoretische Beschreibung, automatisiertes Auswertewerkzeug und Auswertung der Messungen

Aufgrund der Verknüpfungen dieser drei Arbeitspakete erfolgt der Bericht zusammen. Es konnte ein Ablauf erarbeitet werden, der Messergebnisse aus Experimenten reproduzierbar und untereinander vergleichbar auswertet. Dies beinhaltet eine modelltheoretische Vorstellung bzw. Abbildung der entscheidenden physikalischen Parameter sowie die automatisierte Auswertung und Unterteilung in Verlustanteile.

Zur modelltheoretischen Beschreibung wurde ein physikochemisches Modell über fünf Schichten des PEM-Elektrolyseurs formuliert und implementiert. Dieses Modell beinhaltet die Membran, die beiden Katalysatorschichten sowie die jeweils anschließende poröse Transportschicht. Der Fokus dieses Modells liegt auf der Modellierung der Vollzell-Performance und beinhaltet die Nachbildung der Polarisationsverluste, der Gasreinheit und der Betriebstemperaturen. Das Modell ist in der Programmiersprache Python implementiert.

Für die Auswertung und Bewertung wurde ein Auswertewerkzeug, ebenfalls in der Programmiersprache Python, entwickelt. Dieses Werkzeug ermöglicht die automatische Auswertung und Bewertung von Polarisationskurven und anderen Charakterisierungsmethoden, wie z.B. Impedanzspektren, welche mittels der elektrochemischen Impedanzspektroskopie ermittelt werden. Bei der Auswertung wird beispielsweise der HFR bestimmt und ein freiwählbares Ersatzschaltbild parametrisiert. Die Bewertung der Spektren erfolgt beispielsweise unter Prüfung des Kramers-Kronig Gültigkeitstests. Für zukünftige Arbeiten ist vorgesehen, dass die Auswertung der Impedanzspektroskopie mittels eines dynamischen physikalischen Modells erfolgt. Das oben genannte physikalische Modell ist stationär implementiert und daher so nicht geeignet.

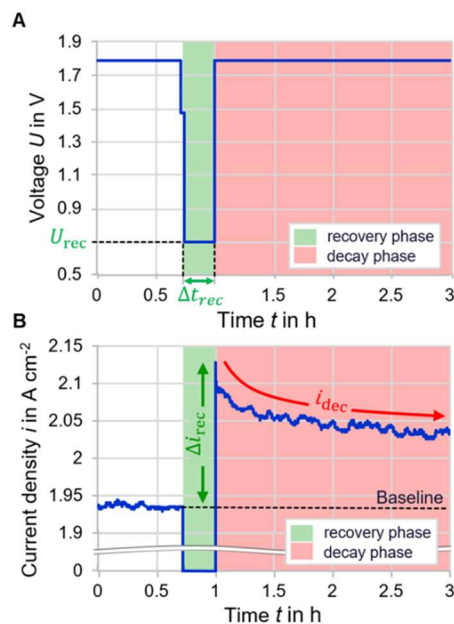
Insgesamt wurden im Laufe des Projekts >100 Kurzzeitmessungen (< 200 h) durchgeführt. Zwei Beispiele für einen funktionierenden Ablauf im Laufe des Projektes werden im Folgenden kurz ausgeführt:

- (i) Studie zur reversiblen Leistungserholung
- (ii) Studie zur Reproduzierbarkeit

**(i) Studie zur reversiblen Leistungserholung.** Im folgenden Abschnitt wird der beobachtete Recovery-Effekt ausschließlich anhand der experimentellen Ergebnisse beschrieben. Die Darstellung basiert überwiegend auf der Publikation; der darin enthaltene Modellierungsteil (in Kooperation mit Segiwa) wird an dieser Stelle nicht weiter behandelt<sup>2</sup>. Ziel ist es, die reversiblen Leistungserholungen nach kurzzeitigen „Recovery-Phasen“ (kurzes Absenken der Zellspannung/Unterbrechen des Betriebs) systematisch zu charakterisieren und daraus Hinweise auf die zugrundeliegenden Einflüsse abzuleiten.

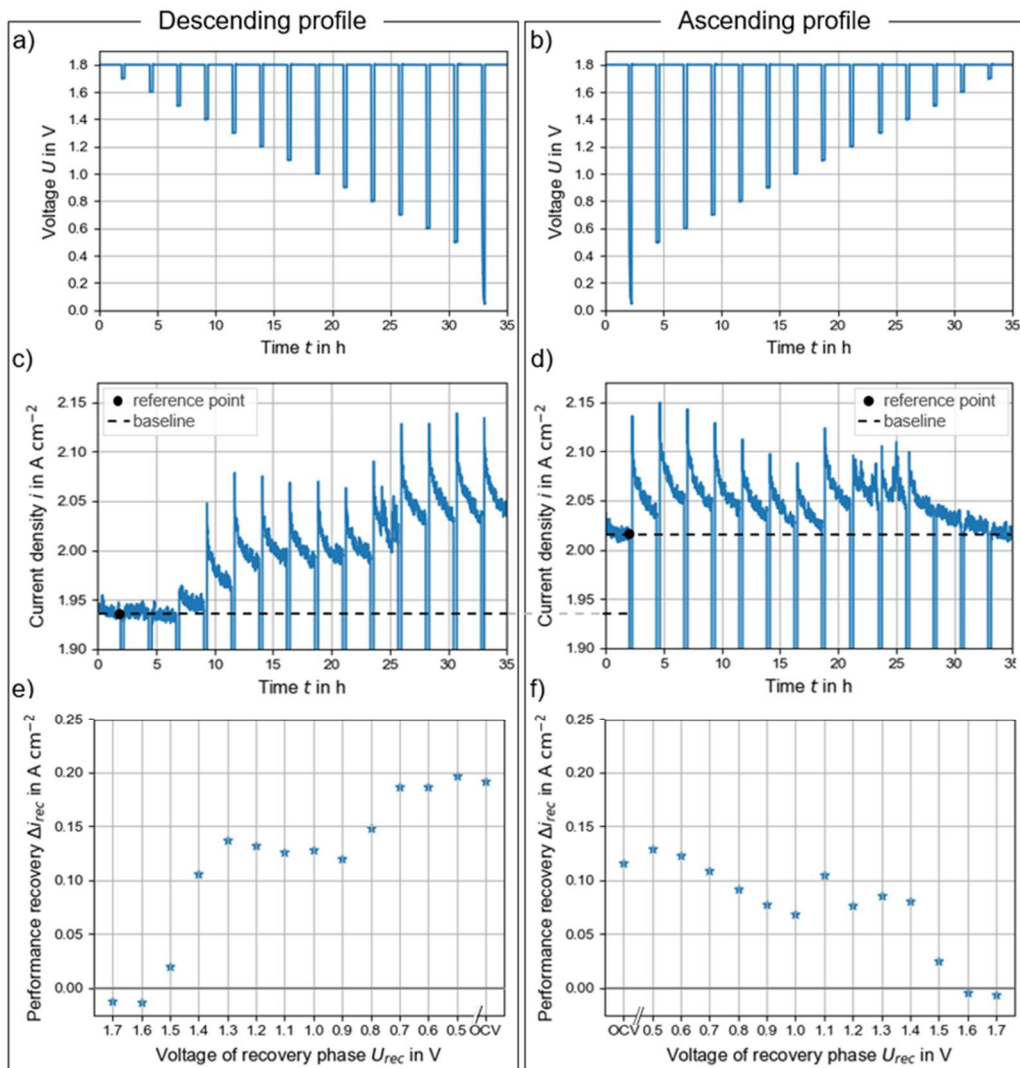
Ein beispielhafter Messzyklus ist in der Abbildung 9 schematisch dargestellt: Auf eine definierte Recovery-Phase (Spannungsniveau  $U_{rec}$  für die Dauer  $\Delta t_{rec}$ ) folgt eine Abklingphase, in der die Stromdichte wieder in Richtung eines quasi-stationären Niveaus zurückgeht. Experimentell zeigt sich dabei ein deutlicher, reversibler Sprung der Stromdichte  $\Delta i_{rec}$  unmittelbar nach der Recovery-Phase, gefolgt von einem zeitabhängigen Abklingen, das über eine Abklingrate  $i_{dec}(t)$  beschrieben werden kann. Damit liegt ein reproduzierbares Muster aus kurzfristiger Erholung und anschließendem Relaxationsverhalten vor.

<sup>2</sup> Rex et al. 2024. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ad96e4>



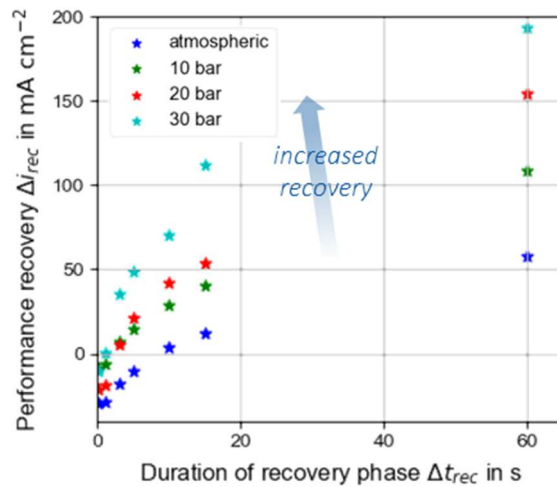
**Abbildung 9.** Experimentelles Beispiel der reversiblen Leistungserholung im potentiostatischen Betrieb: **A** Spannungsprofil zur Darstellung der Erholungsphase, charakterisiert durch die Erholungsspannung  $U_{rec}$  und die Erholungsdauer  $\Delta t_{rec}$ . Vor und nach der Erholungsphase wird dieselbe Spannung angelegt. **B** Die Stromdichteantwort zeigt eine deutliche Erholungsbetrag  $\Delta i_{rec}$  relativ zum Ausgangsniveau, gefolgt von einem zeitlichen Abklingen in der Abklingphase, beschrieben durch  $i_{dec}(t)$ .

Die reversible Leistungserholung  $\Delta i_{rec}$  zeigt eine ausgeprägte Abhängigkeit vom Recovery-Spannungsniveau. Bei systematischer Variation von  $U_{rec}$  nimmt  $\Delta i_{rec}$  ab einer Zellspannung von  $U_{rec}=1,5$  V mit sinkender Recovery-Spannung deutlich zu (s. Abbildung 10). Recovery-Bedingungen nahe OCV führen damit konsistent zu größeren Erholungsbeträgen als Recovery höherer Zellspannungen. Auch die Dauer der Recovery-Phase ist maßgeblich: Mit zunehmender Haltezeit  $\Delta t_{rec}$  wächst die Erholungsamplitude zunächst stark und geht anschließend ab ca. 180 s in ein Sättigungsverhalten über.

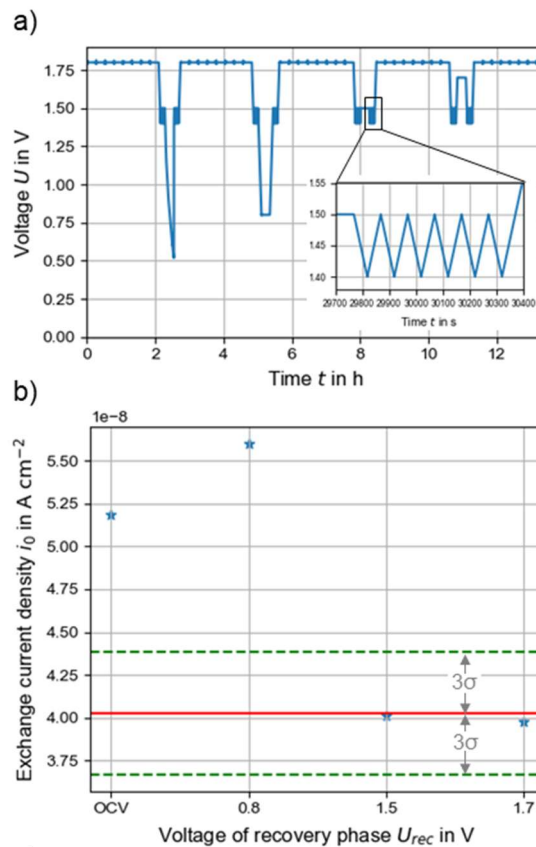


**Abbildung 10.** Untersuchung des Einflusses angelegter Spannungsniveaus auf die reversible Leistungserholung: (a) absteigendes und (b) aufsteigendes Spannungsprofil mit den zugehörigen Stromdichteresultaten in (c) und (d). Die aus (c) und (d) abgeleiteten Beträge der Leistungserholung sind in (e) beziehungsweise (f) dargestellt.

Ein zusätzlicher Einfluss ergibt sich aus der Variation des Kathodendrucks in OCV-basierten Recovery-Sequenzen (atmosphärisch bis 30 bar; s. Abbildung 11). Für eine gegebene OCV-Haltedauer steigt  $\Delta i_{rec}$  mit dem Druck an, was konsistent mit einem begünstigenden Beitrag des druckabhängigen Wasserstoff-Crossover ist.



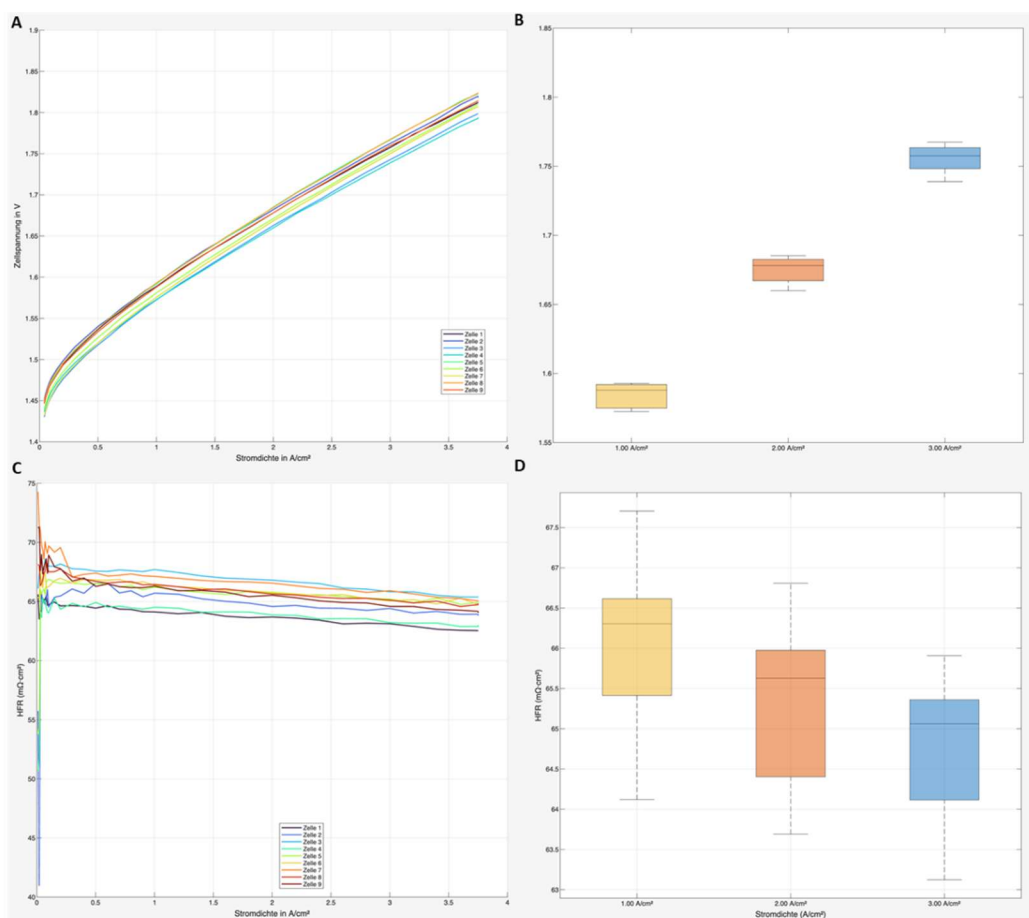
**Abbildung 11.** Einfluss des Kathodendrucks auf die reversible Leistungserholung: Dargestellt ist der Erholungsbetrag  $\Delta i_{rec}$  in Abhängigkeit der Dauer der OCV-Recovery-Phase  $\Delta t_{rec}$  für atmosphärische Bedingungen sowie 10, 20 und 30 bar. Mit steigendem Druck nimmt  $\Delta i_{rec}$  bei gleicher Haltezeit zu, was auf einen begünstigenden Einfluss des druckabhängigen H<sub>2</sub>-Crossover hinweist.



**Abbildung 12.** Einfluss der Recovery-Prozedur auf kinetische Kenngrößen: (a) Spannungsprofil mit Tafel-Sweeps vor und nach Recovery-Phase bei unterschiedlichen Spannungsniveaus. (b) Aus den Sweeps abgeleitete Austauschstromdichte  $i_0$ .

Die experimentellen Ergebnisse belegen einen kinetischen Anteil des Recovery-Effekts (s. Abbildung 12). Bei konstanter Tafelsteigung steigt die Austauschstromdichte  $i_0$  nach Recovery nahe OCV bzw. bei 0,8 V signifikant an, was eine verbesserte OER-Kinetik unter „tiefen“ Recovery-Bedingungen nahelegt. Für Recovery bei 1,5 V und 1,7 V zeigt sich dagegen kein signifikanter kinetischer Zugewinn; dies ist jedoch vor dem Hintergrund zu interpretieren, dass die durch die für die Kinetikanalyse verwendeten Spannungsrampen bis 1,4 V reichen. Es konnten darüber hinaus keine signifikanten Einflüsse des HFRs und der residualen Verluste, inkl. der Massentransportverluste, festgestellt werden.

**(ii) Studie zur Reproduzierbarkeit.** Im Kontext von Hochdurchsatzmessungen ist es essenziell, die Reproduzierbarkeit der Testergebnisse sicherzustellen, um belastbare Aussagen zu erhalten und daraus eine fundierte Bewertung sowie eine zielgerichtete Weiterentwicklung von Zellkomponenten abzuleiten. Vor diesem Hintergrund wurde in dieser Studie die Reproduzierbarkeit der in-house entwickelten PEMWE-Vollzelle untersucht. Hierzu wurden insgesamt neun Zellen mit identischem Materialsystem im in Abschnitt AP3.2.1 beschriebenen 8-Kanal-Teststand charakterisiert. Abbildung 13 A, B zeigt die resultierenden Polarisationskurven, Abbildung 13 C, D die zugehörigen HFR-Werte aus EIS-Messungen. Insgesamt ergibt sich eine hohe Reproduzierbarkeit sowohl im qualitativen Verlauf als auch in den quantitativen Kennwerten. Damit wird bestätigt, dass sowohl die Zellhardware als auch der 8-Kanal-Teststand (Hardware und Regelung) für reproduzierbare Versuchsergebnisse im Hochdurchsatzbetrieb geeignet sind.



**Abbildung 13.** A Zellspannungen über Stromdichte für neun verschiedene Zelldurchläufe im Rahmen der Reproduzierbarkeitsstudie; B zugehörige statische Auswertung; C HFR-Werte in Abhängigkeit der Stromdichte; D zugehörige statische Auswertung.

### Fazit zu AP3.2.3-AP3.2.5

In AP3.2.3–AP3.2.5 wurde eine Auswerterroutine geschaffen, um Messdaten aus Hochdurchsatz-Experimenten reproduzierbar, automatisiert und zwischen unterschiedlichen Versuchsreihen belastbar vergleichbar auszuwerten. Dazu wurden ein physikalisch-basierendes Model zugrunde gelegt, und ein Python-basiertes Auswertewerkzeug entwickelt, das zentrale Kenngrößen und Verlustanteile aus Standardmessungen konsistent ableitet und die Ergebnisqualität systematisch prüft. Der Ansatz wurde im Projektumfang an zahlreichen Kurzzeitmessungen praktisch eingesetzt und anhand exemplarischer Studien zur (i) reversiblen Leistungserholung und (ii) Reproduzierbarkeit demonstriert. Damit liegt eine skalierbare Auswertebasis vor, die die Datenauswertung standardisiert, den manuellen Aufwand reduziert und die Vergleichbarkeit von Experimenten im Projektkontext deutlich erhöht.

## Zugehörig TP4: High-Throughput Alterungsbewertung

### AP3.2.1: Entwicklung der Alterungsprotokolle für Hochdurchsatzalterung

Im Rahmen von AP3.2.1 wurden Alterungsprotokolle für eine Hochdurchsatzbewertung untersucht, mit dem Ziel, unterschiedliche Betriebsstressoren in einem konsistenten und vergleichbaren Prüfraumen abzubilden. Der Schwerpunkt lag auf AST-nahen Protokollen, die sich insbesondere durch definierte Lastwechsel und Spannungsphasen unterscheiden (vgl. Tab. 1).

Die Versuche sind in der Regel über eine einheitliche Prüfdauer von 500 h ausgelegt und enthalten in regelmäßigen Abständen Charakterisierungsphasen. Diese Charakterisierung umfasst drei Polarisationskurven einschließlich EIS-Messungen und ermöglicht, wie in Abschnitt AP3.2.2 (i) beschrieben, eine detaillierte Betrachtung der zugrundeliegenden Verlustanteile. Dadurch wird eine belastbare Vergleichsbasis geschaffen, um den Einfluss der jeweils implementierten Stressoren auf die Alterung zu bewerten, insbesondere mit Blick auf die Membranelektrodeneinheit.

Aus der Auswertung der Messprotokolle ergeben sich drei grundsätzliche Erkenntnisse: (i) Bei Protokollen mit OCV-Anteilen ist eine Berücksichtigung reversibler Leistungserholung für die Beurteilung der irreversiblen Alterung methodisch zwingend erforderlich, da andernfalls die Alterungsinterpretation verzerrt werden kann (s. Abschnitt AP3.2.3-AP3.2.5 (i)). (ii) Selbst über die vorgesehene Prüfdauer von 500 h kann bei einzelnen Protokolltypen, beispielsweise mit konstanten Spannungs-Lastphasen, weiterhin ein Einfahr-Verhalten beobachtet werden, das sich in einer leichten Performancestabilisierung bzw. -steigerung äußern kann. (iii) Insgesamt stellt AP3.2.1 einen ersten systematischen Ansatz zur getrennten Betrachtung einzelner Stressoren dar; das Zusammenspiel bzw. mögliche Interaktionseffekte zwischen den Stressoren konnte jedoch im Projektkontext nicht abschließend geklärt werden und bleibt Gegenstand weiterführender Untersuchungen.

**Tabelle 1.** Überblick der untersuchten Alterungsprotokolle und zugehörigen Prüfbedingungen.

Aspekt / Protokoll	Dauer	Spannung / Profil	Druck	Temperatur	Membran
Referenzprotokoll	500 h	2 V	1 bar	80 °C	N115
Einfluss der Temperatur	500 h	2 V	1 bar	60 °C	N115
Einfluss niedrigerer Spannung	500 h	1,8 V	1 bar	80 °C	N115
Einfluss höherer Spannung	500 h	2,2 V	1 bar	80 °C	N115
Einfluss des Lastwechsels	500 h	EU harmonized AST	1 bar	80 °C	N115
Einfluss von OCV-Phasen	500 h	2 V + OCV	1 bar	80 °C	N115

Einfluss von niedrigen Last-Bedingungen	500 h	2 V + Haltephasen bei 1,4 V statt OCV	1 bar	80 °C	N115
Einfluss von metallischen Verunreinigungen (mit Referenzprotokoll)	500 h	2 V	1 bar	80 °C	N115
Einfluss der Membrandicke	500 h	2 V	1 bar	80 °C	N117
Variation der Dauer	10 h, 100 h, 1500 h	2 V	1 bar	80 °C	N115

### Fazit zu AP3.2.1

AP3.2.1 etabliert einen konsistenten, hochdurchsatzfähigen Prüfraumen zur vergleichbaren Bewertung AST-naher Alterungsprotokolle und ihrer Betriebsstressoren. Durch regelmäßige, EIS-gestützte Charakterisierungsphasen wird eine belastbare Zuordnung von Performanceänderungen zu Verlustanteilen ermöglicht. Für OCV-haltige Protokolle ist die Berücksichtigung reversibler Erholungseffekte zwingend, um irreversible Alterung korrekt zu bewerten. Interaktionseffekte zwischen Stressoren konnten im Projekt nicht abschließend geklärt werden und bleiben Gegenstand weiterer Untersuchungen.

### AP3.2.2 Weiterentwicklung sowie Verwendung des Modells zur Berücksichtigung der Materialalterung

Der Blick auf die Modellierung im Kontext der Alterung wurde während der Bearbeitung einer Veröffentlichung im Kontext der Modellierung geschärft. Es thematisiert die Bedeutung der Modellierung für die weitere Entwicklung im Bereich der PEM-Wasserelektrolyse aus ingenieurwissenschaftlicher Sicht und konzentriert sich dabei auf die makro- und mikroskopische Modellierungsebene. Die unterschiedliche Modelltiefe der physikalisch-basierten Modellierung wird anhand der jeweiligen Leistungskennzahlen der spezifischen Zellkomponenten erläutert (s. Abbildung 14).

Schließlich wird in dem Paper auch der Einsatz des maschinellen Lernens auf die Modellierung diskutiert. Ein Fazit ist, dass die Fortschritte im Computational Engineering und der Digitalisierung in Kombination mit dem Trend zum maschinellen Lernen/künstlichen neuronalen Netzen zu einer noch stärkeren Positionierung und intensiveren Nutzung von datenbasierten Modellen führen können. Insbesondere der Einsatz von Hochdurchsatzmethoden nimmt bei dem Einsatz von künstlichen Neuronen Netzen eine für die Datengenerierung entscheidende Rolle ein (s. Abbildung 15).

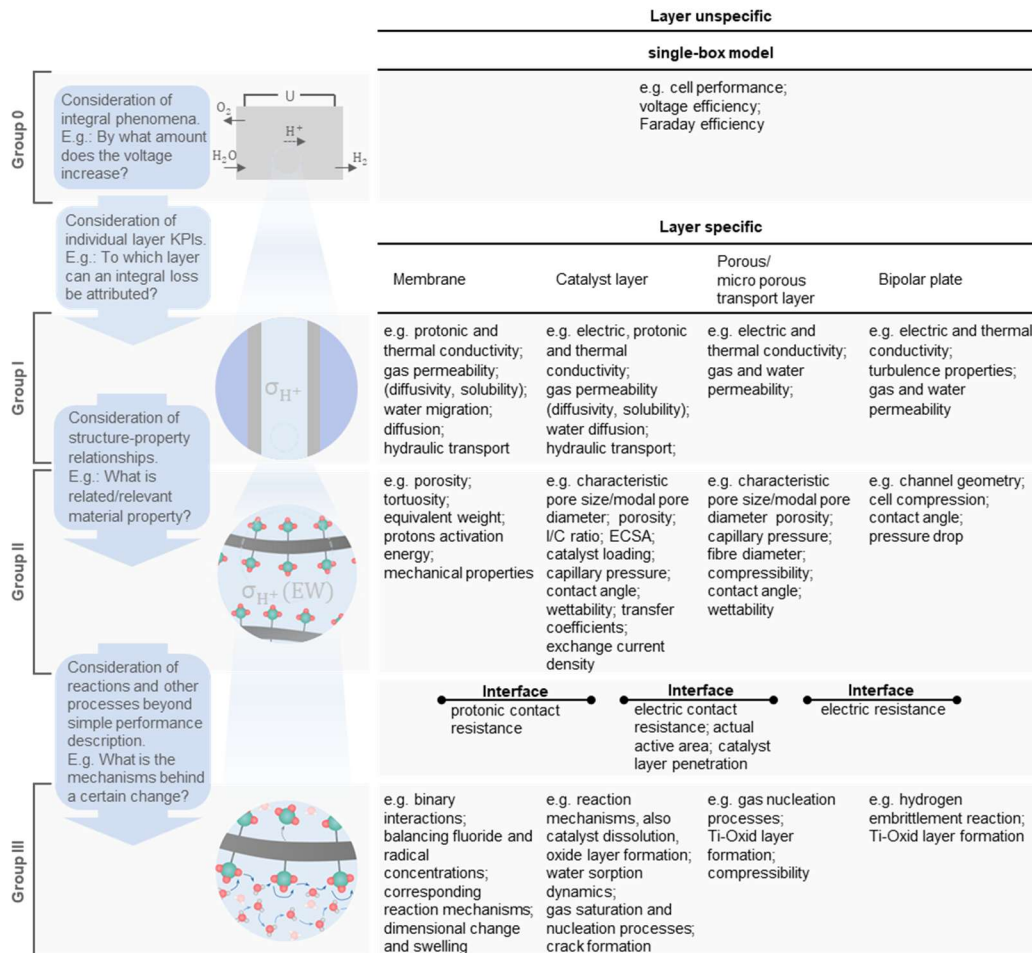


Abbildung 14. Klassifizierung von Modellierungsgruppen und zugehörige Modellelemente für die PEMWE.

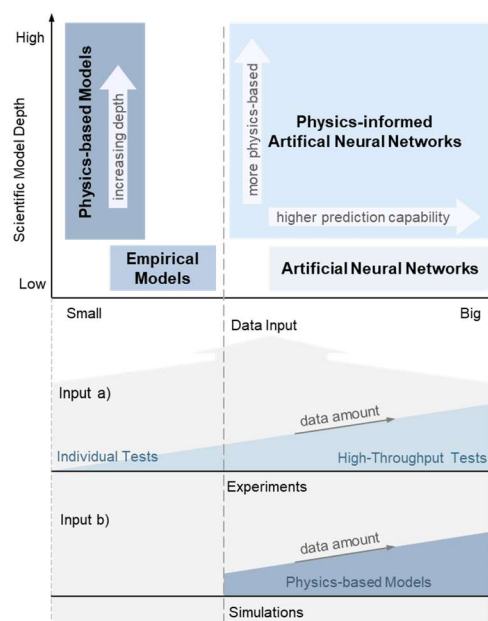
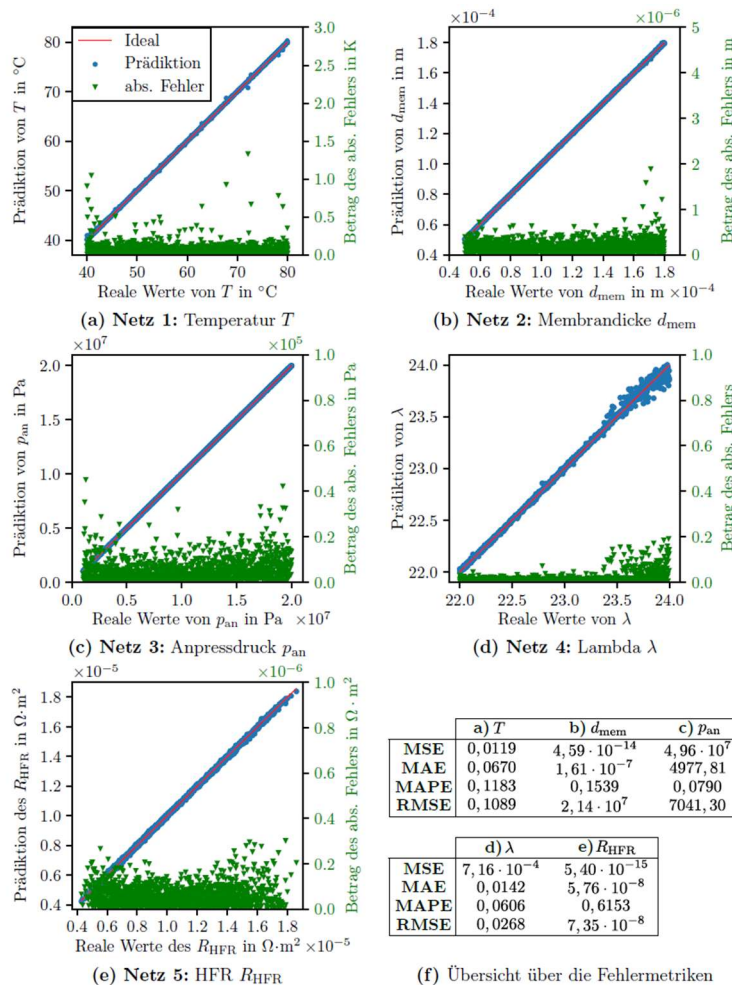


Abbildung 15. Überblick der verschiedenen Modellierungsmethoden in Abhängigkeit der wissenschaftlichen Modelltiefe und des Datengebrauchs.

Auch inhaltlich wurde der physikalischen Modellierung die datengetriebene Modellierung vorangetrieben und bewertet. Ein datenbasierter Ansatz zeichnet sich dadurch aus, dass keine physikalischen Phänomene und Eigenschaften der Zelle formuliert werden müssen. Unter Verwendung von Machine Learning Methoden „lernt“ das Modell selbstständig die Testergebnisse bei entsprechenden Eingangsgrößen nachzubilden.

Die Evaluierung der Anwendung erfolgte zunächst für die Rekonstruktion fehlender Datensatzeinträge: Aus einem Parametersatz bestehend aus Membrantemperatur  $T$ , Membrandicke  $d_{mem}$ , Anpressdruck  $p_{an}$ , Wassergehalt  $\lambda$  und Hochfrequenzwiderstand  $R_{HFR}$  werden vorwärts gerichtete Künstliche Neuronale Netze (kNN) so trainiert, dass jeweils eine fehlende Größe aus den verbleibenden vier bekannten Größen prädiziert werden kann. Die Evaluation der finalen Netze mit vier Eingangsgrößen zeigt insgesamt eine sehr hohe Prädiktionsgüte: In Abbildung 16 a)-e) werden für jedes Netz Streudiagramme „Prädiktion vs. Realwert“ gegenüber der Idealgeraden dargestellt; zusätzlich werden absolute Fehler über den Wertebereich ausgewiesen sowie die mittleren Fehlermetriken (s. f)) zusammengefasst. Die KNN liefern im Validierungsbereich im Mittel sehr geringe prozentuale Fehler (MAPE deutlich < 1) und eignen sich prinzipiell als Werkzeug zur Vervollständigung unvollständiger Datensätze bzw. zur Schätzung schwer direkt messbarer Größen. Aufgrund dieser vielversprechenden Ergebnisse folgen weitere Schritte bei der Alterungsprognostizierung mittels künstlicher Neuronaler Netze.

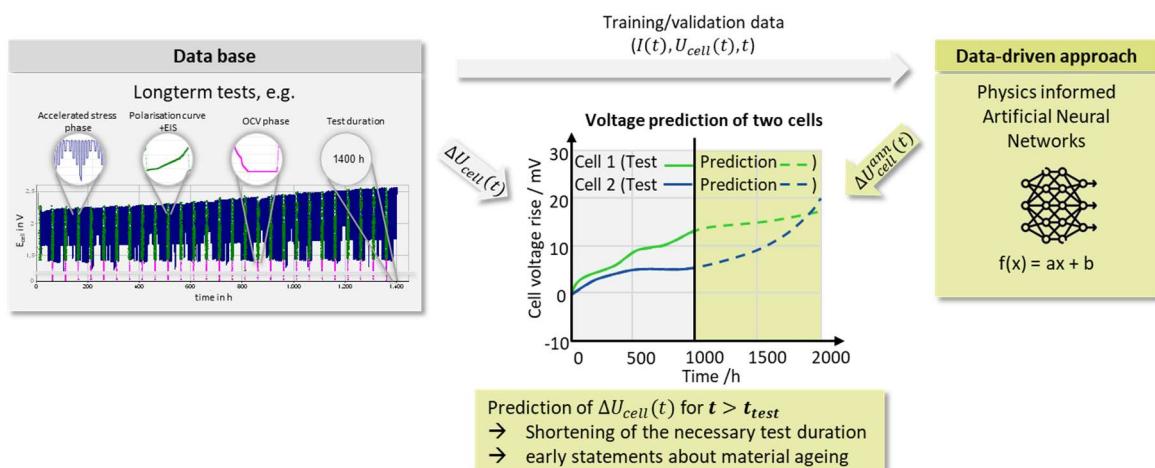


**Abbildung 16.** Ergebnisse der KNN-Studie zur Rekonstruktion fehlender Parameter: (a) Prädiktion der Temperatur  $T$ , (b) Membrandicke  $d_{mem}$ , (c) Anpressdruck  $p_{an}$ , (d) Wassergehalt  $\lambda$ , (e) Hochfrequenzwiderstand  $R_{HFR}$  jeweils als Prädiktion vs. Realwert inkl. absolutem Fehler; (f) Übersicht der zugehörigen Fehlermetriken (MSE, MAE, MAPE, RMSE).

### Fazit AP3.2.2

Die Kombination datenbasierter Auswertansätze mit physikalischer Modellierung bietet Potenzial, Alterungsprozesse effizienter zu analysieren und Ergebnisse besser abzusichern. Abbildung 17 fasst den vorgesehenen Workflow zusammen: Messdaten aus Langzeit- und beschleunigten Belastungstests bilden die Grundlage. Darauf aufbauend können Machine Learning Verfahren zur Datenaufbereitung und -strukturierung eingesetzt werden, beispielsweise zur Plausibilisierung, zur Rekonstruktion fehlender Werte sowie zur Extraktion von Trends und charakteristischen Mustern über verschiedene Betriebszustände hinweg.

Für eine belastbare Bewertung ist eine physikalische Einordnung dieser datenbasierten Ergebnisse erforderlich. Physikalische Randbedingungen und bekannte Wirkmechanismen dienen dabei als Leitplanken, um Korrelationen korrekt zu interpretieren, die Übertragbarkeit zwischen Betriebspunkten zu erhöhen und unzulässige Extrapolationen zu vermeiden. In der Gesamtschau entsteht so ein physikalisch informierter Auswertansatz, der perspektivisch eine frühzeitige Abschätzung der Alterungsentwicklung unterstützt und damit zur Reduktion von Testaufwänden sowie zu früheren Aussagen zur Material- bzw. MEA-Alterung beitragen kann.



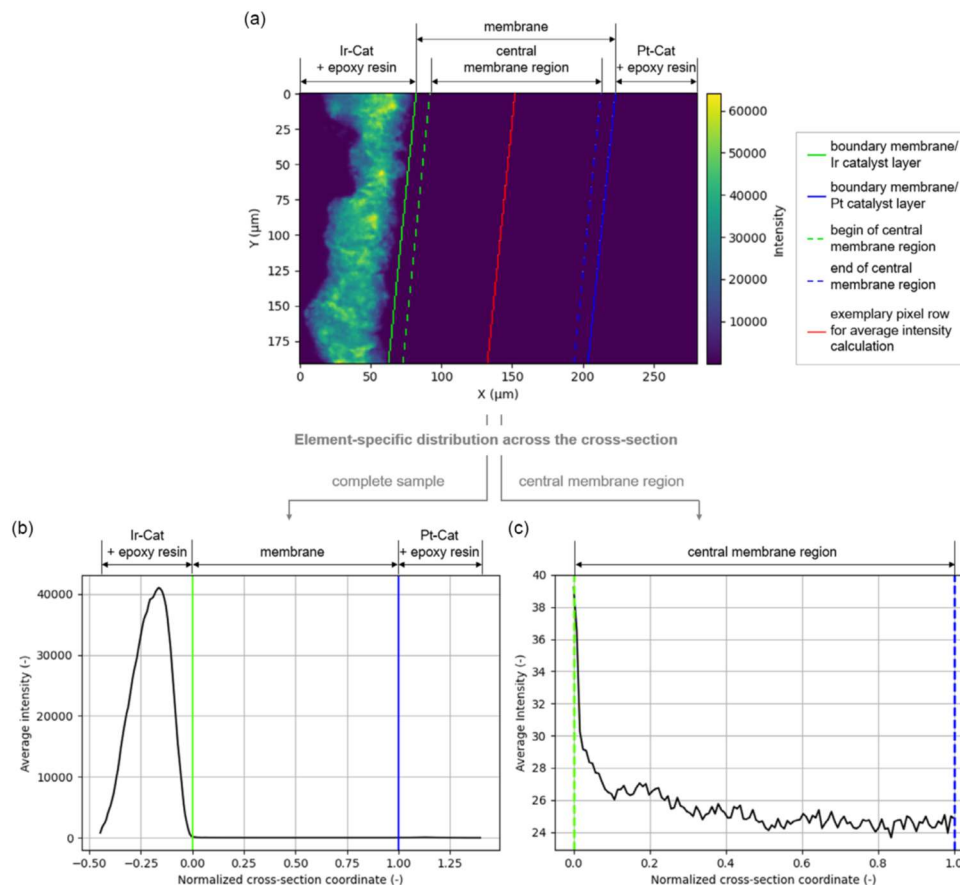
**Abbildung 17.** Überblick über den kombinierten datengetriebenen und physikalisch informierten Auswertansatz zur Alterungsbewertung.

### AP3.2.3 u. AP3.2.4: Automatisierte Auswertung und Bewertung der Alterungsaspekte auf Zellelevel

Im Folgenden werden die zwei Arbeitspakete gemeinsam erläutert, da sie inhaltlich eng verknüpft sind. Aufbauend auf der in Abschnitt AP3.2.3-AP3.2.5 beschriebenen Auswerteroutine wurde das in Python implementierte Auswertewerkzeug um eine zusätzliche Auswertung des Degradationsverhaltens aus Vollzell-Langzeitmessungen erweitert. Damit konnten Reproduzierbarkeit und Vergleichbarkeit der Auswertung auch für Zelltests (unterhalb der Hochdurchsatz-Langzeitmessungen) konsistent beibehalten werden. Zeitabhängige Verlustanteile aus Polarisationskurven, ergänzende Charakterisierung (u. a. EIS), sowie Betriebsparameter wie Gasreinheit und Betriebstemperaturen werden über die Zeit analysiert. Dies erlaubt neben der Degradationsrate auch die Quantifizierung relevanter Degradationsanteile in der Vollzelle und liefert damit mechanistische Einblicke in Alterungsprozesse. Im Projektzeitraum wurden insgesamt > 60 Messungen mit einer Versuchsdauer von jeweils > 200 h durchgeführt. Die automatisierte Auswerteroutine wurde anhand zweier Beispiele demonstriert:

- (i) Studie zur Metalmigration
- (ii) Studie zur porösen Transportschicht-Beschichtung

**(i) Studie zur Metallmigration.** In dieser Studie wird die Eignung der 2D-Röntgenfluoreszenz (X-ray fluorescence, XRF) zur Untersuchung der Elementmigration in katalysatorbeschichteten Membranen (CCM) mit Fokus auf Ir und Pt bewertet<sup>3</sup>. Nach Vollzelltests bis zu 1500 h wurden CCM-Querschnitte ex situ an der microXAS-Beamline der SLS vermessen. Abbildung 18 zeigt hierbei einen Auswerteansatz: Aus einer 2D-XRF-Karte (exemplarisch Ir) werden entlang definierter, parallel geführter Linien gemittelte Intensitätsprofile erzeugt und sowohl über den gesamten Querschnitt als auch für einen zentralen Membranbereich ausgewertet, wobei Randzonen nahe der Grenzflächen (jeweils 10  $\mu\text{m}$ ) ausgeschlossen werden, um Grenzflächen-/Überlagerungseffekte zu reduzieren und Profile über normalisierte Koordinaten vergleichbar darzustellen. Die Ergebnisse zeigen, dass XRF die räumliche Umverteilung degradationsrelevanter Metalle in der CCM sensitiv und prinzipiell hochdurchsatzfähig abbildet und damit eine belastbare Ergänzung zu elektrochemischen Langzeitdaten darstellt; darauf aufbauend sind Folgestudien zur Kopplung von angelegtem Potential und Betriebszeit mit Ausmaß/Eindringtiefe der Metallmigration vorgesehen. Zusätzlich wurden im Rahmen des Projekts 3D-Nanotomographie-Messungen (Caterete, Sirius) durchgeführt, deren Auswertung zudem noch Gegenstand aktueller Auswertung ist.

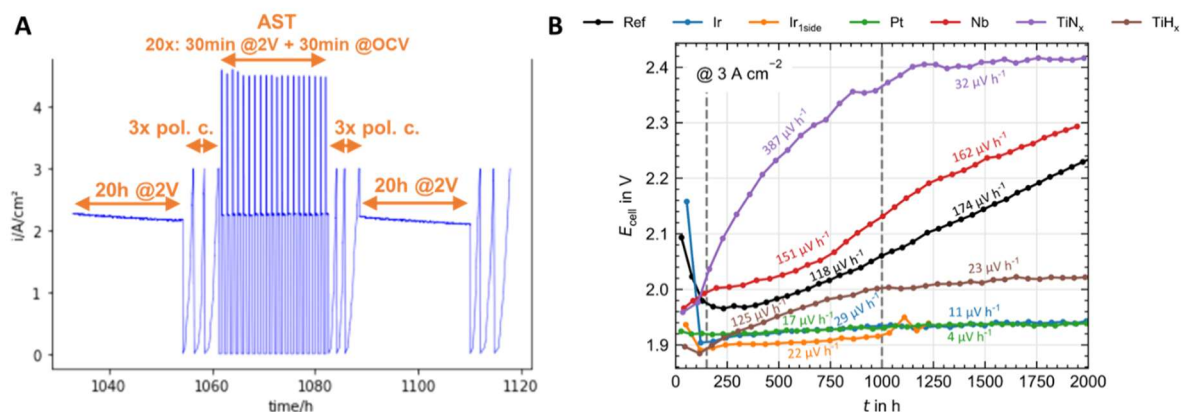


**Abbildung 18.** Methodenübersicht der XRF-Studie. **(a)** 2D-Karte des Ir-XRF-Signals (11,4 keV) mit markierten Probenbestandteilen/Charakteristika; Basis zur Ableitung der Profile. **(b)** Aus (a) abgeleitetes, gemitteltes Intensitätsprofil über den gesamten Probenquerschnitt (Mittelung entlang paralleler Linien), dargestellt über normierte Koordinaten. **(c)** Analoges, gemitteltes Intensitätsprofil für die zentrale Membranregion, definiert als Membranbereich ohne die äußeren 10  $\mu\text{m}$  je Seite an den Membran/Katalysator-Grenzflächen (zur Reduktion von Rand-/Überlagerungseffekten), ebenfalls über normierte Koordinaten.

<sup>3</sup> Rex et al., 2024. <https://doi.org/10.1002/aesr.202400048>

**(ii) Studie zur porösen Transportschicht-Beschichtung.** Im Kontext der Effizienz- und Kostensenkung in der PEM-Wasserelektrolyse ist die Anoden-PTL zentral, weil Titan-PTLs unter Anodenbedingungen passivieren können und dadurch der Kontaktwiderstand zur Katalysatorschicht steigt, was im Langzeitbetrieb zu höherem ohmschem Spannungsanteil und Effizienzverlusten führt. Das Paper untersucht deshalb, wie Platingruppenmetalle- (PGM) (Ir, Pt; inkl. Ir nur einseitig) und PGM-freie PTL-Oberflächen (Nb, TiN<sub>x</sub>, TiH<sub>x</sub> nach HCl-Ätzen) unter Last- und Start-Stopp-Profilen degradieren und welche Varianten eine stabile Kontaktzone ermöglichen<sup>4</sup>.

Hierzu wurden die beschichtete Ti-Fasersinter-PTLs in einer PEMWE-Einzelzelle mit einem beschleunigten Alterungsprotokoll betrieben (s. Abbildung 19 A). Der ohmsche Anteil wurde regelmäßig mit EIS gemessen, um die Degradation vor allem auf Kontakt- und Leitfähigkeitsverluste zurückzuführen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Spannungszunahme überwiegend von Ohm'schen Verlusten getrieben wird und damit von der Stabilität der PTL-CL-Kontaktzone abhängt. In Abbildung 19 B degradiert die unbeschichtete Referenz deutlich, während die PGM-Schichten die Grenzfläche stark. Bei PGM-freien Beschichtungen sind die Ergebnisse heterogen: Nb bleibt ungünstig, TiN<sub>x</sub> zeigt hohe Anfangsdegradation mit Sättigung und ist insgesamt nicht konkurrenzfähig, während TiH<sub>x</sub> als beste PGM-freie Option die Degradation gegenüber der Referenz deutlich reduziert. Jedoch wird auch in diesem Fall das Stabilitätsniveau von Pt/Ir nicht vollständig erreicht. Die PTL-Oberfläche bestimmt somit maßgeblich die Zellspannung über den Kontaktwiderstand, wobei PGM-Beschichtungen derzeit am stabilsten sind und PGM-freie Optionen noch Optimierung für industrierelevante Lastprofile benötigen.



**Abbildung 19.** A Schematische Darstellung des sich wiederholenden Lastprofils. B Verlauf der Zellspannungen mit zugehörigen Degradationsraten von Vollzellversuchen verschiedener Beschichtungstypen.

#### Fazit AP3.2.3 u. AP3.2.4

Es wurde gezeigt, dass in diesem Projekt neben Performance-Messungen auch Langzeitmessungen erfolgreich im Hochdurchsatzansatz getestet und ausgewertet werden konnten. Die Auswertung erfolgte dabei mittels eines automatischen Auswertetools, welches Verlustterme aus der Vollzellmessung bestimmen und die auftretende Degradation quantifizieren kann. Die XRF-Studie (i) demonstriert, dass neben in-situ auch ex-situ Untersuchungen sehr relevant sind, um belastbare Schlussfolgerungen zu ziehen. Ergänzend ist hierzu eine Auswahl an analytischen Methoden tabellarisch dargestellt (s. Tabelle A1 im Anhang). Die hier betrachtete PTL-Beschichtungsstudie (ii) zeigt, dass Degradationsunterschiede zwischen Materialvarianten im Langzeitbetrieb insbesondere über den ohmschen Anteil/den Kontaktwiderstand sichtbar und vergleichbar werden. Auch wenn PGM-Beschichtungen derzeit die höchste Stabilität zeigen, erscheinen insbesondere TiH<sub>x</sub>-basierte, PGM-freie Ansätze als

<sup>4</sup> Stein et al. 2025. <https://doi.org/10.1021/acscami.4c22455>

vielversprechende Alternative, die sich für weiterführende Untersuchungen und gezielte Optimierungen anbietet.

## 2. Darstellung der wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Für das Institut für elektrische Energiesysteme waren die wichtigsten Finanzierungspositionen Personalkosten in Höhe von 578.069,76 €, Investitionskosten, überwiegend für den Teststandbau in Höhe von 569.824,07 € sowie Reise- und Sonstige Sachkosten von 16.140,06 € bzw. 53.216,14 €.

## 3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Die Personal- und Sachmittel wurden benötigt, um die beschriebenen Arbeiten an den Arbeitspaketen zu ermöglichen. Die Reisemittel, insbesondere für Fachtagungen, waren notwendig, um die Projektergebnisse zu kommunizieren sowie die Mitarbeitenden des Projekts über aktuelle Entwicklungen im Stand der Technik zu informieren.

Die geleisteten Arbeiten umfassen personell zum einen anteilig die Entwicklung und den Aufbau der Teststandinfrastruktur. Auf Seiten der Experimente wurde das Personal im Laufe des Projekts eingesetzt um eine dreistellige Anzahl an Experimenten durchzuführen, die entweder dem Erkenntnisgewinn bei der Entwicklung der Charakterisierungsmethoden gedient haben, Langzeitmessdaten für Modellierungsarbeiten geliefert haben oder mit denen direkt Aussagen zur Stabilität bestimmter Materialien getroffen werden konnten. Die Investitionsmittel wurden verwendet, um insgesamt 24 Messplätze für Elektrolysezellen aufzubauen.

## 4. Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit des Ergebnisses – auch konkrete Planungen für die nähere Zukunft - im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans

Die im Projekt gewonnenen Erkenntnisse und Resultate wurden in Form mehrere Konferenzbeiträge sowie als wissenschaftliche Papiere in Fachzeitschriften veröffentlicht (siehe unten). Damit konnte das Projekt HyThroughGen insgesamt zusammen mit dem hier beschriebenen Teilprojekt einen wichtigen Beitrag zur Weiterentwicklung der PEMWE leisten. Im Fokus standen hierbei i) die Entwicklung eines Konzepts für Mehrkanal-Elektrolyseteststände sowie deren Aufbau, ii) die Weiterentwicklung von Charakterisierungsmethoden und die Auswertung der zugehörigen Ergebnisse zur besseren Einschätzung der Alterung von PEMWE-Zellen sowie iii) wichtige Alterungsexperimente zu bestimmten Fragestellungen zum Thema Alterung. Weiterhin sind bzw. werden die Erkenntnisse aus HyThroughGen in mehrere Doktorarbeiten eingeflossen/einfließen, sodass das Projekt neben dem reinen Erkenntnisgewinn auch einen Beitrag zur Ausbildung von Fachkräften im Bereich der elektrochemischen Energiesysteme geleistet hat.

Zu i): Im Laufe der letzten Jahre hat sich die durchschnittliche Messdauer mit einer Elektrolysezelle schrittweise verlängert. Die Forschung zeigt, dass es viele Einfahrprozesse und anfängliche Änderungen innerhalb der Zelle gibt, die das Polarisationsverhalten beeinflussen. Für vergleichende Tests sollte eine Messdauer von 100-200 h daher nicht unterschritten werden. Zusätzlich sind lange Tests notwendig, um die Alterung der Systeme zu untersuchen. Auf Grund der starken technischen Entwicklung der PEMWE in den vergangenen Jahren gibt es wenige Erkenntnisse über die Langzeitstabilität. Die gewonnenen Erkenntnisse aus der Teststandentwicklung bzw. aus dem Teststandbau waren bereits für das Projekt wertvoll, da erkenntnisreiche Studien durchgeführt werden konnten, werden aber vor allem darüber hinaus für zukünftige Arbeiten wertvoll sein. Das Interesse anderer Institute und der Industrie an diesem Konzept ist groß; zusätzlich gibt es Anfragen zur Kommerzialisierung dieser Teststände.

Zu ii) Über die Charakterisierungsmethoden und Auswertemethoden wird allgemein stark diskutiert. Einige Gruppen arbeiten an der Art und Weise der Ermittlung der Anteile an der Zellspannungserhöhung. Die durch LUH in HyThroughGen gewonnenen Erkenntnisse zur Optimierung der Methodik sowie die Auswerteskripte werden in hauseigenen Nachfolgeprojekten eine Nachnutzung erfahren. Über die Veröffentlichungen und Gremien werden die Methoden auch außerhalb unserer Gruppe diskutiert und verfügbar gemacht.

Zu iii) Es wurden Dutzende Messungen mit Hinblick auf Charakterisierung der Alterungserscheinungen bei PEMWE durchgeführt. Besonders bedeutsam sind hier zwei Studien, die auch oben ausführlich diskutiert wurden. Die Betrachtung der reversiblen Alterung und deren Einfluss auf die Analyse ist wegweisend, auch weil hier zum ersten Mal zusammen mit dem LBNL die erwähnte AP-XPS zur Bestimmung der Oxidationsstufen von Ir durchgeführt werden konnte. Die finalen Ergebnisse sind noch in der Auswertung, aber die ersten Vorträge dazu wurden bereits sehr interessiert aufgenommen. Neben den direkten Erkenntnissen ist dies auch methodisch sehr wertvoll, weil es sehr viel Erkenntnisgewinn für nachfolgende Messungen gibt.

Zudem wurde eine bereits vielbeachtete und zitierte 2000 h-Studie mit unterschiedlichen Beschichtungen durchgeführt (s.o.). Neben dem Vergleich der unterschiedlichen Materialien ist heraus eine mittlerweile 19.000 h lange Messung mit einer mit Platin beschichteten PTL (Stand der Technik-Beschichtung) hervorgegangen. Diese Messung läuft weiterhin und wir sammeln wichtige Erkenntnisse über die Stabilität der Zelle.

## 5. Während der Durchführung des Vorhabens bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Während der Durchführung des Vorhabens wurden auf dem Gebiet der PEMWE bei anderen Stellen verschiedene Fortschritte bekannt, insbesondere in den Bereichen Charakterisierungsmethoden, Degradationsanalyse und Modellierung. Diese Entwicklungen wurden im Rahmen von Fachtagungen, wissenschaftlichen Publikationen sowie der Zusammenarbeit innerhalb der H2Giga-Plattform und mit weiteren Projekten fortlaufend verfolgt. Die Entwicklungen bestätigten die Relevanz der im Projekt bearbeiteten Fragestellungen und wurden, soweit möglich, in die eigenen Arbeiten einbezogen. Zugleich konnten die im Projekt erzielten Ergebnisse in den wissenschaftlichen Diskurs zurückgespielt werden.

## 6. Liste der erfolgten oder geplanten Veröffentlichungen des Ergebnisses nach Nr. 5 der NKBF/NABF

Datum	Art der Veröffentlichung	Titel, Quelle/Zitat (Journal, Konferenz)	Autoren	Link
2022	Vortrag auf Fachkonferenz	From an Engineer's Perspective: Evaluation of the Invested Effort and the Resulting Benefits of Artificial Neural Networks in Proton Exchange Membrane Water Electrolysis Development. In <i>Electrochemical Society Meeting Abstracts 242</i> (No. 44, pp. 1642-1642). The Electrochemical Society, Inc..	Rex, A., Trinke, P., Eckert, C., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2022-02441642mtgabs/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2022-02441642mtgabs/meta</a>
2023	Poster auf Fachkonferenz	An Open-Source Modeling Tool for Alkaline (AEL), Proton Exchange Membrane (PEMEL), and Solid Oxide (SOEL) Water Electrolysis Systems. 4th International Conference on Electrolysis (ICE)	Rex. A. et al.	-
2024	Vortrag auf Fachkonferenz	Exploring Degradation in PEM Water Electrolysis Cells Due to Metal Migration: Insights from X-Ray Fluorescence Analysis. In <i>Electrochemical Society Meeting Abstracts 245</i> (No. 34, pp. 1699-1699). The Electrochemical Society, Inc..	Rex, A., Almeida de Campos, L., Gottschalk, T., Czoska, S., Saraçi, E., Trinke, P., ... & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-01341699mtgabs/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-01341699mtgabs/meta</a>
2024	Vortrag auf Fachkonferenz	Coating Titanium Transport Layers for Enhanced Short and Long Term Performance in PEM Water Electrolysis Cells. In <i>Electrochemical Society Meeting Abstracts 245</i> (No. 34, pp. 1894-1894). The Electrochemical Society, Inc..	Stein, L., Ismael, M., Bensmann, B., Hanke-Rauschenbach, R., Dittrich, A., & Walter, D.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-01341894mtgabs/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-01341894mtgabs/meta</a>
2024	Vortrag auf Fachkonferenz	Reversible Performance Dynamics in PEM Water Electrolysis: A Systematic Investigation. <i>Electrochemistry 2024</i> .	Rex, A., Krenz, T., Trinke, P., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	-

2024	Vortrag auf Fachkonferenz	Reversible Performance Dynamics in PEM Water Electrolysis: An Electrochemical Study. In <i>Electrochemical Society Meeting Abstracts prime2024</i> (No. 45, pp. 3114-3114). The Electrochemical Society, Inc..	Rex, A., Krenz, T., Trinke, P., Helmers, L., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-02453114mtgabs/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-02453114mtgabs/meta</a>
2024	Vortrag auf Fachkonferenz	Integration of Thin Laser Structured Micro Porous Layers in PEM Water Electrolyzers. In <i>Electrochemical Society Meeting Abstracts prime2024</i> (No. 45, pp. 3197-3197). The Electrochemical Society, Inc..	Trinke, P., Wienke, A., Benecke, M., Stein, L., Bensmann, B., Koch, J., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-02453197mtgabs/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-02453197mtgabs/meta</a>
2024	Vortrag auf Fachkonferenz	Towards the Prediction of Future Polarization Curves from Operating Data: Machine Learning-Based Investigations for Degradation Modelling of PEM Water Electrolysis Cells. In <i>Electrochemical Society Meeting Abstracts prime2024</i> (No. 45, pp. 3160-3160). The Electrochemical Society, Inc..	Woelke, J. P., Rex, A., Eckert, C., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-02453160mtgabs/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-02453160mtgabs/meta</a>
2024	Vortrag auf Fachkonferenz	Modeling the Metal Poisoning of PEM Water Electrolyzers. In <i>Electrochemical Society Meeting Abstracts prime2024</i> (No. 45, pp. 3190-3190). The Electrochemical Society, Inc..	Trinke, P., Gottschalk, T., Eckert, C., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-02453190mtgabs/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2024-02453190mtgabs/meta</a>
2025	Vortrag auf Fachkonferenz	Reversible Performance Recovery in PEM Water Electrolysis: Insights from Electrochemical Analysis and Time-Resolved AP-XPS. In <i>Electrochemical Society Meeting Abstracts 248</i> (No. 42, pp. 2126-2126). The Electrochemical Society, Inc..	Rex, A., Hamlyn, R., Crumlin, E. J., Rajan, Z. S., Mohamed, R., Trinke, P., ... & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2025-02422126mtgabs/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2025-02422126mtgabs/meta</a>

2022	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Hydrogen crossover in PEM water electrolysis at current densities up to 10 A cm <sup>-2</sup> . <i>Journal of The Electrochemical Society</i> , 169(9), 094507.	Martin, A., Trinke, P., Bensmann, B., & Hanke- Rauschenbach , R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ac908c/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ac908c/meta</a>
2021	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Communication—Proving the importance of Pt-interlayer position in PEMWE membranes for the effective reduction of the anodic hydrogen content. <i>Journal of The Electrochemical Society</i> , 168(9), 094509.	Martin, A., Abbas, D., Trinke, P., Böhm, T., Bierling, M., Bensmann, B., ... & Hanke- Rauschenbach , R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ac275b">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ac275b</a>
2022	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	An engineering perspective on the future role of modelling in proton exchange membrane water electrolysis development. <i>Current Opinion in Chemical Engineering</i> , 36, 100829.	Bensmann, B., Rex, A., & Hanke- Rauschenbach , R.	<a href="https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S211339822000399?casa_token=OTOQPwhhQYAAAAA:v16RtKkTr1xFgbJto7qtkN1x8m-D5PphCu4tB8hW89rRfn6I0mI00mdBonnYoKGWgC1UPIiEGg">https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S211339822000399?casa_token=OTOQPwhhQYAAAAA:v16RtKkTr1xFgbJto7qtkN1x8m-D5PphCu4tB8hW89rRfn6I0mI00mdBonnYoKGWgC1UPIiEGg</a>
2024	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Elemental Distribution in Catalyst-Coated Membranes of Proton Exchange Membrane Water Electrolysers Tracked by Synchrotron X-Ray Fluorescence. <i>Advanced Energy and Sustainability Research</i> , 5(9), 2400048.	Rex, A., Almeida De Campos, L., Gottschalk, T., Ferreira Sanchez, D., Trinke, P., Czioska, S., ... & Sheppard, T. L. (2024).	<a href="https://advanced.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/aesr.202400048">https://advanced.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/aesr.202400048</a>

2024	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Current interrupt technique to fully characterize PEMWE cells. <i>Journal of The Electrochemical Society</i> , 171(3), 034509.	Krenz, T., Gottschalk, T., Helmers, L., Trinke, P., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ad3057/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ad3057/meta</a>
2024	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Reversible degradation phenomenon in PEMWE cells: An experimental and modeling study. <i>Journal of The Electrochemical Society</i> , 171(12), 124501.	Krenz, T., Rex, A., Helmers, L., Trinke, P., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ad96e4/meta">https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ad96e4/meta</a>
2024	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Machine learning in proton exchange membrane water electrolysis – A knowledge-integrated framework. <i>Applied Energy</i> , 371, 123550.	Chen, X., Rex, A., Woelke, J., Eckert, C., Bensmann, B., Hanke-Rauschenbach, R., & Geyer, P.	<a href="https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261924009334">https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261924009334</a>
2025	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Degradation of PGM and PGM-free coatings on PEMWE porous transport layers. <i>ACS Applied Materials &amp; Interfaces</i> , 17(12), 19070-19085.	Stein, L., Dittrich, A., Walter, D. C., Trinke, P., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acami.4c22455">https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acami.4c22455</a>
2025	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Predicting future polarization curves from operating data: Machine learning-based investigation of degradation modeling concepts for PEM water electrolysis. <i>Energy and AI</i> , 21, 100547.	Woelke, J., Rex, A., Eckert, C., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R.	<a href="https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666546825000795">https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666546825000795</a>

In Vorbereitung	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Time-Resolved Performance and Stability of Different Gas Recombination Catalysts in PEM Water Electrolysis.	Steffen Brundiers, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach et al.	-
In Vorbereitung	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Reversible Performance Recovery in PEM Water Electrolysis: Insights from Electrochemical Analysis and Time-Resolved AP-XPS.	Alexander Rex, Patrick Trinke, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach et al.	-
In Vorbereitung	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Reversible Performance Dynamics in PEM Water Electrolysis: An Electrochemical Study with Reference Electrode Setup.	Alexander Rex, Patrick Trinke, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach et al.	-
In Vorbereitung	Publikation in wissenschaftlicher Fachzeitschrift	Assessment of accelerated stress test protocols for PEM water electrolysis.	Boris Bensmann et al. (together with partners of IEA Annex group)	-

## 7. Anhang

**Tabelle A1.** Übersicht ausgewählter Analytikmethoden zur Katalysatorcharakterisierung mit Prüfbedingungen, Probenvorbereitung und Kenngrößen (KPIs)

Test Method	Testing Conditions	Conditioning Procedure	KPIs
<b>X-ray Diffraction (XRD)</b>	Ambient to high temperatures (up to 900°C for advanced equipment).	Samples finely ground and pressed onto a flat holder.	Crystallographic phases, catalyst crystal structure, phase purity.
<b>Transmission Electron Microscopy (TEM)</b>	Ultra-high vacuum to prevent contamination.	Thin sections or dispersion on thin film; electron-transparent.	Nanoscale images, catalyst nanoparticle size, distribution, lattice spacing.
<b>X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS)</b>	Ultra-high vacuum to prevent molecular interference.	Cleaned samples placed on holder in vacuum chamber.	Elemental composition, chemical state, electronic state of elements.
<b>Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (ICP-MS)</b>	Plasma temperatures between 6,000°C to 10,000°C.	Solution samples introduced via a nebulizer & spray chamber.	Trace metal concentrations (down to ppt), catalyst metal concentration.
<b>Electrochemical Techniques</b>	Varies based on technique (e.g., cyclic voltammetry).	Electrolyte mimicking PEM conditions; electrode cleaning.	Catalyst activity, stability, oxidation/reduction potentials.
<b>Rotating Disk Electrode &amp; Rotating Ring-Disk Electrode (RDE &amp; RRDE)</b>	Controlled rotation speeds to influence mass transfer.	Electrolyte mimicking PEM conditions; electrode cleaning.	Catalyst kinetics for reactions like water splitting, electron transfer rates.
<b>Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR)</b>	Ambient conditions, using infrared light.	Polymer membrane samples prepared as thin films.	Identification of functional groups, chemical bond characterization.
<b>Thermogravimetric Analysis (TGA)</b>	Inert atmosphere, temperature ramps typically from room temperature to 600-1000°C.	Sample is weighed and heated under controlled conditions.	Thermal stability, weight loss as a function of temperature, decomposition temperature.

<b>Impedance Spectroscopy</b>	Varied frequencies, often from mHz to MHz range.	Sample prepared under electrolysis conditions.	Membrane resistance, charge transfer resistance, electrolyte conductivity.
<b>Brunauer–Emmett–Teller (BET) Theory</b>	Low temperatures (typically liquid nitrogen temperature, -196°C).	Degassing of samples to remove moisture and contaminants.	Surface area calculations, pore size distribution, pore volume.
<b>Scanning Electron Microscopy (SEM)</b>	Vacuum conditions to prevent electron scattering.	Samples coated with a conductive layer if non-conductive.	Morphology, topography, elemental composition with Energy Dispersive Spectroscopy (EDS).
<b>Flow Tests</b>	Ambient temperature.	Gas diffusion layers prepared and mounted in test rig.	Liquid and gas permeability, flow resistances.
<b>Atomic Force Microscopy (AFM)</b>	Ambient conditions; tip-sample interaction tracking.	Cleaned samples placed on a stable platform; often requires minimal prep.	Nanoscale topography, surface roughness, mechanical properties.
<b>Polarization Curves</b>	PEMWE operating conditions; varied voltages.	Set conditions like temperature, flow rates of water.	Voltage vs. current density, overpotential, efficiency metrics.
<b>Performance Characteristics</b>	Actual operating conditions of the intended device.	Varied flow rates, cell temperature controlled.	Peak efficiency, maximum power output, performance degradation.
<b>Lifetime Tests</b>	Continuous operation, long durations.	Setup to mimic long-term operation; periodic measurements.	Long-term stability, degradation rate, failure modes.
<b>Gas Analysis</b>	Gas stream analysis.	Collection of gas outlet streams over time.	Oxygen and hydrogen production rates, gas purity, impurities detection.