

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 LUTHER¹ und HORST SCHMIDT-BÖCKING² — ¹Universität des Saarlandes, Saarbrücken, Experimentalphysik, F.St. Zukunftsenergie — ²Universität 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 Angebotes 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 Oberals 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 $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Br}$, where anion disorder on the Br^{1-} and S^{2-} 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 $(\text{Li}_2\text{S})_x\text{-(P}_2\text{S}_5)_{1-x}$ ($0.67 < x < 0.75$) 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_4^{3-} , $\text{P}_2\text{S}_7^{4-}$ and $\text{P}_2\text{S}_6^{4-}$ 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 SEEBECK¹ and ROBERT MEISSNER^{1,2} — ¹Institute of Polymer and Composites, Hamburg University of Technology, Denickestraße 15, 21073 Hamburg, Germany — ²Magnesium Innovation Centre MagIC, Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Germany

Supercapacitors are promising storage devices for electrical energy, which storage performance based on a reversible ion absorption 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 calcula-

tion 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

AKE 7.5 Tue 10:45 DÜL

Exploring future energy systems with open models — TOM BROWN¹, MICHAEL DÜREN^{2,3}, and ●JOHANNES HAMPP² — ¹Institute for Automation and Applied Informatics, Karlsruhe Institute of Technology — ²Center for international Development and Environmental Research, Justus Liebig University Giessen — ³II. 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% CO₂ reduction target by 2050.

15 Minutes Coffee Break