

## Working Group on Energy Arbeitskreis Energie (AKE)

Hardo Bruhns  
Meliesallee 5  
40597 Düsseldorf  
ake@bruhns.info

### Overview of Invited Talks and Sessions (Lecture halls DÜL)

#### Invited Talks

AKE 1.1	Mon	11:00–11:30	DÜL	<b>Geothermal Energy: Risks and benefits in utilizing fluids from the deep underground</b> — ●SIMONA REGENSPURG, ERNST HUENGES
AKE 2.1	Mon	11:30–12:00	DÜL	<b>New synthetic fuels: e-Methanol and its business cases</b> — ●IRENEUSZ PYC
AKE 3.1	Mon	12:15–12:45	DÜL	<b>NOx und andere luftverunreinigende Stoffe in der Außenluft und in Innenräumen: Ursachen und Wirkung</b> — ●TUNGA SALTHAMMER
AKE 4.1	Mon	15:00–15:30	DÜL	<b>Highly Efficient Monolithic Tandem Devices with Perovskite Top Cells</b> — ●STEVE ALBRECHT
AKE 5.1	Mon	16:45–17:15	DÜL	<b>Limits to wind energy: From the physical basis to practical implications</b> — ●AXEL KLEIDON
AKE 7.1	Tue	9:30–10:00	DÜL	<b>Zur Energiewende: Zweispeicher-Modell und Pumpspeicherkraftwerke im aufgelassenen Tagebauloch</b> — ●GERHARD LUTHER, HORST SCHMIDT-BÖCKING
AKE 8.1	Tue	11:15–11:45	DÜL	<b>Bioenergy: Chances and Pitfalls</b> — ●KATJA BÜHLER
AKE 9.1	Tue	11:45–12:15	DÜL	<b>DESERTEC 3.0: Grüne Elektronen und grüner Wasserstoff aus der Wüste</b> — ●MICHAEL DÜREN, JOHANNES HAMPP
AKE 10.1	Tue	14:00–14:30	DÜL	<b>Elektrische Energiespeicherung mit Flüssigmetallen und Salzschnmelzen</b> — ●TOM WEIER, GERRIT M. HORSTMANN, STEFFEN LANDGRAF, MICHAEL NIMTZ, PAOLO PERSONNETTAZ, FRANK STEFANI, NORBERT WEBER
AKE 10.2	Tue	14:30–15:00	DÜL	<b>Einsatz bildgebender Messverfahren und numerischer Modellierungswerkzeuge für die Verbesserung der Energieeffizienz industrieller Mehrphasenprozesse</b> — ●UWE HAMPEL
AKE 11.1	Tue	15:00–15:30	DÜL	<b>Nukleare Entsorgung im Kontext der internationalen Nutzung der Kernenergie</b> — ●THORSTEN STUMPF
AKE 12.1	Wed	15:00–15:30	DÜL	<b>Nuclear fusion on the way to ITER and beyond</b> — ●ELISABETH WOLFRUM, THE ASDEX UPGRADE TEAM
AKE 12.2	Wed	15:30–16:00	DÜL	<b>Hochbelastbare Materialien für die Kernfusion: Entwicklungen und Perspektiven</b> — ●CHRISTIAN LINSMEIER
AKE 13.1	Wed	16:00–16:30	DÜL	<b>Digitale Herausforderungen für das Energiesystem der Zukunft</b> — ●HUBERT KELLER

#### Invited talks of the joint symposium climate and energy: Challenges and options from a physics perspective (SYCE)

Wednesday	9:30–12:15	HSZ 02	See SYCE for the full program of the symposium.
SYCE 1.1	Wed	9:30–10:00	HSZ 02 <b>Towards a carbon-free energy system: Expectations from R&amp;D in renewable energy technologies</b> — ●BERND RECH, RUTGER SCHLATTMANN
SYCE 1.2	Wed	10:00–10:30	HSZ 02 <b>Decarbonizing the Heating Sector - Challenges and Solutions</b> — ●FLORIAN WEISER

SYCE 1.3	Wed	10:30–11:00	HSZ 02	<b>The challenge of anthropogenic climate change - Earth system analysis can guide climate mitigation policy</b> — ●MATTHIAS HOFMANN
SYCE 1.4	Wed	11:15–11:45	HSZ 02	<b>A carbon-free Energy System in 2050: Modelling the Energy Transition</b> — ●CHRISTOPH KOST, PHILIP STERCHELE, HANS-MARTIN HENNING
SYCE 1.5	Wed	11:45–12:15	HSZ 02	<b>The transition of the electricity system to 100% renewable energy: agent-based modeling of investment decisions under climate policies</b> — ●KRISTIAN LINDGREN

## Sessions

AKE 1.1–1.1	Mon	11:00–11:30	DÜL	<b>Renewable Energy - Geothermal Energy</b>
AKE 2.1–2.2	Mon	11:30–12:15	DÜL	<b>Transport - Climate-neutral Synthetic Fuels</b>
AKE 3.1–3.1	Mon	12:15–12:45	DÜL	<b>Environmental Aspects: Emission and Immission</b>
AKE 4.1–4.5	Mon	15:00–16:45	DÜL	<b>Renewable Energy - Photovoltaics and Electronic Processes</b>
AKE 5.1–5.1	Mon	16:45–17:15	DÜL	<b>Renewable Energy - Wind Energy</b>
AKE 6.1–6.1	Mon	17:15–17:45	DÜL	<b>Climatic Response to Emission Scenarios</b>
AKE 7.1–7.5	Tue	9:30–11:15	DÜL	<b>Energy Storage; Batteries, Systems Modelling</b>
AKE 8.1–8.1	Tue	11:15–11:45	DÜL	<b>Renewable Energy - Unconventional Bio Energy</b>
AKE 9.1–9.3	Tue	11:45–12:45	DÜL	<b>Renewable Energy - Solar Energy</b>
AKE 10.1–10.2	Tue	14:00–15:00	DÜL	<b>Energy Storage and Industrial Processes</b>
AKE 11.1–11.1	Tue	15:00–15:30	DÜL	<b>Nuclear Energy, Waste Management</b>
AKE 12.1–12.2	Wed	15:00–16:00	DÜL	<b>Nuclear Fusion</b>
AKE 13.1–13.2	Wed	16:00–16:45	DÜL	<b>Cyber Aspects in future Energy Systems</b>

## AKE 1: Renewable Energy - Geothermal Energy

Time: Monday 11:00–11:30

Location: DÜL

### Invited Talk

AKE 1.1 Mon 11:00 DÜL

**Geothermal Energy: Risks and benefits in utilizing fluids from the deep underground** — ●SIMONA REGENSPURG and ERNST HUENGENS — Helmholtz Centre Potsdam GFZ German Research Centre for Geosciences Section 4.8 Geoenergy Telegrafenberg, D-14473 Potsdam, Germany

Within the geothermal fluid loop, formation water is pumped from a deep reservoir through the production well to the surface, where the heat is extracted and used for heating or electricity production. The cooled fluid is injected into another well back into the reservoir. The geological formations that are suitable for geothermal energy exploitation need to show two main characteristics: High temperature and high permeability. Typically geothermal energy is exploited in areas

with high geothermal gradient which are mainly located along tectonic plate boundaries. However, nowadays, the exploitable geothermal resources are found throughout the world and are utilized in 83 countries. Because of the lower temperatures in German geothermal plants, here most geothermal wells provide heat (about 1.49 GWh/a; source: www.Geotis.de). One of the main challenges when operating a geothermal plant is the correct handling of the geothermal fluids that carry the heat from the deep reservoirs to the surface. The high salinity and high amount of dissolved gasses of formation waters results in a variety of chemical reactions during fluid processing such as mineral precipitation and corrosion. However, fluid chemistry is not only considered as a risk for operation but might represent also a benefit if the dissolved components are of economic values.

## AKE 2: Transport - Climate-neutral Synthetic Fuels

Time: Monday 11:30–12:15

Location: DÜL

### Invited Talk

AKE 2.1 Mon 11:30 DÜL

**New synthetic fuels: e-Methanol and its business cases** — ●IRENEUSZ PYC — Siemens Energy, 91058 Erlangen, Germany

The electricity-, mobility- and heating-sector contribute to global GHG emissions with 40%, 24%, 11% respectively. Especially last two sectors require fast and deep de-fossilization efforts. Electricity will play for short-distance transportation an increasing role. However, long-distance carriage via trucks, ships and aviation will rest upon chemical energy sources for decades. Methanol, as liquid energy carrier and a basic chemical offers multiple applications. It is easy to produce via proven synthesis. Methanol becomes "green", if produced from renewable electricity via H<sub>2</sub>O-electrolysis and CO<sub>2</sub> based synthesis, (e-methanol). The process is well understood, but not established on commercial scale yet. E-methanol shows large application-potential in blending of conventional gasoline, production of refinery additives, or in its further conversion to synthetic gasoline. Moreover, innovative catalysts and novel processes open opportunities to convert methanol to kerosene-, diesel- or other design fuels. 90% reduction of carbon footprint via e-methanol is achievable. Compared to bio-ethanol, lower carbon footprint and CO<sub>2</sub> avoidance costs are expected. Another advantage of methanol use is its far-reaching compatibility with existing infrastructure and established conversion and propulsion technologies. For the realization of e-methanol projects a positive business case is required. The decisive points for the economic production of e-methanol is the price of electricity, CAPEX of electrolysis, CO<sub>2</sub>-costs and favorable regulatory framework.

AKE 2.2 Mon 12:00 DÜL

**Eine künstliche Kohlenhydratversorgung auf der Erde?** — ●FLORIAN DINGER<sup>1,2</sup> und ULRICH PLATT<sup>1,2</sup> — <sup>1</sup>Institut für Umweltphysik, Uni Heidelberg — <sup>2</sup>Max Planck Institut für Chemie, Mainz

Wie kann eine steigende Weltbevölkerung auf sichere und nachhaltige Weise ernährt werden? Die konventionelle, biogene Landwirtschaft war bisher nicht in der Lage ein verlässliches Konzept bereitzustellen, das ohne schwerwiegende Umweltexternalitäten (z.B. die massive Nutzung von Landflächen, Wasser, Dünger, Pestizide, Herbizide, und fossiler Brennstoffe) auskommt. Im Vergleich dazu würde die künstliche Synthese von Kohlenhydraten aus atmosphärischem CO<sub>2</sub>, Wasser und erneuerbarer Energie nicht nur eine sichere Nahrungsmittelproduktion ermöglichen, die ohne jene Externalitäten auskommt, sondern außerdem eine Steigerung der landwirtschaftlichen Kapazitäten unseres Planeten um mehrere Größenordnungen erlauben. Alle benötigte Technologie ist kommerziell verfügbar oder zumindest auf Laborbasis entwickelt. Der heutige Spotmarktpreis für konventionellen Zucker liegt bei ~0.3€/kg. Mit Hinblick auf ökologische und sozioökonomische Externalitäten schätzen wir die Gesamtkosten der konventionellen Zuckerverzeugung auf ≥0.9€/kg in humiden Regionen und ≥2€/kg in semi-ariden Regionen. Wir schätzen die Produktionskosten für künstliche Glukose auf ~1€/kg, wodurch künstliche Glukose bereits heute wettbewerbsfähig zu sein scheint. Eine künstliche Zuckerherstellung ermöglicht im Prinzip auch die anschließende Synthese von anderen Kohlenhydraten (z.B. Stärke) und Fetten.

## AKE 3: Environmental Aspects: Emission and Immission

Time: Monday 12:15–12:45

Location: DÜL

### Invited Talk

AKE 3.1 Mon 12:15 DÜL

**NOx und andere luftverunreinigende Stoffe in der Außenluft und in Innenräumen: Ursachen und Wirkung** — ●TUNGA SALTHAMMER — Fraunhofer WKI, Bienroder Weg, 38108 Braunschweig

Regional gesehen wirken sich die derzeitigen klimatischen Veränderungen sehr unterschiedlich aus, da neben den Treibhausgasen auch die Freisetzung von Luftschadstoffen wie Partikel, Ozon und NO<sub>x</sub> eine wichtige Rolle spielt. Für die in Deutschland herrschenden Verhältnisse sind mögliche Auswirkungen des Klimawandels bereits recht gut untersucht. Umso mehr überrascht es, dass Aussagen zu den möglichen Konsequenzen für das im Innenraum herrschende Mikroklima bislang weitgehend fehlen. Aber auch im Innenraum selbst sind viele potentielle Quellen vorhanden, die zur Bildung von Partikeln und NO<sub>x</sub> führen.

Dies sind in der Regel diverse Verbrennungsprozesse, insbesondere Kerzen, Ethanolöfen, holzbefeuerte Öfen und nach wie vor das Rauchen. Ozon wird heute im Wesentlichen von Luftreinigern und andere elektrischen Geräten in die Raumluft freigesetzt. Darüber hinaus tragen die durch Reaktionen von NO<sub>x</sub> und Ozon mit ungesättigten Kohlenwasserstoffen entstehenden Abbauprodukte und gebildeten Nanopartikel ebenfalls zur Innenraumluftbelastung bei. Unter Berücksichtigung der Bildungsmechanismen von Partikeln, NO<sub>x</sub>, Ozon und weiterer luftverunreinigender Stoffe in Innen- und Außenluft, sowie unter Einbeziehung klimatischer Parameter, lassen sich zeitliche Trends analysieren und Annahmen über zukünftige Entwicklungen treffen, was ggf. Konsequenzen für Neu- und Bestandsbauten sowie für zukünftiges Wohnverhalten bedingt.

## AKE 4: Renewable Energy - Photovoltaics and Electronic Processes

Time: Monday 15:00–16:45

Location: DÜL

**Invited Talk**

AKE 4.1 Mon 15:00 DÜL

**Highly Efficient Monolithic Tandem Devices with Perovskite Top Cells** — ●STEVE ALBRECHT — Helmholtz-Center Berlin, Young Investigator Group Perovskite Tandem Solar Cells

Integrating metal halide perovskite top cells with crystalline silicon or CIGS bottom cells into monolithic tandem devices has recently attracted increased attention due to the high efficiency potential of these cell architectures. To further increase the tandem device performance to a level well above the best single junctions, optical and electrical optimizations as well as a detailed device understanding of this advanced tandem architecture need to be developed. In this talk, Prof. Albrecht will present the recent results on monolithic tandem combinations of perovskite with crystalline silicon and CIGS, as well as tandem relevant aspects of perovskite single junction solar cells. Finally, it will be shown how utilization of a self-assembled molecular monolayer (SAM) and fine tuning of the perovskite band gap in perovskite/silicon tandem solar cells further improved the efficiency to 27.5% and to 23.3% for perovskite/CIGS tandems, the latter being a certified world record efficiency.

AKE 4.2 Mon 15:30 DÜL

**Structural and Electronic Contributions of Organic/Inorganic Cations on Perovskite Solar Cells Band Gap** — ●MOHAMMAD MOADDELI and MANSOUR KANANI — Department of Materials Science and Engineering, School of Engineering, Shiraz University

New generation of organic/inorganic perovskite photovoltaics is becoming one of the main players for future solar technology, because of their lower cost and simplicity in synthesis process. The progress has facing various challenges in stability and efficiency since last decay. Many groups have developed appropriate experimental and computational methods to overcome those challenges by proposing different combination of organic and inorganic structures. However, lack of proper knowledge of background mechanisms governing electron transport phenomena via such elemental and molecular substitutions, is limiting developing of predictive models. We use modified density functional approach to investigate lattice parameter and long-range electronic effect of cations on band gap and electronic structure of different perovskites. Since no ionic/covalent bond is realized between cation and lead/halide, the van der Waals (vdW) field around cation controls lattice parameter and therefore the bonding length between lead and halide as well as its performance. Results show dominance of the former one for small lattice parameters while by increasing lattice parameter a correlative behavior of both is observed. This let us to draw a predictive approach for selecting organic (or even inorganic) cation for different structural combinations based on cation long range electronic field evaluation.

AKE 4.3 Mon 15:45 DÜL

**Topological semimetal YbMnSb<sub>2</sub> toward promising thermoelectric performance** — ●YU PAN<sup>1</sup>, CHENGUANG FU<sup>1</sup>, JEFFREY SNYDER<sup>2</sup>, and CLAUDIA FELSER<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Nöthnitzer Str. 40, 01187, Dresden, Germany — <sup>2</sup>Department of Materials Science and Engineering, Northwestern University, Evanston, IL 60208, USA

Topological semimetals have attracted a lot of interest due to their exotic properties induced by the topological band structure. However, little is known about the thermoelectric properties of these materials. With extremely high mobility and heavy elements induced low thermal conductivity, topological semimetals can be high-performing thermoelectric materials. In this work, we report the thermoelectric properties of topological semimetal YbMnSb<sub>2</sub> single crystal. A large

Seebeck coefficient of  $\sim 160 \mu\text{V}/\text{K}$  at 300 K is obtained and there is no evidence for large bipolar thermal conductivity. Moreover, topologically protected both in-plane resistivity ( $\sim 1 \text{ m}\Omega\cdot\text{cm}$ ) and cross-plane thermal conductivity ( $\sim 1.5 \text{ W}/\text{mK}$ ) at 300 K are very close to that of the state-of-the-art (Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> polycrystalline samples, implying YbMnSb<sub>2</sub> as promising thermoelectrics. Further enhancement of the thermoelectric performance relies on decreasing the in-plane thermal conductivity and/or the cross-plane resistivity. Taking YbMnSb<sub>2</sub> as an example, we clarify the potential of topological semimetals toward high thermoelectric performance.

AKE 4.4 Mon 16:00 DÜL

**Simultaneous CO<sub>2</sub> fixation and power generation using aqueous Al-CO<sub>2</sub> batteries** — ●PAN DING<sup>1</sup>, YANGUANG LI<sup>2</sup>, and IAN SHARP<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Walter Schottky Institut, TUM, Munich, Germany — <sup>2</sup>Institute of Functional Nano & Soft Materials, Suzhou, China

The energy crisis and excessive emission of CO<sub>2</sub> caused by the sharp depletion of fossil energy are two biggest challenges facing humanity. The capture and fixation of CO<sub>2</sub> by metal-CO<sub>2</sub> batteries have been proposed as \*killing two birds with one stone\* devices. Here, we reported that 2D Bi nanosheets could be prepared from cathodic conversion of Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> nanoribbons. It can enable the efficient and robust CO<sub>2</sub> reduction to formate at a peak FE of almost 100% (-0.59 V with an initial current density of up to  $\sim 208 \text{ mA}/\text{cm}^2$ ). Primary Al-CO<sub>2</sub> flow battery with Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> NRs exhibited high formate selectivity at the cathode during discharging. When working at a short-circuit state (0 V), the Al-CO<sub>2</sub> battery will transform into a CO<sub>2</sub> electrolyzer, and thus highly efficient electrochemical CO<sub>2</sub> conversion to formate is available in a power free manner. Moreover, when using recycled Al foils from beverage cans as the source of anode material and photocathodes, the electrochemical performance could be further enhanced in a hybrid solar-driven AlCO<sub>2</sub> battery. Therefore, it provides a new solution to electrochemical fixation and utilization of CO<sub>2</sub> in a low-cost and green way.

AKE 4.5 Mon 16:15 DÜL

**Impact of Interface Roughness on Thermal Transport in Half-Heusler Superlattices** — ●SVEN HEINZ<sup>1,2</sup> and GERHARD JAKOB<sup>1,2</sup> — <sup>1</sup>Institut für Physik, Uni Mainz, Deutschland — <sup>2</sup>Graduate School of Excellence MAINZ, Mainz, Deutschland

In periodic multilayer structures a large portion of heat can be transported by so called "coherent" phonons [1]. The periodic multilayer structure leads to the formation of stop-bands: certain wavelength bands are suppressed for phonon transport, thereby potentially reducing thermal conductivity [2]. For these effects to be observed, the roughness of the interfaces has to be as low as possible [2].

Investigations will be presented on multilayer structures, in which the interface quality is purposefully deteriorated in part of the sample series by introducing an artificial intermixing layer. This is done by altering the layer sequence from ABAB to ACBCACBC, where C is a mixture of Material A and B. The thin intermixing layer simulates an increased interface roughness, thus destroying coherent transport. Additionally, the intermixing layer can act as a transition layer, lowering the acoustic contrast between the main layers A and B, acting as a so-called phonon bridge [3]. Both effects are discussed in the presentation.

[1] M.N. Luckyanova et al., Science 338 (2012) 936-939.

[2] M. Maldovan, Nat. Mater. 14 (2015) 667-674.

[3] P. Chakraborty et al., Sci. Rep. 7 (2017) 1-8.

**15 Minutes Coffee Break**

## AKE 5: Renewable Energy - Wind Energy

Time: Monday 16:45–17:15

Location: DÜL

### Invited Talk

AKE 5.1 Mon 16:45 DÜL

**Limits to wind energy: From the physical basis to practical implications** — ●AXEL KLEIDON — Max-Planck-Institut für Biogeochemie, Jena

Wind energy plays an increasing role in the transition to a carbon-free sustainable energy system. In this talk, I first use thermodynamics to describe how and how much wind energy is generated by the atmosphere from differences in radiative heating. I then show that only a fraction of the kinetic energy can at best be used as renewable energy

because the more wind turbines draw energy from the atmosphere at the regional scale, the lower the wind speeds, thus lowering power output and efficiencies of wind turbines. This results in much lower wind power potentials of about 0.5 Watt per square meter of surface area at the regional scale than estimates that are based on observed wind fields and that neglect the effects that wind turbines have on the atmosphere. I demonstrate the practical implications of this Earth system approach to wind energy by re-evaluating German energy scenarios for the year 2050, which rely on a substantial fraction of offshore wind energy.

## AKE 6: Climatic Response to Emission Scenarios

Time: Monday 17:15–17:45

Location: DÜL

### Topical Talk

AKE 6.1 Mon 17:15 DÜL

**How soon would we see a benefit from emissions reduction?** — ●SEBASTIAN MILINSKI — Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg

When do we expect to see a response in the climate system after a reduction of greenhouse-gas emissions? In this presentation I will introduce how we can use state-of-the-art global climate models to investigate when and how the global mean surface temperature responds in a mitigation scenario where emissions are reduced, compared to a

non-mitigation scenario where emissions continue to grow.

Determining the time when a benefit from emissions reduction can be detected is mainly affected by two sources of uncertainty: quasi-random internal variability and disagreement between different climate models. While internal variability dominates the uncertainty in the short-term, model response uncertainty dominates in the mid- and long-term. I will separate and quantify the contribution from each source of uncertainty to arrive at an estimate for how soon we could expect to see a benefit from a reduction of greenhouse-gas emissions.

## AKE 7: Energy Storage; Batteries, Systems Modelling

Time: Tuesday 9:30–11:15

Location: DÜL

### Invited Talk

AKE 7.1 Tue 9:30 DÜL

**Zur Energiewende: Zweispeicher-Modell und Pumpspeicherkraftwerke im aufgelassenen Tagebauloch** — ●GERHARD LUTHER<sup>1</sup> und HORST SCHMIDT-BÖCKING<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Universität des Saarlandes, Saarbrücken, Experimentalphysik, F.St. Zukunftsenergie — <sup>2</sup>Universität Frankfurt/Main, Institut für Kernphysik

Die \*Energiewende\* umfasst die nahezu vollständige Abdeckung der elektrischen Stromversorgung durch regenerative Energien (RE) und hier vor allem durch Wind und Photovoltaik (PV). Wegen des durch Wetter und Astronomie bedingten ungleichmäßigen Dargebotes der RE lässt sie sich nur mit dem Einsatz von Speichern durchführen. Das Speicherproblem in Deutschland wurde durch eine Kombination von Kurz- und Langzeitspeichern mit dem \*Zwei-Speichermodell\* modelliert. Es ergab sich, dass eine Kapazität des Kurzzeitspeichers von nur 0,20 bis 0,30 Volllasttage für Deutschland ausreicht.

Es wird ein Vorschlag gemacht, wie man diese Speicherkapazität durch geeignete Nachnutzung aufgelassener Tagebaulöcher bereitstellen kann, indem man den Rekultivierungs-Restsee sowohl als Ober- als auch als Unterbecken einer großen Pumpspeicherkraftwerksanlage einsetzt.

AKE 7.2 Tue 10:00 DÜL

**Modelling of crystalline and Amorphous Sulfide Solid Electrolytes** — ●MARCEL SADOWSKI and KARSTEN ALBE — TU Darmstadt, 64287 Darmstadt, Germany

Solid electrolytes (SE) are key to the facilitation of lithium all-solid-state batteries that exhibit improved safety compared to common lithium ion batteries with liquid organic electrolytes. Among the different material classes sulfide SE impress with high ionic conductivities in the range of 10 mS/cm which makes them promising candidates for high-power applications. Several issues, however, still need to be overcome. Therefore, a deeper understanding of structure-property relationships is necessary.

We have applied density functional theory (DFT) calculations and investigated the crystalline argyrodite-type superionic conductor Li<sub>6</sub>PS<sub>5</sub>Br, where anion disorder on the Br<sup>1-</sup> and S<sup>2-</sup> sites increases the ionic conductivity by several orders of magnitude. Using ab-initio molecular dynamics (AIMD) simulations we could verify that the increase is directly related to the disorder.

Another important issue with sulfide SE are amorphous side phases. Therefore, we have generated amorphous structure models at various compositions within (Li<sub>2</sub>S)<sub>x</sub>-(P<sub>2</sub>S<sub>5</sub>)<sub>1-x</sub> (0.67 < x < 0.75) and under S-deficient conditions. We will show that relative stabilities of the glasses compared to the crystalline phases is linked to the underlying structural units PS<sub>4</sub><sup>3-</sup>, P<sub>2</sub>S<sub>7</sub><sup>4-</sup> and P<sub>2</sub>S<sub>6</sub><sup>4-</sup> and present transport properties of the glasses which are helpful in the interpretation of experimental transport measurements.

AKE 7.3 Tue 10:15 DÜL

**Fluctuating Capacitance in Supercapacitors with curved graphitic Electrodes** — ●JANNES SEEBECK<sup>1</sup> and ROBERT MEISSNER<sup>1,2</sup> — <sup>1</sup>Institute of Polymer and Composites, Hamburg University of Technology, Denickestraße 15, 21073 Hamburg, Germany — <sup>2</sup>Magnesium Innovation Centre MagIC, Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Germany

Supercapacitors are promising storage devices for electrical energy, which storage performance based on a reversible ion adsorption by forming an electric double layer on the electrode surface. Using molecular dynamic (MD) simulations, insights into the molecular mechanisms of forming electric double layers and the influence of curved electrodes with varying connected concave and convex parts on the differential capacitance can be obtained. By using the Ewald sum for the calculation of the electrical potential and the potential drop, the differential capacitance for more complex electrode geometries can be determined. This results in capacitance fluctuations with respect to the curvature radius of the separate treated convex and concave parts. Simulations showed a preferential orientation of the adsorbed cations depending on the curvature radius, which can be an explanation for the fluctuating capacitance. By determining the differential capacitance using the free energy approach, it becomes clear that there is also a non-linear dependence between the capacitance, the orientation angles of cations in the double layer and the applied voltage. In this context, design criteria for electrode surfaces, e.g., a favorable mean curvature radius for a specific organic electrolyte, can be developed.

AKE 7.4 Tue 10:30 DÜL

**Grobe Modellierung einer solaren Stromerzeugung in Nordafrika mit Kopplung zur deutschen Stromversorgung im**

**Zwei-Speicher-Modell** — •KEVIN RAINER BIERINGER und GERHARD LUTHER — Forschungsstelle Zukunftsenergie, Experimentalphysik, Universität des Saarlandes, D-66123 Saarbrücken

Nach der vollendeten Energiewende wird die Stromversorgung Deutschlands vor allem auf Windkraft und Photovoltaik aufgebaut sein. Unter Zuhilfenahme einer Speicherstruktur aus Kurz- und Langzeitspeichern kann der Verbrauch jederzeit gedeckt werden („Zwei-Speicher-Modell“). Die Potentiale der Solarkraft sind aber v. a. in sonnenreichen Regionen wie der Wüste Nordafrikas immens. Mit Hilfe eines stochastischen Verfahrens wird die Sonneneinstrahlung in Nordafrika modelliert und daraus eine zeitliche Stromerzeugungsstruktur synthetisiert. Es werden Überlegungen angestellt, dieses Potential auch für die deutsche Stromversorgung zu nutzen. Dazu wird das für Deutschland bestehende Zwei-Speicher-Modell auf eine Kopplung mit Nordafrika erweitert und die gegenseitigen Chancen und Vorteile untersucht. Durch eine systematische Untersuchung der Solarstromerzeugung als alleinige regenerative Stromquelle in Nordafrika kann eine geeignete Struktur aus Kurz- und Langzeitspeichern im Zwei-Speicher-Modell abgeleitet werden. Dabei zeigen sich vielversprechende Erkenntnisse in Hinblick auf eine Kopplung der nordafrikanischen und deutschen Stromversorgung über eine HGÜ-Leitung.

Link zur Originalarbeit in: [www.fze.uni-saarland.de/Speicher.htm](http://www.fze.uni-saarland.de/Speicher.htm)

AKE 7.5 Tue 10:45 DÜL

**Exploring future energy systems with open models** — TOM BROWN<sup>1</sup>, MICHAEL DÜREN<sup>2,3</sup>, and •JOHANNES HAMPP<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Institute for Automation and Applied Informatics, Karlsruhe Institute of Technology — <sup>2</sup>Center for international Development and Environmental Research, Justus Liebig University Giessen — <sup>3</sup>II. Phys. Inst., Justus Liebig University Giessen

Computer models of energy systems allow to explore possible configurations of future energy systems. The field of energy system models was previously only accessible to a few research groups with sufficient resources. Over the last decade the field has opened up significantly. It thus became accessible to a wider range of scientists and even the public. This creates learning opportunities regarding the challenges and consequences of various technologies in future energy systems. Using the openly accessible electricity system model for Europe (“PyPSA-Eur”), we explore a future scenario of transforming the German lignite mines in the region of Hambach into a large Pumped Hydro Storage facility. We discuss its impact on the German and European electricity system and further technology options for an electricity system based on high shares of renewable energies to achieve a 95% CO<sub>2</sub> reduction target by 2050.

15 Minutes Coffee Break

## AKE 8: Renewable Energy - Unconventional Bio Energy

Time: Tuesday 11:15–11:45

Location: DÜL

### Invited Talk

AKE 8.1 Tue 11:15 DÜL

**Bioenergy: Chances and Pitfalls** — •KATJA BÜHLER — Helmholtz Center for Environmental Research, Leipzig, Germany

In times of climate change and severe pressure on the natural resources of our planet bioenergy is a very controversial discussed topic. Bioenergy covers a broad field, reaching from the production of biofuels like ethanol and diesel from crop-based sugars, to the conversion of lignocellulose and microalgae. All mentioned approaches rely on the exploitation of biomass for energy production. Although significant progress was achieved in those technologies in recent years, biofuels still have problems to become established in the market. One reason

certainly is the current low oil price which is a negative incentive for this technology. However, another major point in this discussion is the environmental footprint of bioenergy. Issues connected to land use, low efficiencies, tedious product isolation and the low energy return of invest make it questionable whether bioenergy in its current form is able to make a contribution to sustainable, CO<sub>2</sub>-neutral energy production. This presentation will lead through the different generations of bioenergy, discussing potentials and drawbacks. The focus will be on the so-called fourth-generation fuels, for which microorganisms are utilized as light-driven cell factories for fuel production directly from carbon dioxide, in my opinion the only concept with the chance to become a true bioenergy technology one day.

## AKE 9: Renewable Energy - Solar Energy

Time: Tuesday 11:45–12:45

Location: DÜL

### Invited Talk

AKE 9.1 Tue 11:45 DÜL

**DESERTEC 3.0: Grüne Elektronen und grüner Wasserstoff aus der Wüste** — •MICHAEL DÜREN<sup>1,2</sup> und JOHANNES HAMPP<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Center for international Development and Environmental Research, Justus Liebig University Giessen — <sup>2</sup>II. Phys. Inst., Justus Liebig University Giessen

Als im Jahr 2009 die DESERTEC Industrie Initiative (Dii) gegründet wurde, waren die Erwartungen groß, dass die beteiligten Großkonzerne und Banken mit viel Geld die Energiewende anstoßen, und durch den Bau von Solarkraftwerken in den südlichen Anrainerstaaten des Mittelmeers nicht nur Solarstrom in großem Stil nach Europa bringen werden, sondern auch durch Schaffung von Arbeitsplätzen im Süden den Migrationsdruck und das Wohlstandsgefälle reduzieren werden. Die Wirtschafts- und Eurokrise und die Veränderungen durch den Arabische Frühling waren zwei der Faktoren, warum viele der weitgehend deutschen Firmen DESERTEC damals verlassen haben. Heute, 10 Jahre später, hat sich die Welt verändert. Der Druck zur Dekarbonisierung der Energiewirtschaft ist größer und die Solarenergie aus den Wüsten ist günstiger geworden als jede andere Energieform. Die Kostenreduktion bei der Erzeugung und dem Transport von Wasserstoff eröffnet Möglichkeiten zum globalen Handel mit erneuerbaren Energien. Neue Konsortien mit Akteuren aus China und aus arabischen Ländern sitzen in den Startlöchern für die Vorbereitungen einer echten Energiewende.

AKE 9.2 Tue 12:15 DÜL

**Entwicklung von konzentrierenden Solarsystemen für solare Photobioreaktoren der nächsten Generation** — •MARKUS SAU-

ERBORN und JOACHIM GÖTTSCHE — Solar-Institut Jülich, FH Aachen, Heinrich-Mußmann-Str. 5, D-52428 Jülich

Im Projekt AlgNutrient werden für Mikroalgen solare Photobioreaktorsysteme der nächsten Generation entwickelt. Das SIJ kooperiert hierzu mit drei Instituten für Pflanzenkunde: dem IGB-2 des FZJ sowie den Moskauer Instituten dem Bioengineering Department der Lomonosov University und dem Kurchatov Institute. Dazu wird ein optimierter, abgeschlossener Bioreaktor über ein konzentrierendes Solarsystem mit Sonnenlicht versorgt. Durch spektrale Aufspaltung des fokussierten Solarstrahls wird der von den Algen nicht verwertbare, sichtbare und nahinfrarote Anteil des Sonnenlichtes auf PV-Zellen umgeleitet, die diese noch nutzen können. Das Gesamtsystem wird damit nicht nur energetisch autark, sondern kann sogar Strom für die Netzeinspeisung bereitstellen.

Die Auswahl der Mikroalgen können für verschiedene Ziele optimiert werden, z.B. für Abwasserreinigung oder Biokraftstoffherstellung. Besonders vielversprechend ist hier, dass bei der Züchtung von Algenbiomasse spezielle Algen aus Zivilisationsabwässern unter konzentriertem CO<sub>2</sub> effektiv Nährstoffe gewinnen können. Im Projekt soll in der Biomasse exemplarisch Phosphat als landwirtschaftliches Düngemittel angereichert werden.

Am SIJ wurde für das Projekt ein geeignetes Fresnel-Solarsystem konzipiert, dass im Photobioreaktor über Lichtverteiler für eine gleichmäßige Bestrahlung der Algen sorgt. Diese vorgestellte, komplexe Solarsystemkombination wird aktuell für die Marktreife weiterentwickelt.

AKE 9.3 Tue 12:30 DÜL

**Volatility of solar-wind power** — ●HANS LUSTFELD — Peter Grünberg Institut (PGI-1), Forschungszentrum Jülich GmbH, D-52425 Jülich, Germany

Solar-wind power presents an alternative to conventional power generation. Its advantage is the CO<sub>2</sub> free power generation making it superior not only to coal and oil power plants but to gas power plants as well. Its main disadvantage is its volatility. According to the estimates of H.-W. Sinn suppressing the volatility requires storage plants with an electric capacity, several orders of magnitude larger than the present available capacity in Germany[1]. This result leads to the conclusion

that solar-wind power can be used only together with conventional power plants in the background - removing the principal attraction of solar-wind power.

I think that the estimates presented in [1] are too strict. To show this I shall discuss the storage requirements as a function of solar-wind power, I shall point out the importance of smart meters and present calculations for two cases: i) all electric power generation in Germany is obtained from solar-wind power alone, ii) in addition all energy for transport, warm water, space heating and partly for process heating is obtained exclusively from solar-wind power as well.

[1]H.-W. Sinn, European Economic Review 99, 130 (2017)

## AKE 10: Energy Storage and Industrial Processes

Time: Tuesday 14:00–15:00

Location: DÜL

**Invited Talk** AKE 10.1 Tue 14:00 DÜL  
**Elektrische Energiespeicherung mit Flüssigmetallen und Salzschnmelzen** — ●TOM WEIER, GERRIT M. HORSTMANN, STEFFEN LANDGRAF, MICHAEL NIMTZ, PAOLO PERSONNETTAZ, FRANK STEFANI und NORBERT WEBER — Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf, Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden, Deutschland

Stationäre Elektroenergiespeicher können helfen, momentane Differenzen von Elektrizitätsangebot und -nachfrage zu balancieren. Mit zunehmender Nutzung volatiler Stromquellen wird diese Aufgabe wichtiger. Dabei stehen verschiedene Speichertechnologien untereinander, aber auch mit Alternativen im Wettbewerb.

Flüssigmetallbatterien sind Hochtemperaturspeicher. Sie basieren auf der stabilen Dichteschichtung eines Alkalimetalls, einer Salzschnmelze und eines Schwermetalls. Vermittelt durch die hohe Betriebstemperatur, die über den Schmelztemperaturen der einzelnen Phasen liegen muss, verlaufen Grenzflächenreaktionen und Transportvorgänge sehr rasch, was in hohen Strom- und Leistungsdichten resultiert. Der vollständig flüssige Zellinhalt ermöglicht einerseits eine konzeptionell einfache Skalierbarkeit auf Zellebene, die sehr günstige energiebezogene Investitionskosten verspricht. Andererseits gewinnen durch den flüssigen Aggregatzustand strömungsmechanische Vorgänge, die eng an den Ladungstransport und -übergang gekoppelt sind, stark an Bedeutung.

Der Vortrag wird sowohl ausgewählte physikalische Phänomene in Flüssigmetallbatterien vorstellen, als auch ihre mögliche Rolle in einem zukünftigen Energiesystem diskutieren.

**Einsatz bildgebender Messverfahren und numerischer Modellierungswerkzeuge für die Verbesserung der Energieeffizienz industrieller Mehrphasenprozesse** — ●ÜWE HAMPEL — Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden, Germany — Technische Universität Dresden, 01062 Dresden, Germany

Stoff- und Energieumwandlungsprozesse in technischen Apparaten sind oft an Mehrphasenströmungen gekoppelt. Beispiele dafür sind Chemiereaktoren, Stoffaustauschapparate, Kraftwerksanlagen oder Abwasserbehandlungsanlagen. Für die Modellierung der Strömungsvorgänge wurden in der jüngeren Vergangenheit numerische Berechnungsverfahren der Computational Fluid Dynamics entwickelt. Für diese besteht immer wieder die Aufgabe, sie mit realen Messdaten aus Strömungsexperimenten unter prozessähnlichen Bedingungen zu validieren bzw. aus solchen Messdaten Modelle und Korrelationen abzuleiten.

Der Vortrag gibt einen Einblick in die Nutzung innovativer schneller Bildgebungsverfahren für Mehrphasenströmungen für diesen Zweck. Vorgestellt werden die Gittersensortechnik sowie die ultraschnelle Röntgentomographie, welche am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf entwickelt wurden. Mit beiden Bildgebungsverfahren ist die tomographische Analyse von Mehrphasenströmungen mit Bildraten von mehr als 1000 Bildern pro Sekunde sowie einer räumlichen Auflösung im Millimeterbereich möglich. Ihre Anwendung wird anhand verschiedener Beispiele für die Optimierung energieintensiver Prozesse, wie etwa Destillation und Abwasserbehandlung, exemplarisch diskutiert.

**Invited Talk** AKE 10.2 Tue 14:30 DÜL

## AKE 11: Nuclear Energy, Waste Management

Time: Tuesday 15:00–15:30

Location: DÜL

**Invited Talk** AKE 11.1 Tue 15:00 DÜL  
**Nukleare Entsorgung im Kontext der internationalen Nutzung der Kernenergie** — ●THORSTEN STUMPF — Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V.

Im Jahr 2022 wird das letzte deutsche Kernkraftwerk abgeschaltet werden. Die bis dahin angefallenen hochradioaktiven Abfälle warten auf ihre Entsorgung. Zu diesem Thema hat im Juli 2016 die \*Kommission zur Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe gemäß \* 3 Standortauswahlgesetz\* ihren Abschlussbericht veröffentlicht. Auf Basis dieses Berichtes der Endlagerkommission wurde im März 2017 eine Novelle des

Standortauswahlgesetzes durch Bundestag und Bundesrat beschlossen. Das Gesetz schreibt nun eine mehrphasige Suche nach einem Standort mit bestmöglicher Sicherheit vor. Die damit verbundene Diskussion um mögliche zukünftige Standorte zur Errichtung eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle in Deutschland rückt auch die Endlagerforschung in den öffentlichen Fokus. Die wissenschaftlichen Grundlagen zur Unterstützung des Auswahlverfahrens werden in dem Vortrag vorgestellt und diskutiert. Zudem wird ein Blick auf den aktuellen Stand zur Forschung, zur Planung und zum Bau eines Endlagers im Ausland geworfen.

## AKE 12: Nuclear Fusion

Time: Wednesday 15:00–16:00

Location: DÜL

**Invited Talk** AKE 12.1 Wed 15:00 DÜL  
**Nuclear fusion on the way to ITER and beyond** — ●ELISABETH WOLFRUM and THE ASDEX UPGRADE TEAM — Max Planck Institute for Plasma Physics, Garching, Germany

One of the paths to achieving nuclear fusion on earth is the confinement of hot plasma in a magnetic device, called tokamak. In the largest one, ITER, which is currently being built in the south of France, a burn-

ing deuterium-tritium plasma will require core ion temperatures above 10 keV (100 Mio °C) at densities around  $10^{20} \text{ m}^{-3}$ . In the core of a tokamak plasma turbulence is the dominant transport mechanism limiting the temperature gradient length. Therefore, the plasma edge acts as boundary condition to the core, and its temperature value is a crucial quantity which determines the performance of a tokamak plasma. In steady state conditions, all heat, that is deposited or pro-

duced in the centre, is transported across the plasma edge towards the wall. It is therefore crucial to tailor the plasma edge in a way to provide conditions for safe operation without damaging the plasma facing components. In this talk the most important ingredients of the physical properties of the tokamak plasma will be explained. The status of knowledge will be shown together with possible options for the operation in ITER, and the path to a demonstration power plant is illustrated.

**Invited Talk** AKE 12.2 Wed 15:30 DÜL  
**Hochbelastbare Materialien für die Kernfusion: Entwicklungen und Perspektiven** — ●CHRISTIAN LINSMEIER — Forschungszentrum Jülich, Institut für Energie- und Klimaforschung - Plasmaphysik, 52425 Jülich

Wolfram ist derzeit das bevorzugte Wandmaterial für zukünftige Fusionsreaktoren. Es verbindet eine geringe Tritiumrückhaltung für sicheren Betrieb mit sehr geringen Erosionsraten und einem hohen Schmelz-

punkt für eine lange Lebensdauer der Wandkomponenten. Darüber hinaus erlaubt die hohe Wärmeleitfähigkeit eine gute Energieabfuhr und das relativ schnelle Abklingen der neutroneninduzierten Radioaktivität ein Recycling nach Stilllegung des Reaktors ohne geologische Lagerung. Sprödigkeit und die hohe Oxidationsrate bei hohen Temperaturen sind jedoch große Herausforderungen an die Fertigung und mechanische Belastbarkeit der Komponenten sowie den sicheren Umgang im Falle eines Kühlmittelverlusts.

Wir beschreiben in diesem Beitrag neue Konzepte zur Weiterentwicklung von Wolfram auf der Basis von faserverstärkten Verbundwerkstoffen und Legierungen, die den Einsatzbereich des Wandmaterials deutlich erweitern. Für die zügige Entwicklung dieser Konzepte zu fertigen Komponenten ist die Qualifizierung dieser neuen Materialkonzepte unter fusionsrelevanten Lastbedingungen notwendig. Bestehende und derzeit im Forschungszentrum Jülich neu gebaute Testanlagen werden vorgestellt, die auch den Einfluss von Neutronenschäden untersuchen lassen.

## AKE 13: Cyber Aspects in future Energy Systems

Time: Wednesday 16:00–16:45

Location: DÜL

**Invited Talk** AKE 13.1 Wed 16:00 DÜL  
**Digitale Herausforderungen für das Energiesystem der Zukunft** — ●HUBERT KELLER — Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Automation und angewandte Informatik, Karlsruhe

Das Energiesystem der Zukunft besteht aus hoch verteilten und wechselwirkenden Komponenten, die sowohl Verbraucher als auch fluktuierende Erzeuger sind. Die Gesamtsystemstabilität wird nur durch eine umfassende Informations- und Kommunikationstechnologie unter Nutzung des Internets realisierbar sein. Damit sind die bisher hierarchisch und eher abgeschotteten Systemarchitekturen flach verteilt und gegenüber Dritten offen. Damit ist einerseits eine hohe Kommunikation erforderlich aber gleichzeitig auch die Gefahr von Cyber-Attacks erheblich gestiegen. Welche Gefahren in automatisierten Systemen und speziell im Energiesystem vorhanden sind, wie diese beherrschbar werden und welche Methoden hierfür einzusetzen sind wird am KIT intensiv erforscht. Sowohl das Reallabor Energy Lab 2.0 als auch die entsprechenden wissenschaftlichen Forschungsarbeiten zu Cyber-Security sind für die zuverlässige Funktion des zukünftigen Energiesystems unabdingbar. Nur durch eine neue Denkweise, Organisation und dem Einsatz zuverlässiger Softwaresysteme kann das Energiesystem abgesichert werden.

AKE 13.2 Wed 16:30 DÜL  
**Detektion und Lokalisierung von Cyber-Angriffen im Digitalisierten Energiesystem** — ●KATHRIN REIBELT, JÖRG MATTHES, HUBERT B. KELLER und VEIT HAGENMEYER — Institut für Automation und angewandte Informatik (IAI), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe

lierten Energiesystem — ●KATHRIN REIBELT, JÖRG MATTHES, HUBERT B. KELLER und VEIT HAGENMEYER — Institut für Automation und angewandte Informatik (IAI), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe

Cyberangriffe auf cyber-physikalische Systeme existieren bereits seit den Anfängen des Internets. Die informationstechnischen Gegenmaßnahmen werden im stetigen Wettlauf mit den Angriffsmethoden weiterentwickelt, wobei Angreifermodelle für zukünftige Cyberangriffe von begrenzten Fähigkeiten der Angreifer ausgehen. Im Zuge der Digitalisierung, die auch vor der kritischen Infrastruktur nicht Halt macht, ist dieses klassische Vorgehen nicht mehr ausreichend. Schäden durch erfolgreiche Angriffe können hier nicht einfach hingenommen werden und aufgrund der zunehmend professionelleren Akteure muss mit nahezu unbegrenzten Ressourcen der Angreifer gerechnet werden. Einfache, modellbasierte Gegenmaßnahmen begrenzen die Werte von Mess- und Stellgrößen auf definierte Intervalle. Diese klassischen Methoden versagen jedoch, wenn Angriffe im zulässigen Wertebereich bleiben und zulässige Kommandos nutzen. Das im Vortrag vorgestellte Verfahren berücksichtigt auch Abhängigkeiten der Größen durch die Nutzung eines physikalischen Anlagenmodells sowie Kenntnisse der informationstechnischen Eigenschaften der Komponenten. Es ermöglicht so die Detektion und Lokalisierung von Manipulationen sowie die Eingrenzung des Manipulationswegs. Die Verbesserung der Sicherheit für das jeweilige System kann mit ROC-Kurven objektiv eingeschätzt werden.