



# **Zink-Ionen-Batterien für die stationäre Energiespeicherung – Fertigung und Assemblierung (InFab)**

**Teilvorhaben: Modellierung / Validierung ZIB**

**Universität Stuttgart, Institut für Photovoltaik (ipv)**

Berichtsblatt  
Januar 2021 – Juni 2024



## I. Berichtsblatt mit Kurzfassung

1. ISBN oder ISSN -	2. Berichtsart (Schlussbericht oder Veröffentlichung) Schlussbericht	
3. Titel Schlussbericht zum Teilvorhaben „Modellierung / Validierung ZIB“ im Rahmen des Verbundvorhabens: „Zink-Ionen-Batterien für die stationäre Energiespeicherung – Fertigung und Assemblierung (InFab)“		
4. Autor(en) [Name(n), Vorname(n)] Pross-Brakhage, Julia	5. Abschlussdatum des Vorhabens 30.06.2024	
	6. Veröffentlichungsdatum 31.12.2024	
	7. Form der Publikation Projektbericht	
8. Durchführende Institution(en) (Name, Adresse) Universität Stuttgart, Institut für Photovoltaik (ipv) Pfaffenwaldring 47 70569 Stuttgart	9. Berichts-Nr. Durchführende Institution -	
	10. Förderkennzeichen 03EI3040D	
	11. Seitenzahl 14	
12. Fördernde Institution (Name, Adresse) Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK.IIB5) Scharnhorststr. 34-37 10115 Berlin	13. Anzahl Literaturangaben 13	
	14. Anzahl Tabellen 2	
	15. Anzahl Abbildungen 4	
16. Zusätzliche Angaben -		
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum) Projektträger Jülich, Jülich, 20.12.2024		
18. Kurzfassung Zink-Ionen-Batterien (ZIB) stellen eine vielversprechende Alternative zu Lithium-Ionen-Batterien (LIB) im Bereich stationärer Energiespeicher dar, weil sie das Potential haben, kostengünstiger und umweltfreundlicher zu sein als LIB. ZIB-Systeme nutzen ungiftige Materialien und wasserbasierte Elektrolyte und bieten hohe Zyklenzahlen sowie eine hohe Betriebssicherheit. Das Projekt InFab zielt darauf ab, ein effektives Batteriespeichersystem für stationäre Anwendungen zu entwickeln und die Voraussetzungen für die Großserienproduktion von ZIB zu schaffen.  Der Fokus des Teilvorhabens „Modellierung / Validierung ZIB“ lag in der detaillierten Analyse und Simulation elektrochemischer Prozesse in der Zelle. Ein zentraler Schwerpunkt lag auf der Beschreibung und Validierung der komplexen Wechselwirkungen im Elektrolyten, die mithilfe eines entwickelten thermodynamischen Modells detailliert analysiert wurden. Zudem wurde ein Modell entwickelt, das die limitierenden Transportprozesse im Betrieb beschreibt und so ein besseres Verständnis der dynamischen Vorgänge innerhalb der Zelle ermöglicht. Ein weiteres Ergebnis war die Berechnung der Energiedichte in Abhängigkeit von der Elektrodendicke sowie verschiedenen Betriebsparametern, wodurch wichtige Optimierungspotenziale aufgezeigt werden konnten. Ergänzend dazu wurde eine systematische Untersuchung der Einflüsse unterschiedlicher Anionen auf die elektrochemischen Prozesse durchgeführt, um deren Rolle und Wirkung präziser zu verstehen.  Durch die gewonnenen Erkenntnisse können spezifische Einflussfaktoren auf die Zelleistung besser verstanden und optimierte Strategien für die Weiterentwicklung elektrochemischer Systeme abgeleitet werden.		
19. Schlagwörter Zink-Ionen-Batterie, Batteriespeicher, Stationäre Energiespeicherung, Batterieforschung, Wasserbasierte Elektrolyte, Technologieentwicklung, Batteriemanagementsystem		
20. Verlag -	21. Preis -	

## Document control sheet

<b>1. ISBN or ISSN</b> -	<b>2. type of document (e.g. report, publication)</b> Veröffentlichung (Publikation)	
<b>3. title</b> Final Report on the Subproject "Modeling / Validation of ZIB" within the Joint Project: "Zinc-Ion Batteries for Stationary Energy Storage – Manufacturing and Assembly (InFab)"		
<b>4. author(s) (family name, first name(s))</b> Pross-Brakhage, Julia	<b>5. end of project</b> 30.06.2024	
	<b>6. publication date</b> 31.12.2024	
	<b>7. form of publication</b> Document Control Sheet	
<b>8. performing organization(s) name, address</b> Universität Stuttgart - Fakultät 5 Informatik, Elektrotechnik und Informationstechnik - Institut für Photovoltaik - Abt. Elektrische Energiespeichersysteme	<b>9. originators report no.</b> -	
	<b>10. reference no.</b> 03E13040D	
	<b>11. no. of pages</b> 14	
<b>12. sponsoring agency (name, address)</b> Federal Ministry for Economic Affairs and Climate Action (BMWK.IIB5) Scharnhorststr. 34-37 10115 Berlin, Germany	<b>13. no. of references</b> 13	
	<b>14. no. of tables</b> 2	
	<b>15. no. of figures</b> 4	
<b>16. DOI (Digital Object Identifier)</b>		
<b>17. presented at (title, place, date)</b> Project Management Jülich, Jülich, December 20, 2024		
<b>18. abstract</b> Zinc-ion batteries (ZIB) represent a promising alternative to lithium-ion batteries (LIB) for stationary energy storage, as they have the potential to be more cost-effective and environmentally friendly than LIBs. ZIB systems utilize non-toxic materials and water-based electrolytes, offering high cycle stability and operational safety. The InFab project aims to develop an effective battery storage system for stationary applications and establish the prerequisites for large-scale production of ZIBs. The focus of the subproject "Modeling / Validation of ZIB" was on the detailed analysis and simulation of electrochemical processes within the cell. A key aspect was the description and validation of the complex interactions in the electrolyte, which were analyzed in detail using a developed thermodynamic model. Additionally, a model was created to describe the limiting transport processes during operation, enabling a better understanding of the dynamic processes inside the cell. Another outcome was the calculation of energy density as a function of electrode thickness and various operating parameters, identifying important optimization potential. Furthermore, a systematic investigation of the influence of different anions on electrochemical processes was conducted to better understand their role and effects. The findings obtained allow for a deeper understanding of specific factors affecting cell performance and contribute to the development of optimized strategies for advancing electrochemical systems.		
<b>19. keywords</b> Zinc-ion battery, battery storage, stationary energy storage, battery research, water-based electrolytes, technology development, battery management system		
<b>20. publisher</b> -	<b>21. price</b> -	

Nicht änderbare Endfassung mit der Kennung 2659436-5

# **Zink-Ionen-Batterien für die stationäre Energiespeicherung – Fertigung und Assemblierung (InFab)**

**Teilvorhaben: Modellierung / Validierung ZIB**

**Universität Stuttgart, Institut für Photovoltaik (ipv)**

Schlussbericht  
Januar 2021 – Juni 2024

Gefördert durch:



Bundesministerium  
für Wirtschaft  
und Klimaschutz

aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages

## **Schlussbericht**

Universität Stuttgart – Institut für Photovoltaik (ipv)	Förderkennzeichen: 03EI3040D
Vorhabenbezeichnung: Zink-Ionen-Batterien für die stationäre Energiespeicherung - Fertigung und Assemblierung (INFAB) Teilvorhaben: Modellierung / Validierung ZIB	
Projektbeteiligte: acp systems AG, Fraunhofer-Institut für Solare Energiesysteme, Helmut Hechinger GmbH & Co. KG, Universität Stuttgart - Institut für Photovoltaik	
Laufzeit des Vorhabens: 01/2021 – 06/2024	
Berichtszeitraum: 01/2021 – 06/2024	
Bearbeiter: Julia Pross-Brakhage	

Datum: 28.03.2025

## **Inhalt**

I.	Projektbeschreibung .....	4
I.1	Aufgabenstellung.....	4
I.2	Projektvoraussetzungen.....	4
I.3	Vorhabenplanung & -ablauf .....	5
I.4	Stand der Wissenschaft & Technik .....	6
I.5	Zusammenarbeit mit anderen Stellen .....	8
II.	Projektdarstellung .....	9
II.1	Verwendung der Zuwendung & Ergebnisse .....	9
II.2	Positionen des zahlenmäßigen Nachweises .....	12
II.3	Notwendigkeit & Angemessenheit der geleisteten Arbeit.....	12
II.4	Nutzen & Verwertbarkeit im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans.....	12
II.5	Fortschritt bei anderen Stellen .....	13
II.6	Veröffentlichung der Ergebnisse (erfolgt & geplant).....	13
	Literatur.....	14

## **Abbildungsverzeichnis**

Abbildung 1: Grafische Darstellung der Aufgabenverteilung und Zusammenhänge im Projektkonsortium von InFab. ....	6
Abbildung 2: Die im Modell abgebildeten Komplexe (links) und Modellvalidierung der Puffereigenschaften (rechts). ....	10
Abbildung 3: Kopplung des thermodynamischen Modells (links) und modellierte pH-Schwankungen über einen Lade- und Entladezyklus (rechts). ....	11
Abbildung 4: Modellierter Widerstand der Mangandioxidbeschichtung in Abhängigkeit des Ladezustands (links) und Messung der Widerstandsänderung über den Ladezustand (rechts). ....	11

## **Tabellenverzeichnis**

Tabelle 1: Übersicht über die Arbeitspakete (AP) und die Unter-AP des ipv .....	6
Tabelle 2: Übersicht über andere Marktteilnehmer im ZIB-Bereich (Auswahl). ....	13

## **I. Projektbeschreibung**

Im ersten Teil des Schlussberichts erfolgt die kurze Darstellung zu der Projektaufgabenstellung, den Voraussetzungen des Vorhabens, der Planung und dem Ablauf des Vorhabens, dem wissenschaftlich-technischen Stand sowie der Zusammenarbeit mit anderen Stellen.

### **I.1 Aufgabenstellung**

Im Verbundprojekt INFAB wird ein Batteriespeichersystem für stationäre Anwendungen auf Basis einer Zink-Ionen-Batterie (ZIB)-Zellchemie mit wässrigem Elektrolyten entwickelt. Ziel ist die Erforschung und Entwicklung einer Anlagen- und Prozesstechnik zur automatisierten Herstellung, um den Weg für die Großserienproduktion des Speichersystems zu bereiten. Der Bedarf an stationären Stromspeichern zur Speicherung erneuerbarer Energien, insbesondere für Heimspeicheranwendungen, wird in Zukunft stark zunehmen. Die ZIB-Technologie überzeugt durch einfachen Systemaufbau, hohe Betriebssicherheit, ungiftige Materialien und umweltfreundlichen Rohstoffabbau in der EU.

Die zentrale Aufgabenstellung des Teilvorhabens bestand darin, die relevanten in der Zelle ablaufenden elektrochemischen und physikalischen Prozesse mit Hilfe eines elektrochemischen Modells abzubilden. Ziel war es, dadurch ein tieferes Verständnis der zugrunde liegenden Mechanismen zu erlangen, die die Effizienz, Stabilität und Lebensdauer des Systems beeinflussen. Auf Basis der modellbasierten Analysen sollten gezielte Maßnahmen abgeleitet werden, die einen effizienten und langandauernden Betrieb der Zellen sicherstellen. Dazu gehörten insbesondere die Identifikation und Bewertung kritischer Einflussfaktoren sowie die Entwicklung von Strategien zur Minimierung von Verlusten und zur Optimierung der Betriebsparameter. Diese modellgestützten Ansätze ermöglichten eine systematische Herangehensweise zur Verbesserung der Leistung und Zuverlässigkeit der untersuchten Energiespeichersysteme.

### **I.2 Projektvoraussetzungen**

Das Institut für Photovoltaik der Universität Stuttgart (ipv) deckt ein breites Feld für die Themen Halbleiterelektronik und elektrische Energiespeicher ab, vorwiegend in den Bereichen Herstellung, Charakterisierung und Anwendung von Materialien, Bauelementen und Systemen; insbesondere für deren Einsatz im Bereich der erneuerbaren Energien. Die Arbeitsgruppe Elektrische Energiespeicher (EES) beschäftigt derzeit rund 15 Doktoranden und ihre Forschungsaktivitäten lassen sich in vier Bereiche unterteilen: Neue Materialien, Diagnostik & Analytik, Mehrzellensysteme und Modellentwicklung & Simulation. Im Bereich der neuen Materialien werden neue Zellchemien entwickelt und untersucht. Darüber hinaus wird das Thema Batterierecycling aufgegriffen und an der Weiterentwicklung von Lithium-Ionen-Zellen geforscht. Der Bereich Zelldiagnostik widmet sich der Erforschung und Entwicklung neuartiger Charakterisierungs- und Analysediagnostik für verschiedene Batterietypen. Der Bereich Modellentwicklung und Simulation befasst sich vor allem mit der Entwicklung von elektrochemischen und thermodynamischen Modellen. Das Institut verfügte somit bereits vor Projektbeginn über umfassende Kompetenzen und infrastrukturelle Voraussetzungen, die eine erfolgreiche Durchführung des Vorhabens ermöglichten. Dazu gehörten fundierte Kenntnisse in der elektrochemischen Modellierung sowie langjährige Erfahrung in der Erforschung und Entwicklung von Batteriesystemen. Ergänzt wurde dies durch eine moderne technische Ausstattung, darunter spezialisierte Labore für Materialcharakterisierung, elektrochemische Tests und Simulationen. Diese Rahmenbedingungen bildeten eine solide Grundlage für die effiziente Bearbeitung der komplexen Fragestellungen des Projekts.

Das Vorhaben wurde in Zusammenarbeit mit den Partnern Fraunhofer-Institut für Solare Energiesysteme (ISE), Helmut Hechinger GmbH (HEC), acp systems AG (ACP, Verbundkoordinator) und dem Institut für Photovoltaik (IPV) der Universität Stuttgart durchgeführt. Jeder Partner erstellt einen separaten Schlussbericht für das Verbundprojekt.

### 1.3 Vorhabenplanung & -ablauf

Das Gesamtvorhaben ist in mehrere Teile unterteilt, die sich mit den Bereichen Zellchemie, Zell- und Modularchitektur, Prozesstechnik, Produktionstechnik und Steuerungstechnik (BMS und EMS) befassen.

Im Bereich der Zellchemie kommen verschiedene Varianten in Frage. In der frühen Phase des Projekts werden diese Varianten auf Basis eines im Projekt zu erarbeitenden Anforderungsprofils erforscht und entsprechend ausgewählt. Diese Frage ist auch verknüpft mit der Erforschung einer geeigneten fertigungsgerechten Architektur der Einzelzellen und Module. Parallel werden elektronische Schaltungen für das Lade- und Energiemanagement der Batteriemodule entwickelt und programmiert. Nach Auswahl der Architektur und einer geeigneten Prozesstechnologie zur Herstellung der Batteriezellen werden die jeweiligen Einzelprozesse erforscht, mit dem Ziel, neben dem Erfüllen der geforderten Betriebseigenschaften der Zellen auch eine effiziente Großserienproduktion zu ermöglichen. Für die jeweiligen Teilprozesse werden Anlagenmodule zur Durchführung der Forschungsarbeiten auf der relevanten Skala entwickelt und es erfolgen Prozessentwicklungsarbeiten an den einzelnen Anlagen. Zur Vorbereitung einer effizienten Großserienproduktion soll der Produktionsablauf entsprechend dem „Industrie 4.0“-Gedanke entwickelt werden. Dies umfasst auch die Produktion der Leiterplatten für die BMS- und EMS-Systeme. An den jeweiligen Schnittstellen erfolgt ein ständiger Austausch mit den jeweils anderen Projektpartnern, damit die jeweiligen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten ineinandergreifen können.

Zentrale Ziele des Vorhabens (unter Nennung der jeweils hauptverantwortlichen Projektpartner) sind:

- Modellierung der ZIB-Zellchemie (IPV),
- Entwicklung von Herstellungsprozessen und einer Architektur für ein SBS auf Basis der ZIB-Technologie mit wässrigen Elektrolyten (ISE),
- Bau und Charakterisierung von Zell- und Stack-Prototypen (ISE),
- Entwicklung geeigneter Batterie- und Energiemanagementsysteme (ISE und HEC),
- Implementierung von flexiblen automatisierten Fertigungsprozessen für die Herstellung eines Batteriesystems und Entwicklung von einzelnen Anlagenmodulen (ACP),
- Schaffung der technologischen Grundlagen und Konzepte für eine Großserienproduktion der SBS (HEC).

Daraus ergaben sich folgende **Teilvorhaben**, für die jeweils separat ein Schlussbericht erstellt wird:

**Teilvorhaben INFAB-ACP:** Produktionstechnik für ZIB

**Teilvorhaben INFAB-HEC:** Industrie 4.0-Konzepte für ZIB-Produktion

**Teilvorhaben INFAB-ISE:** Technologieentwicklung für ZIB Zellen/Module

**Teilvorhaben INFAB-IPV:** Modellierung/Validierung ZIB Zelle/Stack

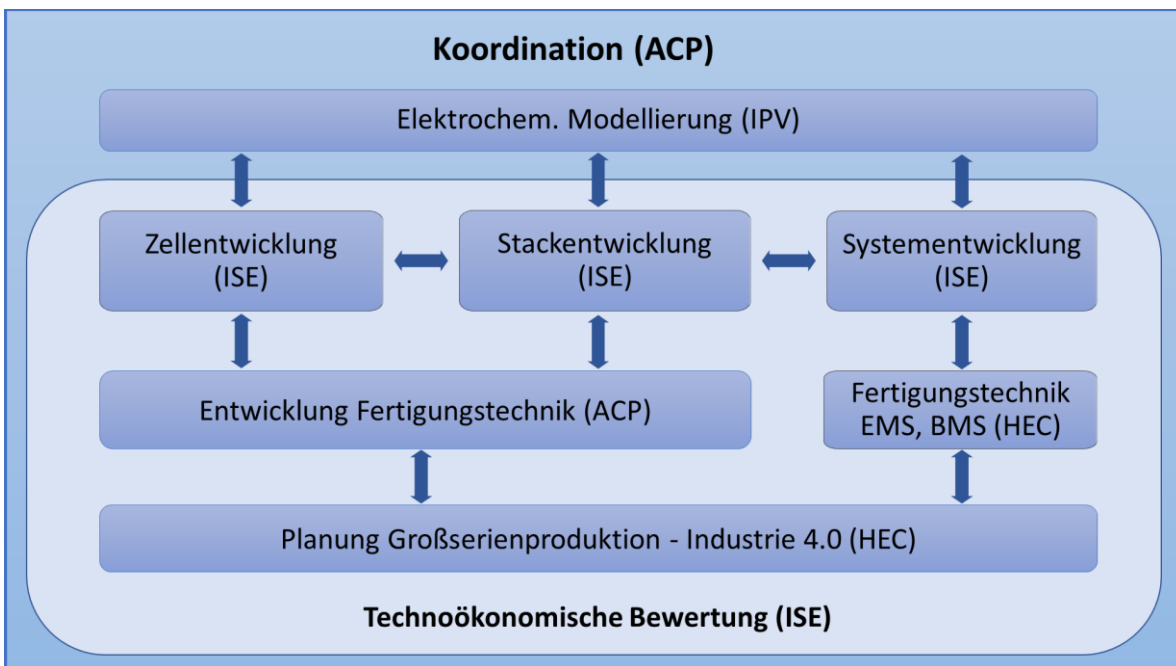
Das *ipv* hat sich im Projekt mit den Teilprojekthinhalten der Modellierung der ZIB-Technologie beschäftigt. Durch den erhöhten Entwicklungsaufwand und Verzögerungen bei der Materialbeschaffung wurde die Projektlaufzeit kostenneutral um 6 Monate verlängert.

Planung und Ablauf der Untersuchungen orientierten sich an dem im Projekt aufgestellten Arbeitspaketen, die in Tabelle 1 aufgelistet sind.

**Tabelle 1: Übersicht über die Arbeitspakete (AP) und die Unter-AP des ipv**

<b>Arbeitspakete</b>	<b>Verantw. Partner</b>
<b>AP 5: Modellierung/Validierung Zelle/Stack</b>	<b>IPV</b>
AP 5.1: Entwicklung eines Basismodells	IPV
AP 5.2: Variantenmodellierung	IPV
AP 5.3: Optimierung des Modells	IPV

Die grafische Aufgabenverteilung ist in Abbildung 1 dargestellt. Das Arbeitspaket 5 wurde in enger Zusammenarbeit mit der Zellentwicklung am ISE durchgeführt.



**Abbildung 1: Grafische Darstellung der Aufgabenverteilung und Zusammenhänge im Projektkonsortium von InFab.**

#### **1.4 Stand der Wissenschaft & Technik**

Lange Zeit dominierten Bleibatterien den Markt für stationäre Speicher. In den letzten Jahren wurden sie zunehmend durch Lithium-Ionenbatterien (LIB) ersetzt, die dank sinkender Kosten und verbesserter Haltbarkeit Vorteile in der Elektromobilität bieten. Während LIBs aufgrund ihrer hohen Energiedichte im Mobilitätsbereich auf eine entsprechende Zahlungsbereitschaft treffen, stellen stationäre Anwendungen andere Anforderungen und bieten größere Freiheitsgrade bei der Auswahl der Speichertechnologie und -architektur. Ziel der Entwicklungen ist es, Batteriespeicher durch geeignete Zellchemie und Architektur sowohl mit niedrigeren Investitionskosten als auch geringeren spezifischen Betriebskosten herzustellen.

Zur Kommerzialisierung ist auf Zellebene noch eine Weiterentwicklung hinsichtlich der Lebensdauer und erreichbaren Energiedichte notwendig. Dabei kann dem Elektrolyten ein elementarer Einfluss auf den Reaktionsmechanismus zugeschrieben werden. Vor allem der pH-Wert, aber auch die Art des vorhandenen Anions und die Konzentration, die wiederum einen starken Einfluss auf die Solvationsstruktur haben, spielen eine entscheidende Rolle. Studien haben den positiven Effekt der Verwendung von Acetat anionen im Vergleich zu Salzen auf Sulfatbasis aufgezeigt. Xie et al. zeigen, dass der Zwei-Elektronen-Mechanismus durch die Verwendung von Manganacetat und Zinkacetat ausgenutzt werden kann und führen die Änderung des Reaktionsmechanismus im Vergleich zu  $MnSO_4$  auf die Koordinationsfähigkeit von Acetat zurück (Xie et al. 2020). Ähnliche Beobachtungen machen Zeng et al., wobei sie die positiven Effekte auf die starke Adsorptionswirkung von  $CH_3COO^-$  an den

Oberflächenstellen der MnO<sub>2</sub>-Partikel aufgrund ihrer hohen Polarisierbarkeit und Elektronegativität zurückführen. Darüber hinaus zeigte der acetatbasierte Elektrolyt im Vergleich zu CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub><sup>-</sup>- und SO<sub>4</sub><sup>-</sup>-Anionen verbesserte Eigenschaften hinsichtlich der Coulomb-Effizienz und der Zyklenstabilität der Zink-Elektroabscheidung (Zeng et al. 2020).

Ein weiterer positiver Effekt, der durch die Zugabe von Acetatanionen erzielt wird, ist der Puffereffekt bei pH-Änderungen, der zuerst von Mateos et al. hervorgehoben und anschließend von vielen Forschungsgruppen aufgegriffen wurde (Mateos et al. 2020). Das Anion kann entweder direkt als Salz oder über die Zugabe als Säure zugegeben werden. Um die Wirkung der Säurezugabe von der Puffereigenschaft und der Veränderung der Konzentration freier Protonen zu trennen, untersuchten Liu et al. die Wirkung der Zugabe von Schwefelsäure im Vergleich zu Essigsäure und stellten fest, dass letztere die pH-Schwankungen deutlich reduziert und darüber hinaus die Korrosion und Wasserstoffentwicklung wirksam mindert (Wang et al. 2022).

Neben der Verwendung von acetathaltigen Elektrolyten konnte die stabilisierende und positive Wirkung auch mit anderen Puffersubstanzen gezeigt werden (Molaei et al. 2022). Die Verwendung von Ammoniumdihydrogen führt ebenfalls zu einer Unterdrückung von pH-Schwankungen und der damit verbundenen Ausfällung von ZHS und führt darüber hinaus zur Unterdrückung von Dendritenwachstum und Nebenreaktionen (Zhang et al. 2023). Liu et al. verwenden ebenfalls Puffer auf Phosphatbasis, allerdings werden diese direkt über Zinkhydrogenphosphat und nicht als Elektrolytzusatz zugegeben (Liu et al. 2022). Diese weisen aber auch auf die Besonderheit des Fest-Flüssig-Mechanismus hin, der das Elektrolytvolumen und die erreichbare Konzentration zu einer wesentlichen Eigenschaft über die volumetrische Energiedichte macht. Darüber hinaus ist auch die Löslichkeit der pH-stabilisierenden Anionen ein wichtiger Faktor, um auch bei realistischen Elektrolytvolumina eine ausreichende Wirkung zu erzielen.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass vielversprechende Ansätze gefunden wurden, um den Zwei-Elektroden-Mechanismus im anodenfreundlichen milden pH-Bereich zugänglich zu machen und damit die Probleme der Korrosion und Gasentwicklung der Anode im sauren pH-Bereich deutlich zu minimieren. Allerdings ist ein vertieftes Verständnis der zugrunde liegenden komplexen Prozesse, der Elektrolytzusammensetzungen und ihrer Stofftransportgrenzen in Verbindung mit den Elektrodenstrukturen erforderlich, um diese Fortschritte weiter zu optimieren und zu festigen.

Im Bereich der LIBs hat sich der modellbasierte Ansatz für die Zellentwicklung längst etabliert und leistet einen wichtigen Beitrag zum tieferen Verständnis. Da ZIBs jedoch auf grundlegend anderen Reaktionsmechanismen beruhen, müssen die traditionellen Kontinuumsmodelle für LIB weiterentwickelt werden, um die spezifischen Prozesse in der Zelle zu beschreiben. Dabei dient der Elektrolyt nicht nur zum Transport der Ionen, sondern nimmt auch als aktives Material an der Reaktion teil. Im Gegensatz zur Interkalation muss für den zugrundeliegenden Abscheidungsmechanismus auch eine Veränderung der Porosität mit dem Ladungszustand berücksichtigt werden. Das Verhalten der Ionen im neutralen Elektrolyten ist sehr komplex, und wie bereits erwähnt, haben die Beschränkungen des Massentransports und die damit verbundenen pH-Gradienten innerhalb der Zelle einen grundlegenden Einfluss auf das Überpotenzial sowie die ablaufenden Reaktionsmechanismen. Dies macht es notwendig, homogene Reaktionen und die Bildung von Komplexen innerhalb des Elektrolyten zu berücksichtigen.

Nach unserem Kenntnisstand gibt es derzeit keine Studien, die sich mit dem Verhalten von ZIB in neutraler Umgebung auf der Basis von Modellierungsansätzen beschäftigen, in der die oben beschriebenen wichtigen Elektrolytbeziehungen abgebildet sind. Es kann jedoch auf Erfahrungen im Bereich der Zink-Luft- und Redoxbatterien (Ronen et al. 2018), der geochemischen Prozesse (Rolle et al. 2018) und der Wasserspaltung (Singh et al. 2015) zurückgegriffen werden. Clark et al. verwenden beispielsweise ein Kontinuumsmodelle, um die Leistung von Zink-Luft-Batterien zu bewerten und sie im Hinblick auf pH-Stabilität, Ausfällung und Energiedichte zu optimieren (Clark et al. 2017). Sie weisen auf die Begrenzung der Pufferkapazität durch den Massentransport hin und zeigen, dass die Elektrolytzusammensetzung und -konzentration einen starken Einfluss auf das bevorzugte

Ausfällungssalz hat. Die Autoren bezeichnen dies als Quasiteilchen-Ansatz, obwohl auch die „Methode der Familien“ (Ronen et al. 2018) oder der sequentielle nicht-iterative Ansatz als Begriff verwendet wird (Saaltink et al. 2001). Für die weitere Entwicklung ist das Verständnis und die richtige Auswahl verschiedener Elektrolytzusammensetzungen und deren Fähigkeit, einen stabilen Elektroden-Elektrolyt-Übergang zu steuern, ein wichtiger Faktor, zu dem die modellbasierte Entwicklung potenziell einen wichtigen Beitrag leisten kann.

### ***1.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen***

Im Laufe der Projektarbeiten in InFab haben sich Kontakte zu anderen Stellen ergeben. Diese werden im Folgenden dargestellt:

- ***HOPPECKE Batterien GmbH & Co. KG***: Informations- und Materialaustausch zu Rekombinatoren zur Verwendung in ZIB.
- ***Imerys S.A.***: Austausch zu Beschichtungslacken für den Korrosionsschutz von metallischen Materialien.
- ***Dr.-Ing. Max Schlötter GmbH & Co. KG***: Austausch und Materialproben für Zinkbädern Im Rahmen der Elektrolyt- und Anodenforschung.

## II. Projektdarstellung

Im zweiten Teil des Schlussberichts erfolgt die eingehende Darstellung zur Zuwendungsverwendung und den erzielten Ergebnissen, den Positionen des zahlenmäßigen Nachweises, der Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit, dem voraussichtlichen Nutzen und der Verwertbarkeit der Ergebnisse, dem parallelen Fortschritt auf dem Arbeitsgebiet bei anderen Stellen sowie den erfolgten bzw. geplanten Veröffentlichungen der Ergebnisse.

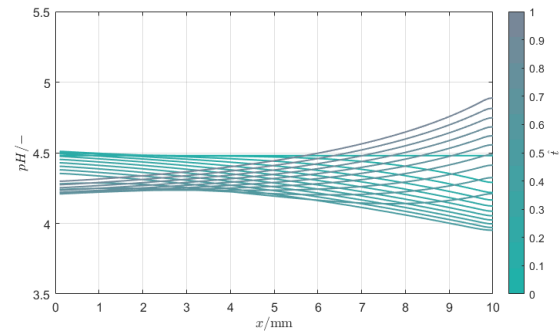
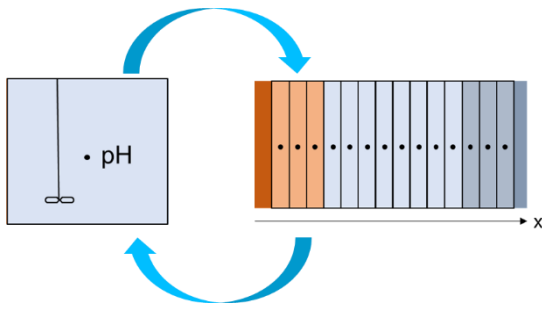
### II.1 Verwendung der Zuwendung & Ergebnisse

Im Folgenden erfolgt die Darstellung der Arbeitspakete mit den Arbeitszielen und der Ergebnisse für die Arbeitsinhalte des *ipv*.

#### AP 5 Modellierung/ Validierung Zelle

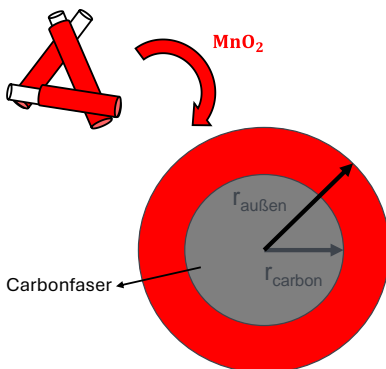
<b>Arbeitspaket 5: Modellierung/ Validierung Zelle</b>					
<b>Beteiligte Verbundpartner</b>	ACP	HEC	ISE	IPV	Summe
<b>Hauptverantwortlich</b>				X	
<b>Start – Ende</b>	Monat 1 - Monat 36				
<b>Ziel des Arbeitspaketes</b>	Ziel des Arbeitspaketes ist, durch die Entwicklung eines Batteriemodells, ein vertiefteres Verständnis der elektrochemischen und physikalischen Vorgänge innerhalb der Zellen zu gewinnen. Im Fokus standen die Entwicklung und Anwendung elektrochemischer Modelle, die es ermöglichen, die komplexen Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Prozessen wie Ladungs- und Stofftransport, Nebenreaktionen und Energieumwandlung zu analysieren. Durch die gewonnenen Erkenntnisse sollten entscheidende Einflussfaktoren auf die Funktionsweise, Lebensdauer und Effizienz der Batterien identifiziert und gezielt adressiert werden.				
<b>Kurze Aufgabenbeschreibung:</b>					
Nach umfassender Literaturrecherche zu bestehenden Modellansätzen erfolgt die Entwicklung des elektrochemischen Modells (AP 5.1). Dabei liegt ein besonderer Fokus auf der Darstellung der Wechselwirkungen innerhalb des Elektrolyten. Nach der Modellentwicklung wird eine umfassende Validierung durchgeführt. Die Simulationsergebnisse werden mit experimentellen Daten verglichen, um die Genauigkeit und Verlässlichkeit des Modells zu überprüfen. Ein weiterer Schwerpunkt liegt auf der Identifikation und Analyse kritischer Einflussfaktoren (AP 5.2). Das Modell wird genutzt, um systematisch die Parameter zu untersuchen, die die Batteriefunktion, Lebensdauer und Effizienz maßgeblich beeinflussen. Die gewonnenen Erkenntnisse dienen als Grundlage, um Maßnahmen zur Optimierung der Batteriearchitektur und des Betriebs abzuleiten (AP 5.3).					
<b>Arbeitsziele:</b>					
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Ein validiertes Batteriemodell, das die relevanten elektrochemischen und physikalischen Vorgänge abbildet.</li> <li>2. Erkenntnisse zu Einflussfaktoren auf die Lebensdauer, Effizienz und Funktionsweise der Zellen.</li> <li>3. Handlungsempfehlungen für die Optimierung der Batteriearchitektur und des Betriebs.</li> </ol>					



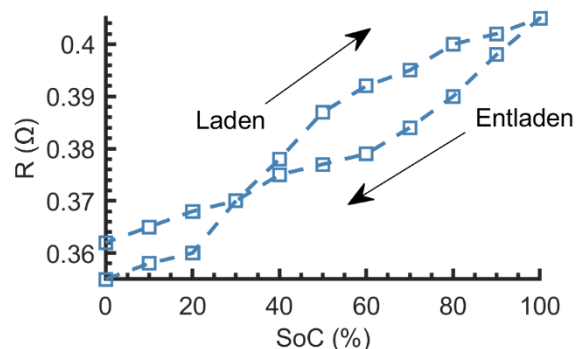


**Abbildung 3: Kopplung des thermodynamischen Modells (links) und modellierte pH-Schwankungen über einen Lade- und Entladezyklus (rechts).**

Anstieg des elektrischen Widerstands durch die moderate Leitfähigkeit des Mangandioxids und einer Erniedrigung der Porosität. Die Abbildung 4 rechts zeigt den aus der EIS-Messung ermittelten Anstieg des Widerstands mit dem SoC durch die wachsende Schichtdicke mit moderater Leitfähigkeit des Mangandioxids an. Analog dazu lässt sich beim Entladevorgang ein Absinken des Widerstands beobachten. Diese Phänomene wurden in das Modell integriert (Abbildung 4 links) und mit den Messwerten verglichen. Im Vergleich ist der im Modell berechnete Widerstand geringer als der gemessene Widerstand. Dies könnte damit erklärt werden, dass neben Mangandioxid zudem andere Manganhaltige Feststoffe wie zum Beispiel  $ZnMn_2O_4$  abgeschieden werden können, die eine um den Faktor 4 geringere Leitfähigkeit besitzen (Kankanallu et al. 2023). Hierzu bedarf es weiteren Untersuchungen, um die ablaufenden Mechanismen besser zu verstehen.



$$R = \frac{\ln\left(\frac{r_{\text{außen}}}{r_{\text{carbon}}}\right)}{2 * \pi * l * \kappa_{\text{MnO}_2}}$$



**Abbildung 4: Modellierter Widerstand der Mangandioxidbeschichtung in Abhängigkeit des Ladezustands (links) und Messung der Widerstandsänderung über den Ladezustand (rechts).**

### Gegenüberstellung mit Zielen:

Es wurde ein elektrochemisches Modell erstellt und validiert. Das Modell wurde erfolgreich zur Erkenntnisgewinnung eingesetzt und es konnten Handlungsempfehlungen für die Optimierung erstellt werden. Weiterhin gibt es offene Fragen bezüglich der Erhöhung der Energiedichte und Stabilisierung der Wasserstoffentwicklung auf der Anodenseite. Um diese Aspekte weiter zu adressieren, ist ein tiefergehendes Verständnis der zugrunde liegenden Mechanismen erforderlich, das als Grundlage für die zukünftige Erweiterung und Verfeinerung der elektrochemischen Modelle dienen können.

## **II.2 Positionen des zahlenmäßigen Nachweises**

Die für das Forschungsvorhaben InFab aufgewendeten Kosten von 135 t€ teilten sich in Materialkosten (18 t€), Personalkosten (109 t€), Reisekosten (2t€) und Investitionskosten (7t€) auf. Die Materialkosten und Investitionskosten umfassen Positionen, die zum Aufbau elektrochemischer Testzellen zur Validierung des Modells benötigt werden wie zum Beispiel pH-Elektroden, Chemikalien und Verbrauchsmaterialien. Die genaue Darstellung der Kosten können dem separat erstellten zahlenmäßigen Nachweis entnommen werden.

Zusammenfassend konnten mit den geplanten Kosten für Personal, Reisemittel und Beschaffungen alle Projektziele erreicht werden.

## **II.3 Notwendigkeit & Angemessenheit der geleisteten Arbeit**

Die im Projekt geleisteten Arbeiten des *ipv* waren zielführend und haben dazu beigetragen, ein verbessertes und umfassenderes Verständnis der Vorgänge innerhalb der Zelle zu entwickeln.

Durch die enge Zusammenarbeit innerhalb des InFab-Konsortiums, bestehend aus akademischen und industriellen Partnern, konnte ein intensiver Wissensaustausch stattfinden, der auch über das Projektende hinaus fortgeführt wird. InFab hat so entscheidend dazu beigetragen, einen starken Verbund von Wissenschaft und Industrie im strategisch wichtigen Bereich der Batterieentwicklung zu etablieren. Dieser Verbund trägt nicht nur zur Weiterentwicklung innovativer Technologien bei, sondern leistet aus deutscher Perspektive auch einen nachhaltigen Beitrag zur Energiewende.

Der Erfolg des Projekts zeigt sich insbesondere darin, dass auf Basis von InFab bereits erfolgreich Folgeprojekte initiiert und bewilligt wurden, die die Forschungsergebnisse weiter vertiefen und in anwendungsnahe Konzepte überführen.

Die eingesetzten Fördermittel wurden aus Sicht des *ipv* durchgehend zielgerichtet, effizient und wirtschaftlich verwendet. Rückblickend ist deutlich, dass die Vielzahl der wissenschaftlichen Fragestellungen und technologischen Herausforderungen des Projekts ohne die finanzielle Unterstützung und die Kooperation im Konsortium nicht in vergleichbarer Qualität und Tiefe hätten bearbeitet werden können.

Insgesamt orientierten sich die durchgeführten Arbeiten umfassend am genehmigten Arbeitsplan. Dies unterstreicht, dass die Projektaktivitäten als notwendig und angemessen für die erfolgreiche Umsetzung der Projektziele einzustufen sind.

## **II.4 Nutzen & Verwertbarkeit im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans**

Das Projekt leistet einen langfristigen Beitrag zur Sicherung von Arbeitsplätzen und zum Aufbau von Kompetenzen im Bereich stationärer Batteriespeicher. Es stärkt nachhaltig die Wettbewerbsposition des *ipv* im strategischen Feld der elektrischen Energiespeicher und fördert durch technologische Fortschritte ein nachhaltiges Wirtschaften. Dabei sind viele der erzielten Ergebnisse auch auf andere Zellchemien übertragbar.

Die Erweiterung des Wissens in den Bereichen elektrochemische Grundlagen und Modellierung fördert die wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit. Gleichzeitig trägt das Projekt zur Ausbildung wissenschaftlichen Nachwuchses durch Abschlussarbeiten bei und stärkt durch Kooperationen mit Unternehmen und Forschungseinrichtungen den Wissenstransfer und die praktische Umsetzung.

Die Verwertbarkeit der Projektergebnisse wird als äußerst hoch eingeschätzt. Aufbauend auf den erzielten Fortschritten wurden bereits erfolgreich Folgeprojekte akquiriert. Die Ergebnisse werden auf Konferenzen präsentiert und in wissenschaftlichen Fachartikeln veröffentlicht, um den Wissensaustausch zu fördern und Kontakte zu potenziellen Anwendern zu knüpfen.






Diese umfassenden Verwertungsmaßnahmen tragen zur Sicherung und Schaffung von Arbeitsplätzen bei, stärken die Wettbewerbsfähigkeit der Industrie und der Forschungslandschaft in Deutschland und fördern die Weiterentwicklung des Sektors der elektrischen Energiespeicherung nachhaltig.

## II.5 Fortschritt bei anderen Stellen

Während der Projektlaufzeit von InFab wurde der Markt für stationäre Batteriespeicher intensiv beobachtet. Hierbei wurde der Fokus insbesondere auf die Entwicklung der Marktpreise von stationären Batteriespeichern gelegt. Zudem wurden speziell alternative Batteriezelltechnologien in technologischer Nähe zur Zink-Ionen-Technologie von InFab über Online-Recherchen und Messeteilnahmen beobachtet, um Markttendenzen zu identifizieren.

Generell kann festgestellt werden, dass es eine Anzahl an anderen Akteuren im Bereich der Zink-Ionen-Technologie gibt, die die Technologie auf den Markt bringen wollen.

**Tabelle 2: Übersicht über andere Marktteilnehmer im ZIB-Bereich (Auswahl).**

Name	Technologie	Stand der Technik	
<b>Urban Electric Power</b> USA, 2012 <a href="http://www.urbanelectricpower.com">www.urbanelectricpower.com</a>	Zn/MnO <sub>2</sub> , alkalischer Elektrolyt	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Pilotprojekte</b> (Größenordnung 20-1000 kWh)</li> <li>• 300-1000 Zyklen (bei DOD 50-10 %), C-Rate 1/2-1/24</li> <li>• Kostenangabe <b>50 \$/kWh</b> pro Batterie</li> </ul>	
<b>Enerpoly AB</b> Schweden, 2018 <a href="http://www.enerpoly.com">www.enerpoly.com</a>	Zn/MnO <sub>2</sub> saurer Elektrolyt (ZnSO <sub>4</sub> /MnSO <sub>4</sub> )	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zellchemie basiert auf veröffentlichter Literatur</li> <li>• Patent für nanoporöse Zink-Schaum Anoden</li> <li>• bisheriger Stand: <b>Zellkonzept</b></li> </ul>	
<b>Eos Energy Enterprises</b> USA, 2008 <a href="http://www.eose.com">www.eose.com</a>	Znyth ® Zn/X (X=Halogenid) neutraler Elektrolyt (ZnBr <sub>2</sub> , KBr, KCl, Additive)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Carbonvlies-Kathode mit Keramik-beschichtetem Titan-Stromableiter</li> <li>• jährlicher Kapazitätserhalt von 98,2 % nach 20+ Betriebsjahren, 100 % DOD, <b>C-Rate 1/3-1/12</b></li> <li>• Kostenabschätzung bis zu <b>95 \$/kWh</b> (Systemebene)</li> </ul>	
<b>Salient Energy</b> Kanada, 2016 <a href="http://www.salientenergyinc.com">www.salientenergyinc.com</a>	Zn/V <sub>x</sub> O <sub>y</sub> - bzw. Mo <sub>x</sub> O <sub>y</sub> - basierte Kathode Zn <sup>2+</sup> -Elektrolyt (pH 1-9)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Kapazität 60 Ah, Zellspannung 1,3 V,</li> <li>• Energiedichte 100 Wh.l<sup>-1</sup> bzw. <b>60 Wh.kg<sup>-1</sup></b>,</li> <li>• Zellfertigung mit <b>100 Stück/Monat</b></li> </ul>	
<b>ZincFive</b> USA, 2000 <a href="http://www.zincfive.com/">www.zincfive.com/</a>	Zn/Nickel, alkalischer Elektrolyt (KOH)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Nickel-haltige</b> Zelltechnologie, ähnlich NiMH</li> <li>• Anwendung: USV, Peak-Shaving (hohe C-Raten)</li> </ul>	

Dennoch ist bei der Marktpenetration noch kein umfassender Durchbruch der Zink-Ionen-Technologie zu erkennen. Die Gründe hierfür sind vielfältig, ähneln sich jedoch von Akteur zu Akteur (z.B. Herausforderungen auf Seiten der Langzeitstabilität oder Energiedichte).

## II.6 Veröffentlichung der Ergebnisse (erfolgt & geplant)

### Wissenschaftliche Publikationen:

- **Pross-Brakhage, J.**, Fitz, O., Bischoff, C., Biro, D. & Birke, K. P. Post-Lithium Batteries with Zinc for the Energy Transition. *Batteries* **9**, 367; 10.3390/batteries9070367 (2023).

### Konferenzposter:

- **Pross-Brakhage, J.**; Hemmerling, J; Kreher, T; Birke, K. P.; *Multidimensional model depicting the electrochemical reaction-induced dynamic pH response of zinc manganese dioxide batteries in the presence of buffer substances*. Konferenzposter, Advanced Battery Power, Aachen, April **2023**.
- **Pross-Brakhage, J.**; Meyer, J; Mehlich, C.; Birke, K. P.; *Model based insights into the performance of zinc manganese dioxide batteries in the presence of buffer substances*. Konferenzposter, Zinc-Air-Based Batteries (IZABW), Ulm, 14. September **2023**.

## Literatur

- Clark, Simon; Latz, Arnulf; Horstmann, Birger (2017): Rational Development of Neutral Aqueous Electrolytes for Zinc-Air Batteries. In: *ChemSusChem* 10 (23), S. 4735-4747. DOI: 10.1002/cssc.201701468.
- Kankanallu, Varun R.; Zheng, Xiaoyin; Leschev, Denis; Zmich, Nicole; Clark, Charles; Lin, Cheng-Hung et al. (2023): Elucidating a dissolution-deposition reaction mechanism by multimodal synchrotron X-ray characterization in aqueous Zn/MnO<sub>2</sub> batteries. In: *Energy Environ. Sci.* 16 (6), S. 2464-2482. DOI: 10.1039/d2ee03731a.
- Liu, Yi; Hu, Junping; Lu, Qiongqiong; Hantusch, Martin; Zhang, Hua; Qu, Zhe et al. (2022): Highly enhanced reversibility of a Zn anode by in-situ texturing. In: *Energy Storage Mater.* 47, S. 98-104. DOI: 10.1016/j.ensm.2022.01.059.
- Mateos, Mickaël; Makivic, Nikolina; Kim, Yee-Seul; Limoges, Benoît; Balland, Véronique (2020): Accessing the Two-Electron Charge Storage Capacity of MnO<sub>2</sub> in Mild Aqueous Electrolytes. In: *Adv. Energy Mater.* 10 (23), S. 2000332. DOI: 10.1002/aenm.202000332.
- Molaei, Erfan; Doroodmand, Mohammad Mahdi; Shaali, Ruhollah (2022): Tartaric acid as a novel additive for approaching high-performance capacity retention in zinc-ion battery. In: *Sci. Rep.* 12 (1), S. 13301. DOI: 10.1038/s41598-022-13897-5.
- Rolle, Massimo; Sprocati, Riccardo; Masi, Matteo; Jin, Biao; Muniruzzaman, Muhammad (2018): Nernst-Planck-based Description of Transport, Coulombic Interactions, and Geochemical Reactions in Porous Media: Modeling Approach and Benchmark Experiments. In: *Water Resour. Res.* 54 (4), S. 3176-3195. DOI: 10.1002/2017WR022344.
- Ronen, Rona; Atlas, Imri; Suss, Matthew E. (2018): Theory of Flow Batteries with Fast Homogeneous Chemical Reactions. In: *J. Electrochem. Soc.* 165 (16), A3820-A3827. DOI: 10.1149/2.0251816jes.
- Saaltink, M. W.; Carrera, J.; Ayora, C. (2001): On the behavior of approaches to simulate reactive transport. In: *J. Contam. Hydrol.* 48 (3-4), S. 213-235. DOI: 10.1016/S0169-7722(00)00172-8.
- Singh, Meenesh R.; Papadantonakis, Kimberly; Xiang, Chengxiang; Lewis, Nathan S. (2015): An electrochemical engineering assessment of the operational conditions and constraints for solar-driven water-splitting systems at near-neutral pH. In: *Energy Environ. Sci.* 8 (9), S. 2760-2767. DOI: 10.1039/c5ee01721a.
- Wang, Nan; Qiu, Xuan; Xu, Jie; Huang, Jianhang; Cao, Yongjie; Wang, Yonggang (2022): Cathode Materials Challenge Varied with Different Electrolytes in Zinc Batteries. In: *ACS Materials Lett.* 4 (1), S. 190-204. DOI: 10.1021/acsmaterialslett.1c00499.
- Xie, Congxin; Li, Tianyu; Deng, Congzhi; Song, Yang; Zhang, Huamin; Li, Xianfeng (2020): A highly reversible neutral zinc/manganese battery for stationary energy storage. In: *Energy Environ. Sci.* 13 (1), S. 135-143. DOI: 10.1039/C9EE03702K.
- Zeng, Xiaohui; Liu, Jiayu; Mao, Jianfeng; Hao, Junnan; Wang, Zhijie; Zhou, Si et al. (2020): Toward a Reversible Mn<sup>4+</sup>/Mn<sup>2+</sup> Redox Reaction and Dendrite-Free Zn Anode in Near-Neutral Aqueous Zn/MnO<sub>2</sub> Batteries via Salt Anion Chemistry. In: *Adv. Energy Mater.* 10 (32), S. 1904163. DOI: 10.1002/aenm.201904163.
- Zhang, Wei; Dai, Yuhang; Chen, Ruwei; Xu, Zhenming; Li, Jianwei; Zong, Wei et al. (2023): Highly Reversible Zinc Metal Anode in a Dilute Aqueous Electrolyte Enabled by a pH Buffer Additive. In: *Angew. Chem. Int. Ed.* 62 (5), e202212695. DOI: 10.1002/anie.202212695.