# Sachbericht zum Verwendungsnachweis

# Teil 1 – Kurzbericht

| **Vorhabenbezeichnung:**<br>SUSTRAB - Sustainable and transparent battery materials value chains for a circular battery economy | |
|---|---|
| **Zuwendungsempfänger**:<br>TU Braunschweig – Institut für Werkzeugmaschinen und Fertigungstechnik (IWF), Institut für Partikeltechnik (iPAT) | **Förderkennzeichen**<br>03XP0415A |
| **Projektleiter*in**<br>Prof. Dr.-Ing. Christoph Herrmann (IWF, Projektleiter)<br>Prof. Dr.-Ing. Arno Kwade (iPAT) | **Laufzeit**<br>01.10.2021<br>– 30.04.2025 |

## 1. Ursprüngliche Aufgabenstellung

Das Gesamtvorhaben SUSTRAB untersuchte Strategien zur Steigerung der Transparenz und der Ressourceneffizienz innerhalb der Produktionskette von Zellmaterialien und Batteriezellen. Die TU Braunschweig war an folgenden Arbeitspaketen beteiligt:

AP 2 - CAM-Evaluierung durch Elektroden- und Zellproduktion

In AP2 sollten im Labormaßstab verschieden Kathodenaktivmaterialien auf die Prozessierbarkeit überprüft werden. Zu diesem Zweck sollten Elektroden hergestellt hinsichtlich ihrer physikalischen und (elektro-)chemischen kapazitätsrelevanten Eigenschaften untersucht werden. Abschließend sollte eine Skalierung Pilotmaßstab erfolgen, bei dem mehrlagige Pouchzellen (2 Ah) auf Grundlage der vorangegangenen prozesstechnischen Erkenntnisse analysiert werden.

AP 3 - Konzeptionierung u. prototyp. Implementierung einer Plattform zur Datentransparenz

Ziel des AP 3 war der Aufbau einer prototypischen Plattform, die es ermöglicht von den Projektpartnern Prozessdaten aus der Batteriewertschöpfungskette zu erheben und für die weitere Bewertung in AP 4 zur Verfügung zu stellen. Dies sollte unterstützt werden durch eine umfassende Recherche technischer Anforderungen sowie einer darauf aufbauenden Konzeptentwicklung und Definition der Systemarchitektur.

AP 4 – Ressourceneffizienzstrategien und Umweltbewertung

Ziel des AP 4 war es eine ökobilanziell-konforme Datenerhebungsmaske für die Datenplattform in AP 3 zu erstellen und eine iterative Bewertung der Umweltwirkungen unterstützt durch umfassende Literaturrecherche und einer Material- und Energieflussanalyse basierend auf den im Projekt aufgenommenen Prozessdaten vorzunehmen. Abschließend sollten Strategien zur Steigerung der Ressourceneffizienz und Dekarbonisierung in der Batteriewertschöpfungskette abgeleitet werden.

## 2. Ablauf des Vorhabens

Aufgrund der Auswirkungen der COVID-19-Pandemie verzögerte sich zunächst die Materiallieferung durch die australischen assoziierten Partner auf Ende 2022/Anfang 2023, wodurch die Experimente und die für die ökologische Bewertung notwendige Datenerhebung erst später als geplant durchgeführt werden konnten. Entsprechend wurde das Abbruchkriterium („Erfolgreiche Materialsynthese und Nachweis der Prozessierbarkeit der Kathoden aus Primär- und Sekundärmaterial“) nach bewilligter kostenneutraler Verlängerung erst im September 2023 erreicht. Die folgenden Meilensteine 2 und 3 wurden ebenfalls mit einer Verzögerung von 6 Monaten erfolgreich erreicht. Da die Arbeiten zum Aufbau des Demonstrators in AP3 sich als umfangreicher als geplant herausstellten, wurde das Projekt Anfang 2025 erneut um einen Monat bis 30.04.2025 kostenneutral verlängert und danach erfolgreich abgeschlossen.

## 3. Wesentliche Ergebnisse

AP 2 - CAM-Evaluierung durch Elektroden- und Zellproduktion (iPAT)

In AP2 konnte gezeigt werden, dass die Wahl optimaler Prozessparameter während der Dispergierung bzw. Suspensionsherstellung einen signifikanten Einfluss auf den Rußaufschluss, auf die innere Struktur der Elektrode und damit auch auf die elektrochemische Performance hat. Der Einfluss des Rußaufschlusses konnte dabei vor allem über die Etablierung der Impedanzmessung als Analysetool quantifiziert werden. Aus diesem Grund konnten für alle zur Verfügung gestellten Aktivmaterialien passende Prozessrouten entwickelt werden. Zusätzlich konnten bezüglich des Zellbaus optimale Trocknungsparameter identifiziert und über einen Elektrolytzusatz die Stabilität der Zelle während der Zyklisierung gestärkt werden. Mit Hilfe dieser Erkenntnisse konnten erfolgreich mehrlagige Pouchzellen mit 2 Ah für alle nickelreichen Aktivmaterialien, die aus primären und sekundären Rohstoffen hergestellt wurden, produziert und elektrochemisch getestet werden.

AP3 - Konzeptionierung & prototyp. Implementierung einer Datentransparenz-Plattform (IWF)

In AP3 wurde im Rahmen der technischen Anforderungsanalyse untersucht, wie Lebenszyklusdaten über eine Prozess- und Akteur-übergreifende Datentransparenzplattform gespeichert und verarbeitet werden können. Im Fokus der anschließenden Technologieauswahl standen Distributed-Ledger Technologien, insbesondere die Blockchain-Architektur Hyperledger Fabric. Dies ermöglichte den Aufbau eines Technologiedemonstrator auf TRL 4, welcher in einem verteilten Netzwerk beteiligten Organisationen eine vertrauenswürdige Umgebung für den Austausch von Daten bietet. Im Rahmen von so genannte Smart Contracts wurde u.a. die Verarbeitung von Inventardaten und Bilanzierung des $CO_2$-Fußabdrucks ermöglicht. Die Implementation eines Demonstrators für eine Blockchain-basierte Transparenzplattform wurde in der bestehenden Infrastruktur des IWF und des EducationLab @Braunschweig LabFactories for Batteries and more (BLB+) realisiert.

AP 4 – Ressourceneffizienzstrategien und Umweltbewertung (IWF)

Im Rahmen der Literaturrecherche zu den Produktionsrouten der Batteriematerialien wurden zunächst große Datenlücken und Variabilität bei den bestehenden Sachbilanzen und Umweltwirkungen identifiziert, welche im weiteren Projektverlauf mit Unsicherheitsanalysen quantifiziert wurden. Für die Aufnahme eigener Prozessdaten wurde eine Datenerhebungsmaske als Web-Applikation basierend auf einem umfassenden Anforderungskatalog umgesetzt. Die aufgenommenen Prozessdaten wurden mithilfe von Material- und Energieflussanalysen und Ökobilanzierungen ausgewertet. Beispielsweise konnte für die CAM-Synthese eine hohe Abhängigkeit der Umweltwirkung vom Strommix sowie der Nickel-Produktionsroute festgestellt werden. Entsprechende Dekarbonisierungsstrategien wurden abgeleitet und mit Projektpartnern diskutiert.

# Sachbericht zum Verwendungsnachweis

# Teil 2 – Eingehende Darstellung

| **Vorhabenbezeichnung:**<br>SUSTRAB – Sustainable and transparent battery materials value chains for a circular battery economy | |
|---|---|
| **Zuwendungsempfänger**:<br>TU Braunschweig – Institut für Werkzeugmaschinen und Fertigungstechnik (IWF)<br>TU Braunschweig – Institut für Partikeltechnik (iPAT) | **Förderkennzeichen**<br>03XP0415A |
| **Projektleiter*in**<br>Prof. Dr.-Ing. Christoph Herrmann (IWF, Projektleiter)<br>Prof. Dr.-Ing. Arno Kwade (iPAT) | **Laufzeit**<br>01.10.2021<br>– 30.04.2025 |

## 1. Durchgeführte Arbeiten und erzielte Ergebnisse des Teilvorhabens

**Arbeitspaket 2: Kathodenaktivmaterialien-Evaluierung durch Elektroden- und Zellproduktion (iPAT)**

In AP2 wurden die vom Partner BASF bereitgestellten Referenz-CAM´s hinsichtlich der Prozessierbarkeit und der vorliegenden Elektroden- und Suspensionseigenschaften analysiert. In der folgenden Tabelle sind die verschiedenen Kathodenaktivmaterialien dargestellt, die im Verlaufe des Berichts über die angegebenen Namen differenziert werden (siehe Tabelle *1*). An dieser Stelle wurden vier verschiedene Materialien untersucht, die sich im Nickelanteil und in der Herkunft des Nickelrohmaterials unterscheiden und gemessen an den vorliegenden Verunreinigungen des CAM24051 in Bezug auf die Menge an Verunreinigungen eingeordnet werden (siehe AP1).

Tabelle 1: Auflistung der verwendeten Aktivmaterialien in Bezug auf die Zusammensetzung, die Herkunft der Rohmaterialien und dem Anteil an Verunreinigungen in Bezug auf CAM24051

| Name | Zusammensetzung | Nickel | Kobalt | Anteil-Verunreinigungen |
|---|---|---|---|---|
| Referenzmaterial | $LiNi_{0,83}Co_{0,05}Mn_{0,12}O_2$ | primär | primär | mittel |
| CAM2023 | $LiNi_{0,91}Co_{0,045}Mn_{0,045}O_2$ | primär | primär | hoch |
| CAM24051 | $LiNi_{0,91}Co_{0,045}Mn_{0,045}O_2$ | sekundär | primär | niedrig |
| CAM24052 | $LiNi_{0,91}Co_{0,045}Mn_{0,045}O_2$ | sekundär | sekundär | mittel |

Um die Prozessierbarkeit und den Einfluss verschiedener Prozessparameter auf den spezifischen Energieeintrag beziehungsweise die vorliegenden Beanspruchungsintensitäten und die damit verbundenen Elektrodeneigenschaften und Zelleigenschaften zu analysieren, wurde im ersten Schritt das Referenzmaterial zur Herstellung verschiedener Suspensionen benutzt. Dies resultiert vor Allem aus der Tatsache, dass das Referenzmaterial seit Beginn des Projektes und in einer deutlich höheren Menge verfügbar war. Die verwendete Rezeptur stellt eine Standardrezeptur dar, die in Tabelle 2 dargestellt ist. Als Lösungsmittel dient N-Methyl-2-Pyrrolidon (NMP).

*Tabelle 2: Anteile der benutzten Materialen für die Herstellung der Kathoden-Suspensionen*

| | |
|---|---|
| **NMC831205 [%]** | 95,00 |
| **Super C65 [%]** | 2,00 |
| **PVdf 5130 [%]** | 3,00 |
| Feststoffgehalt in NMP [wt.%] | 70,00 |

Zu Beginn der Untersuchungen wurden die Aktivmaterialien bezüglich Partikelgröße mittels Laserbeugungsspektrometer und Restitionskoeffizenten CoR mittels Nanoindenter analysiert, um im Anschluss mögliche Einflüsse auf die Dispergierung zu identifizieren. Die dazugehörigen Daten sind in Tabelle 3 dargestellt.

*Tabelle 3: Darstellung des Restitutionskoeffizienten und der Partikelgröße der einzelnen Aktivmaterialpartikel*

| Material | Restitutionskoeffizient | Partikelgröße [µm] |
|---|---|---|
| Referenzmaterial | 0,840 + 0,026 | 12,47 |
| CAM2023 | 0,730 + 0,039 | 13,12 |
| CAM 24052 | 0,688 + 0,055 | 12,72 |
| CAM 24051 | 0,701 + 0,032 | 12,66 |

Bezüglich der Partikelgröße ist kein signifikanter Unterschied festzustellen. Der Restitutionskoeffizient beschreibt an dieser Stelle das elastische bzw. inelastische Verhalten der Aktivmaterialpartikel. Ein Wert von 1 bedeutet, dass sich die Partikel perfekt elastisch verhalten, und ein Wert von 0, dass sie sich perfekt inelastisch verhalten. In Tabelle 3 ist zu erkennen, dass das Referenzmaterial als elastischer einzuschätzen ist im Vergleich zu NCM91, CAM24052 und CAM24051. Insbesondere bei diesen Aktivmaterialien sind bei den Messungen auch mehr Partikelbrüche aufgetreten. Dies kann dazu führen, dass während der Dispergierung Aktivmaterialpartikel geschädigt werden und das Ergebnis des Dispergierprozesses verschlechtert wird. Eine abschließende Bewertung des Einflusses dieser Partikeleigenschaft wird in der weiteren Diskussion der Testreihe durchgeführt.

Zur Herstellung der Suspensionen wurden im ersten Schritt die pulverförmigen Materialien in einem 3D-Schüttelmischer homogenisiert. Die pulverförmigen Materialien wurden dabei immer im Trockenraum mit einem Taupunkt < -45 °C verarbeitet, da der erhöhte Nickelanteil zu einer erhöhten Wasseradsorption führt und damit Nebenreaktionen eingeleitet werden können, die sowohl die Dispergierung, die Beschichtung, als auch die Zellperformance beeinflussen können (siehe Paper). Anschließend wurde der Pulvermix im Lösungsmittel ebenfalls unter trockener Atmosphäre eindispergiert. Die finale Dispergierung erfolgte in einem Dissolver der Marke VMA-Getzmann. Der generelle Aufbau ist in Abbildung 1 dargestellt.

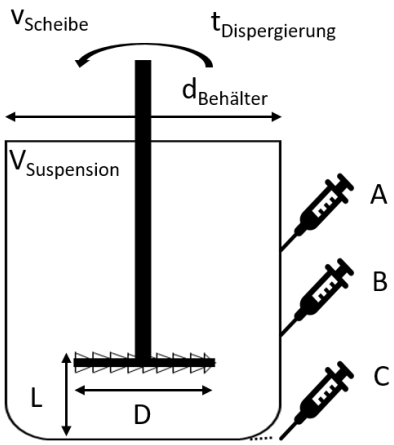



*Abbildung 1: Darstellung des generellen Versuchsaufbaus inklusive der verstellbaren Prozessparameter*

Der Dissolver besteht dabei aus einem Behälter mit dem Durchmesser $d_{Behälter}$ mit einer drehender Dissolverscheibe mit dem Durchmesser D und einer Höhe L zum Behälterboden. $t_{Dispergierung}$ beschreibt die Dispergierzeit und $V_{Suspension}$ das Volumen der Suspension im Behälter. Ziel der Dissolverstudie war insbesondere, den Einfluss der Größe und Geometrie auf das Dispergierergebnis quantitativ erfassen zu können, um von sehr kleinen Ansätzen auf große Ansätze hoch extrapolieren zu können. Das Volumen der Suspension wird dabei immer über $V_{Suspension} = V_{Behälter} \cdot 0{,}6$ bestimmt. Im ersten Schritt der Versuchsreihe wird der Einfluss von verschiedenen Scheibengeschwindigkeiten und Dispergierzeiten untersucht. Dabei wurden Geschwindigkeiten von 3 bis 15 $ms^{-1}$ bei Dispergierzeiten von 30, 60 und 90 min untersucht. Für diese Untersuchung wurde eine Ansatzgröße von 250 ml, das einem Suspensionsvolumen von 150 ml entspricht, ausgewählt. Der Scheibendurchmesser wurde mit D = 30 mm konstant gehalten. Die Ergebnisse sind in Abbildung 2 dargestellt.

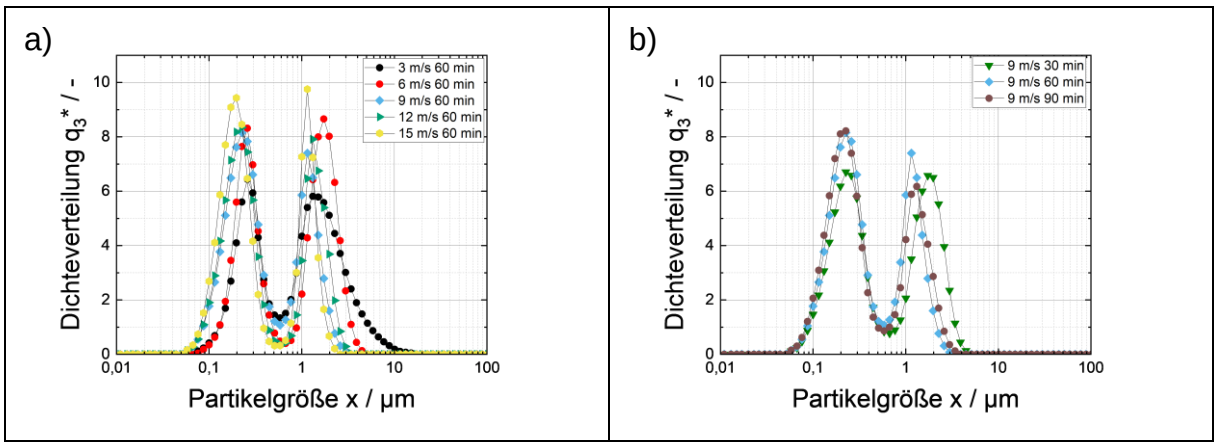



*Abbildung 2: Darstellung der Partikelgrößenverteilungen (Dichteverteilung) bei verschiedenen a) Umfangsgeschwindigkeiten des Dissolvers und b) Dispergierzeiten*

Abbildung 2 a) zeigt, dass eine Erhöhung der Scheibengeschwindigkeit bzw. des Energieeintrags den Rußaufschluss verbessert, sichtbar durch eine Linksverschiebung der Aggregat- und Agglomerat-Peaks. Das Aufbrechen stößt jedoch an ein durch die minimale Aggregatgröße begrenztes Minimum, welches von der eingestellten Umfangsgeschwindigkeit und damit der Beanspruchungsintensität abhängt. Abbildung 2 b) verdeutlicht, dass eine längere Dispergierzeit bei konstanter Geschwindigkeit den Anteil der Aggregate bis zu einer Dispergierdauer von 60 min erhöht, ohne dass sich der Aggregat-Peak verschiebt. Dies weist auf eine hohe Stabilität des Ruß-Binder-Netzwerks und die nicht auftretende Reagglomeration hin. Bei 3 m/s

wurde ein unzureichender Aufschluss festgestellt, während sich bei 15 m/s nicht reproduzierbare Ergebnisse einstellten, bedingt durch Freidreh- und Inhomogenitätseffekte. Daher wurden 9 m/s als geeignete Geschwindigkeit sowie 60 min als Dispergierdauer für die weiteren Untersuchungen gewählt. Zusätzlich zu der Partikelgröße wurden ebenfalls auch die dynamischen Viskositäten gemessen. Die Viskositätsverläufe weisen dabei alle ein scherverdünnendes Verhalten auf. Dieses wird benötigt, um eine qualitativ hochwertige Beschichtung zu ermöglichen. Mit steigender Scheibengeschwindigkeit verringert sich die Viskosität durch den vermehrten Aufschluss von Rußagglomeraten und die Freisetzung eingeschlossenen Lösungsmittels. Bei hohen Scherraten (> 200 $s^{-1}$) verstärkt der Spaltaustrag diesen Effekt deutlich. Insgesamt bleiben die Viskositäten in allen Prozessparametereinstellungen für eine diskontinuierliche Beschichtung ausreichend niedrig.

Im nächsten Schritt wurden die Scheibendurchmesser und die Höhe L variiert. Zusätzlich werden nach jedem Versuch Proben an den Stellen A, B und C gezogen, um bezüglich der Partiklegrößenverteilung Rückschlüsse auf die Homogenität zu ziehen. An dieser Stelle wurden Scheibendurchmesser von D = 30, 40 und 50 mm bei Höhen L von 10 bis 90% untersucht. Die Resultate sind in Abbildung 3 dargestellt.

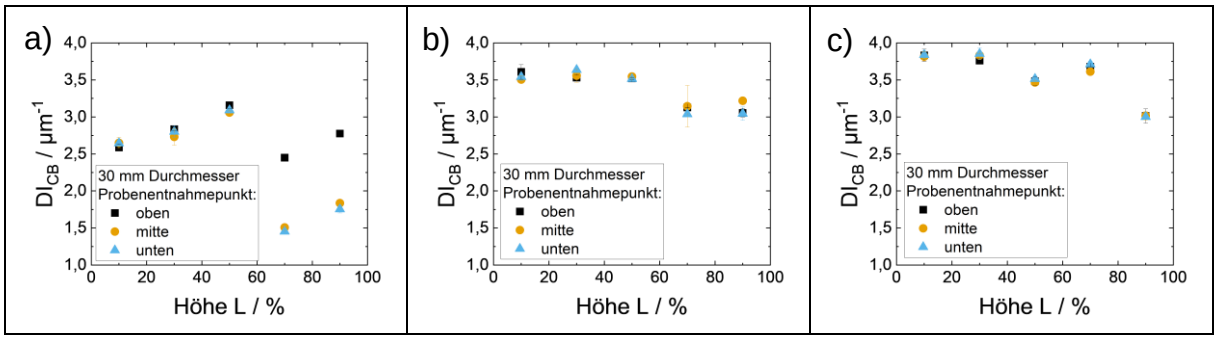



*Abbildung 3: Darstellung der $DI_{CB}$´s (Dispersion Index of Carbon Black) über die Höhe der Dissolverscheibe (H) in Abhängigkeit des Durchmessers der Dissolverscheibe ($d_{Scheibe}$) mit a) 30 mm, b) 40 mm und c) 50 mm für drei verschiedene Höhen der Probenahme im Ansatzbehälter nach der Dispergierung*

Abbildung 3 zeigt den Einfluss der Scheibenhöhe L auf den Rußaufschluss in der Suspension. Bei geringer Höhe bildet sich der Flüssigkeitskegel unzureichend aus, wodurch die Umwälzung ineffizient ist. Mit zunehmender Höhe steigt der Rußaufschluss zunächst an, erreicht jedoch ab etwa 50 % Höhe – insbesondere bei Scheibendurchmessern von 40 und 50 mm – ein Plateau mit deutlichem Abfall des Dispergierindex ($DI_{CB}$). Ursache hierfür sind Totzonen unter der Scheibe sowie verstärkter Lufteintrag, die zu inhomogener Beanspruchung und ungleichmäßiger Partikelgrößenverteilung führen. Dies äußert sich in höheren Standardabweichungen der $DI_{CB}$-Werte. Darüber hinaus zeigt sich eine Durchmesserabhängigkeit: Mit größerem Scheibendurchmesser verringert sich der Abstand zur Behälterwand, wodurch die Flüssigkeitstrombe intensiver ausgebildet wird. Die erhöhte Strömungsgeschwindigkeit im Spalt erzeugt Unterdruck, verstärkt die Trombenbildung und steigert die Scherintensität. Auf diese Weise lassen sich bei kleinerer Scheibenhöhe höhere $DI_{CB}$-Werte erreichen. Bei kleineren Durchmessern (30/40 mm) bleibt hingegen der Randbereich teilweise unbeeinflusst, während bei 50 mm Durchmesser Homogenitätsprobleme auch bei größerer Höhe kaum auftreten. Zur Untersuchung des Einflusses auf die Elektrodeneigenschaften wurden Referenz-Kathodensuspensionen hergestellt, beschichtet (2,7 mAh/cm²), unter Argon kalandriert und anschließend mittels elektrochemischer Impedanzspektroskopie, Leitfähigkeits- sowie Haftfestigkeitsmessungen charakterisiert. Ergänzend erfolgten Feuchtigkeitsanalysen der Elektroden mittels Karl-Fischer-Titration. Abbildung 4 zeigt die Ergebnisse für einen Zeitraum von 1 bis 48 h unter normaler und trockener Atmosphäre.

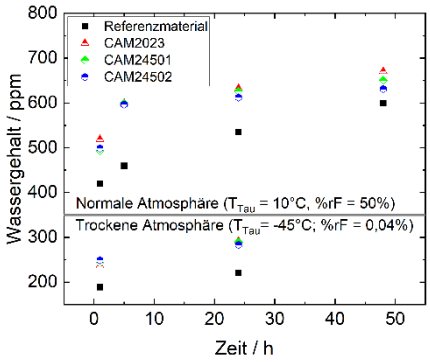



*Abbildung 4: Darstellung des Wassergehaltes der mit den verschiedenen Aktivmaterialien hergestellten Elektroden bei normaler und trockener Umgebungsatmosphäre in einem Zeitraum von 1 bis 48 h*

Es ist deutlich zu erkennen, dass der Feuchtegehalt der mit nickelreichen Materialien beschichteten Elektroden gegenüber der Referenzelektrode erhöht ist, bei normaler wie auch bei trockener Atmosphäre.. Des Weiteren ist aber kein signifikanter Unterschied zwischen den nickelreichen Materialien ersichtlich. Aufgrund der erhöhten Feuchtesensitivität wurden daran anknüpfend verschiedene Trocknungsprozeduren getestet, um die Eigenschaften der Elektrode und der daraus resultierenden Performance zu verbessern. Es ergab sich eine optimale Trocknungstemperatur von 120 °C bei einer Dauer von 2 h.

Im Folgenden wurden dann die nickelreichen Kathoden (CAM2023, CAM24051, CAM24051) bei den aus den Versuchen resultierenden besten Prozessparameter-Kombinationen bezüglich Zellperformance und strukturellen Eigenschaften unter der oben beschriebenen Trocknungsvorbereitung hergestellt (D = 30 mm; L = 50%). Damit kann untersucht werden inwiefern der erhöhte Nickelanteil und die Herkunft des Nickelrohmaterials die Dispergierung im Dissolver und die Elektrodeneigenschaften beeinflusst. Die aus Referenzmaterial hergestellten Elektroden wurden für die Messungen ebenfalls mit der oben beschriebenen Trocknungsprozedur getrocknet.

Die in Abbildung 5 a) bis d) gezeigten Verläufe wurden bereits von Grenda et al. detailliert beschrieben und analysiert [1]. Abbildung 2 zeigt die aus EIS-Messungen bestimmten Widerstände: a) Kontaktwiderstände zwischen Stromsammler und Beschichtung, b) Volumenwiderstände über die Elektrodenstärke sowie c) die ionischen Transportwiderstände. Kontakt- und Volumenwiderstand verlaufen polynomiell mit einem Minimum bei einem $DI_{CB}$ von ca. 2,8–3,0 $\mu m^{-1}$. Niedrige $DI_{CB}$-Werte begünstigen große Rußagglomerate mit verringerter Oberfläche, wodurch die Leitfähigkeit an der Aktivmaterialoberfläche sinkt („short-range resistance“), während die Leitfähigkeit zwischen Partikeln („long-range resistance“) verbessert ist. Bei hohen $DI_{CB}$ liegen dagegen viele kleine Aggregate vor, die die Oberfläche effizienter nutzen (reduzierte short-range resistance), jedoch aufgrund geringerer Porosität und reduzierter Kontaktpunkte die long-range resistance und den Kontaktwiderstand erhöhen. Letzteres wird zusätzlich durch eine unzureichende mechanische Integrität der Beschichtung verstärkt. Der ionische Widerstand steigt dagegen mit zunehmendem $DI_{CB}$ nahezu linear an, was durch kleinere Poren und erhöhte Tortuosität bedingt ist und durch Porengrößenanalysen bestätigt wurde. Auch die Haftfestigkeit folgt einem ähnlichen Trend. Abschließend wurden die Elektroden elektrochemisch in EL-Cells getestet. Die Kapazitätsmessungen bei 2C und 3C weisen ebenfalls ein Optimum im $DI_{CB}$-Bereich von 2,75 bis 3,00 $\mu m^{-1}$ auf (Abbildung 5 d)). Die entsprechenden Parametereinstellungen wurden für die Herstellung nickelreicher Kathoden übernommen, um deren Einfluss zu evaluieren. [2], [3], [4]

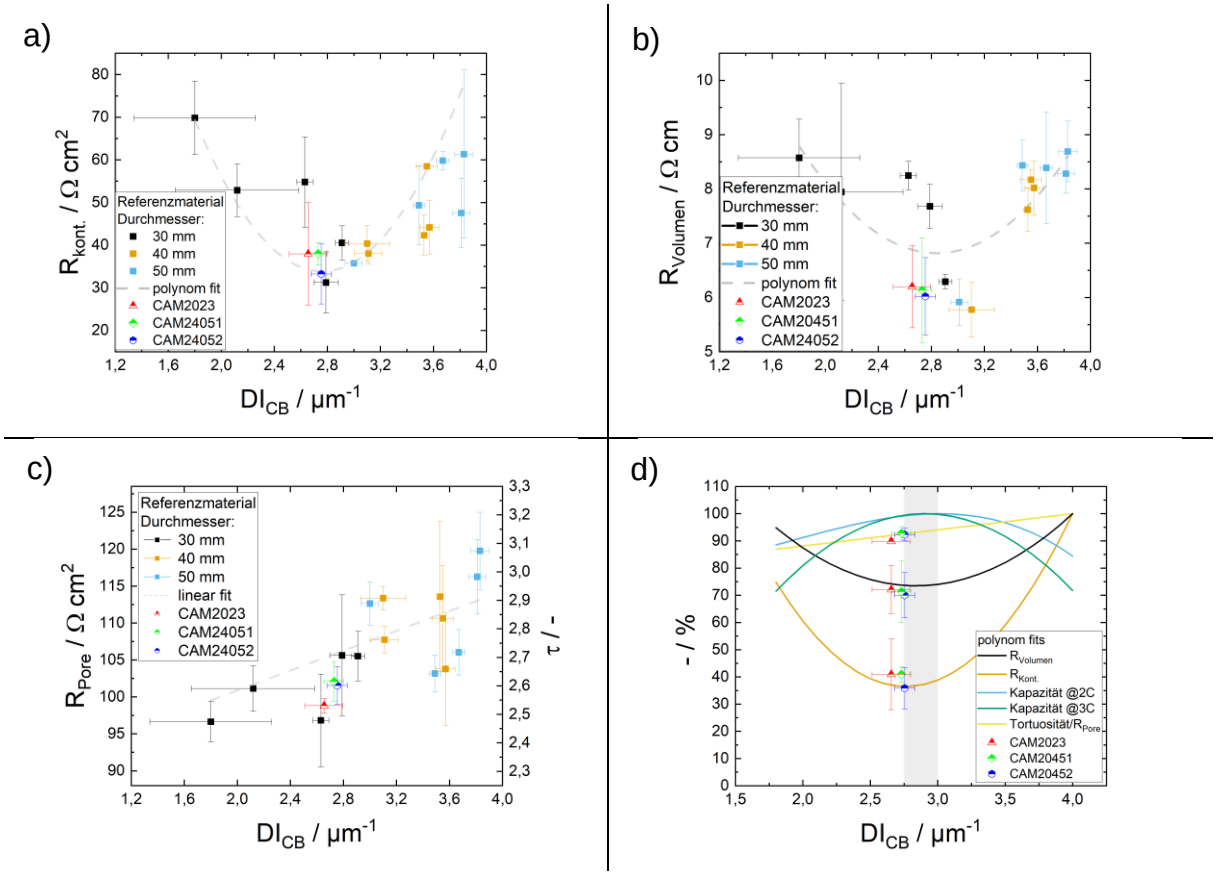



*Abbildung 5: Darstellung des a) Kontaktwiderstandes b) des Volumenwiderstandes c) des Porenwiderstandes und d) der mathematisch gefitteten Kurven aller Elektrodeneigenschaftsparameter des Referenzmaterials bei verschiedenen Dissolverscheibendurchmessern sowie der verarbeiteten nickelreichen Aktivmaterialien bei den besten Prozessierbedingungen.*

Die Ergebnisse der nickelreichen Kathodenmaterialien, die ebenfalls in den Abbildung 5 a) bis d) dargestellt sind, zeigen, dass bei gleichem $DI_{CB}$ auch dieselben strukturellen Eigenschaften bezüglich der Elektrode erzeugt werden. Die Ergebnisse aus der Haftfestigkeitsmessung und der Untersuchung des Restitutionsfaktors mittels Nanoindentation bestätigen diesen Trend. Daraus lässt sich schließen, dass der Dispergierprozess durch die nickelreichen Aktivmaterialien prinzipiell nicht beeinflusst wird und äquivalent zum Produktionsprozess der Referenzkathode abläuft. Damit sind bei optimaler Parameterwahl ebenfalls die besten strukturellen Elektrodeneigenschaften vorhanden.

Abschließend wurden die hergestellten Elektroden ebenfalls auf die elektrochemische Performance getestet und mit der Referenzelektrode verglichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6 dargestellt. In Abbildung 6 a) ist die Spannung über die spezifische Kapazität im ersten Lade- und Entladeschritt dargestellt. Alle Elektroden besitzen eine irreversible Kapazität von ungefähr 20 mAh $g_{NCM}^{-1}$. Dieser Wert entspricht Literaturdaten und zeigt, dass kein Aktivmaterial während der Prozessierung irreversibel beschädigt wurde oder chemische Nebenreaktionen aufgetreten sind, die zu deutlich höheren irreversiblen Kapazitäten geführt hätte.

In Abbildung 6 b) ist ebenfalls deutlich zu erkennen, dass der Kapazitätsabfall in den ersten Zyklen bei höheren C-Raten mit höherem Nickelanteil in Vergleich zum Referenzmaterial deutlich steigt. Dies ist auf mögliche Mikrorisse zurückzuführen, da es mit erhöhtem Nickelanteil zu einer intensiveren Volumenausdehnung kommt. Diese begünstigen eine erneute Bildung der sogenannten CEI und führen damit zu kinetischen Limitierungen an der Aktivmaterialoberfläche. Des Weiteren kommt es während der Ladevorgänge zu Phasenübergängen zu „rocksalt“-Strukturen innerhalb des Aktivmaterials, die ebenfalls eine erhöhte Diffusionslimitierung der Lithium-Ionen hervorrufen [5]. Diese Limitierung ist bei hohen C-Raten ausgeprägter, da

mehr Lithium-Ionen in der Schichtstruktur des NCM zurückbleiben und es dadurch vermehrt zur Kationenmischung mit den Übergangsmetalloxiden kommt. Dadurch entstehen sogenannte „spinel"-Strukturen, die weniger reversibel sind, als die ausgeprägten „rock-salt"-Strukturen. Dieses Phänomen ist mit erhöhtem Nickelanteil ausgeprägter, da mehr Nickel-Kationen vorhanden sind und die Barriere zum Einlagern in der Lithium-Ebene verringert ist. [6], [7] Ein Indiz für das Vorkommen dieses Phänomens ist ebenfalls der konstante Kapazitätsunterschied innerhalb einer C-rate, ohne dass kontinuierlich die Kapazität abfällt.

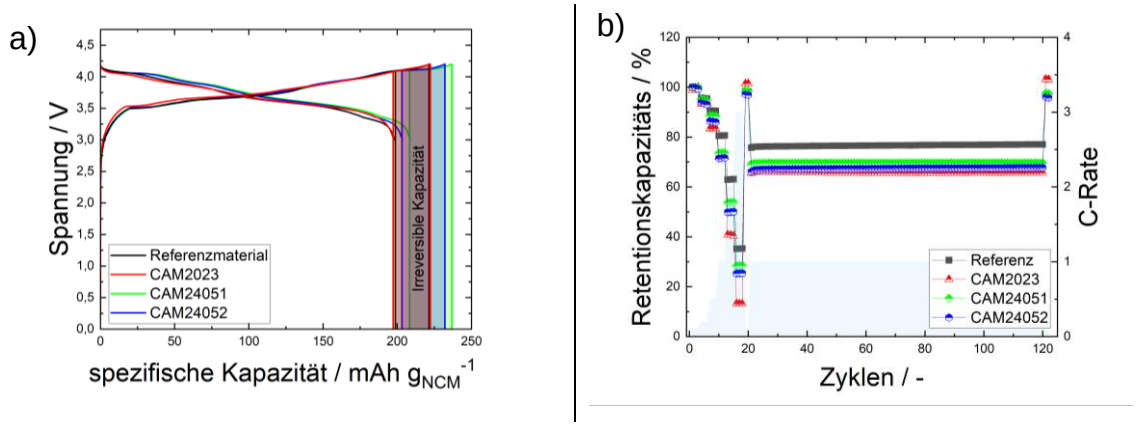



*Abbildung 6: Darstellung des a) ersten Lade- und Entladeschritt inklusive irreversibler Kapazität und b) der Retentionskapazität für alle verarbeiteten Aktivmaterialien bei den besten Prozesssierungsparametern*

Abschließend ist vor allem bei hohen C-Raten ein signifikanter Unterschied zwischen den nickelreichen CAM´s zu erkennen. Diese sind auf die in Tabelle 1 dargestellten Verunreinigungen zurückzuführen. Sowohl Ku et al., als auch Heelan et al. und Zhang et al. beobachten eine Senkung der Retentionskapazität vor allem bei hohen C-Raten in Zusammenhang mit gesteigerten Mengen an Verunreinigungen in Bezug auf metallische und nicht-metallische Inhaltsstoffe [8], [9], [10].

Im letzten Schritt des AP2 wurden 2Ah-Zellen angefertigt. Zu diesem Zweck wurden die vorher analysierten CAM´s mit Ausnahme von CAM2023, da hier eine zu geringe Menge bereitgestellt wurde, kontinuierlich doppelseitig mit einem Flächengewicht von 13,61 mg $cm^{-2}$ bzw. im Falle des Referenzmaterials von 14,26 mg $cm^{-2}$ beschichtet. Die Suspensionsvorbereitung erfolgte bei den herausgearbeiteten optimalen Prozessparametern im Dissolver bei einer Umfangsgeschwindigkeit von 9 m $s^{-1}$, einem Dissolverscheibendurchmesser von 30 mm, einer Dissolverscheibenhöhe von 50 % und einer Dispergierdauer von 60 min. An dieser Stelle wurde von einer kontinuierlichen Produktion im Extruder abgesehen, da keine Verarbeitung unter trockener Atmosphäre möglich gewesen wäre und dies aufgrund der Feuchtesensitivität der Materialien obligatorisch ist. Die doppelseitig beschichteten Elektroden wurden dann anschließend kontinuierlich auf eine Dichte von 3,0 g $cm^{-3}$ kalandriert. Als Gegenelektrode wurden Anoden mit einem Flächengewicht von 9,2 mg $cm^{-2}$ kontinuierlich hergestellt und auf eine Dichte von 1,1 g $cm^{-3}$ kalandriert. Damit werden pro Stack-Zelle 14 Lagen eingebaut bei einem Balancing von N/P = 1,1. Die Kathode hatte dabei eine Flächenkapazität von 2,84 mAh $cm^{-2}$ und die Anode von 3,12 mAh $cm^{-2}$ pro Lage. Die Ergebnisse des C-Ratentests und der Langzeitzyklisierung sind in Abbildung 7 abgebildet.

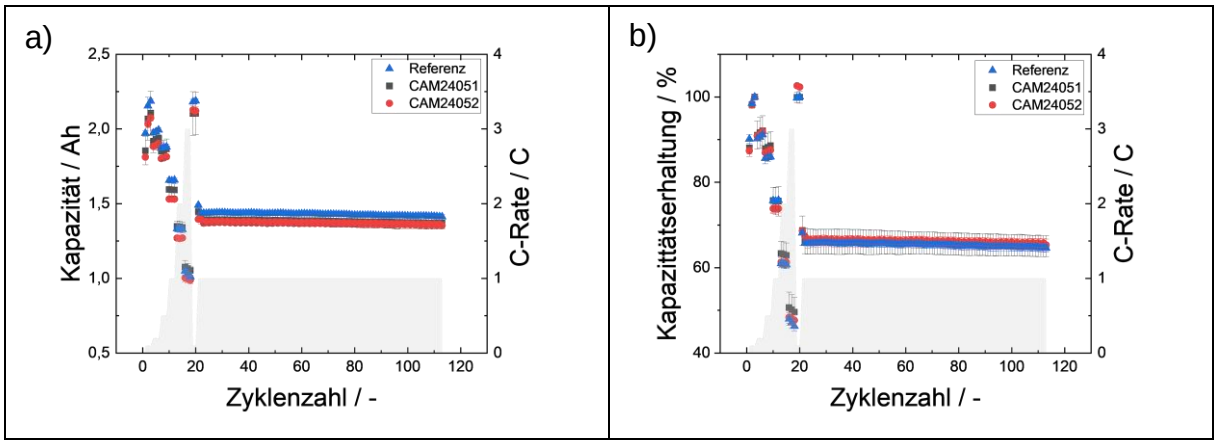



*Abbildung 7: Darstellung der a) Kapazitätsverläufe und b) der Kapazitätserhaltung in Abhängigkeit der Zyklenanzahl und C-Rate für die Mehrlagen-Pouchzellen mit einer Kapazität von 2Ah*

In Abbildung 7 a) ist deutlich zu erkennen, dass keine wesentlichen Alterungseffekte in Form von Kapazitätsverlusten über die Zyklenzahl auftreten. Des Weiteren wurden für jede Zelle die geforderten 2 Ah erreicht. Zusätzlich zeigen alle Variationen einen ähnlichen Verlauf bezüglich der Kapazität über die Variation der C-Rate auf. In Abbildung 7 b) ist zu erkennen, dass auch die normierte Kapazität, also der Kapazitätserhalt normiert auf die maximale Kapazität, einen ähnlichen Verlauf aufweist. An dieser Stelle ist also festzustellen, dass im Vergleich zu den im El-Cell Format gemessenen Zellen, kein signifikanter Unterschied aufgrund der unterschiedlichen Nickelanteile vorhanden ist. Das könnte an der Tatsache liegen, dass innerhalb der Zellen Balancing-Abweichungen vorliegen, da die beschichteten Flächengewichte eine leichte Abweichung pro Lage aufweisen. Das kann dazu führen, dass vor Allem die Referenz schlechtere Ergebnisse zeigt als im kleinen Maßstab gemessen. Dies verdeutlicht die Wichtigkeit einer reproduzierbaren und skalierbaren Prozesskette, damit die Qualitätsparameter eingehalten werden können.

Im Projektjahr 2024 wurden ebenfalls die internationalen Vernetzungen zu den Projektpartnern in Australien verstärkt, indem es vor allem einen fachlichen Austausch vor Ort am Standort TU Braunschweig gab. Im Rahmen des Projektes war zudem ein Mitarbeiter der FBICRC am Institut für Partikeltechnik zu Gast und es konnten wertvolle Informationen bezüglich des Projektes ausgetauscht und produktionstechnisches Knowhow weitergegeben werden.

## Arbeitspaket 3: Konzeptionierung und prototypische Implementierung einer Plattform zur Datentransparenz (IWF)

Arbeitspaket 3 umfasste die Konzeptionierung und Implementierung einer prototypischen Plattform zur Steigerung der Transparenz und Nachhaltigkeit in der Batteriematerialwertschöpfungskette. Sie bietet Funktionalitäten, die die Verfügbarkeit und Rückverfolgbarkeit von Informationen über Prozesse und (Zwischen-)Produkten, die Automatisierung von Berichtsmechanismen in Smart Contracts sowie eine verbesserte Entscheidungsfindung unterstützen. Die Plattform ermöglicht Varianzen in der Wertschöpfungskette und deren Auswirkungen auf den $CO_2$-Fußabdruck, den Recyclinganteil und weitere Produktinformationen zu demonstrieren.

### UAP 3.1: Definition von technischen Anforderungen

Ziel des AP 3.1 war die Definition von technischen Anforderungen für eine Transparenzplattform in der Batteriematerialwertschöpfungskette. Zur Erreichung dieser Ziele, und des dazugehörigen Meilensteins, wurde wie folgt vorgegangen.

Zwecks Anforderungsanalyse wurden verschiedene Informationsquellen zusammengetragen. Dazu gehören Gesetzestexte, aktuelle Publikationen über die Anforderungen an digitale Produktpässe und industriellen Informationsaustausch, Beiträge aus Webinaren und Vorträgen (u.A. des IPCEI Batteries), Experteninterviews sowie der direkte Austausch mit Industrie und Wissenschaft auf Konferenzen (CIRP Conference on Life Cycle Engineering 2023), Messen (International Mining and Resources Conference 2022, Hannover Messe 2022 und 2023) und weiteren Formaten (u.A. Treffen mit VertreterInnen der australischen Bergbauindustrie in Berlin im Juni 2024).

Darüber hinaus diente die EU-Verordnung über Batterien und Altbatterien (BattVO) sowie der Vorschlag der Kommission über das Ökodesign für nachhaltige Produkte (ESPR) als Vorlage für die Anforderungen an Wirtschaftsakteure in der Europäischen Union Transparenz über Produktinformationen in digitalen Produktpässen zu schaffen. Dies umfasst u.A. generelle Informationen über den Hersteller, den Herstellungsort, verpflichtende Kennzeichnungen und Zertifikate, den $CO_2$-Fußabdruck, Informationen über die chemische Zusammensetzung der Batterien, den Anteil genutzter Sekundärrohstoffe sowie das Gewicht, die Leistung und Lebensdauer einer Batterie. Darüber hinaus ist angezeigt, spezifische Nachhaltigkeitsanforderungen festzulegen, z.B. die schrittweise Einführung von $CO_2$-Effizienzklassen und -Grenzwerten. Verantwortlich für die Bereitstellung dieser Informationen sind die Wirtschaftsakteure, die Batterien in Verkehr bringen oder in Betrieb nehmen. Nach Artikel 49 (1(d)) der EU BattVO müssen diese Wirtschaftsakteure ein System zur Überwachung der Lieferkette in Betrieb nehmen.

Die Recherchen im Projekt zeigten, dass die Bezugsquellen von Materialien und die damit einhergehenden Umweltwirkungen stark voneinander abweichen können [11], [12]. Entsprechend wurden Anforderungen für die Berechnung des $CO_2$-Fußabdrucks definiert, um Primärdaten nicht nur für die Zellproduktion, sondern auch für die Materialvorkette über die Transparenzplattform zu erheben.

Nach Artikel 49(1(d)) der EU Batterieverordnung müssen Wirtschaftsakteure ein System zur Überwachung der Lieferkette in Betrieb nehmen (auch genannt: Traceability System / Chain of Custody System / Backendsystem des Wirtschaftsakteurs / Transparenzplatform).

Diese "Transparenzplattfrom" MUSS …

- den vorgelagerten **Akteuren** in der Lieferkette den Zugang ermöglichen (Artikel 49 (1(d)) BattVO),
- die Bereitstellung **verpflichender Informationen** ermöglichen (Artikel 7, 8, 10, 13, 14, 45, 60, sowie Anhang IV, VI, VII, XIII BattVO, und Anhang III ESPR),
- auf einem **dezentralen Datenspeicher** basieren ((126) BattVO),
- Aufnahme und Verarbeitung **dynamischer als auch statischer Daten** ermöglichen (vgl. BatteryPass Content Guidance (2023)),
- einen hohen Grad an **Sicherheit und Datenschutz** sowie die **Verhinderung von Betrug** sicherstellen (Artikel 87 (h)),
- einen **öffentlichen Zugriff und einen beschränkten Zugriff**, z.B. für benannte Stellen (z.B. EU Kommission) oder Personen mit legitimen Interesse, bspw. zwecks Auditierung, auf Daten ermöglichen (Anhang XIII BattVO).

Desweiteren SOLL die "Transparenzplattform" …

- die Bereitstellung **auch freiwilliger Informationen** (z.B. Zertifikate) ermöglichen,
- einen **vertrauensvollen, Konsensbasierten Datenaustausch** ermöglichen (Akteure sind zwar bekannt, aber sie vertrauen sich nicht notwendigerweise),
- auch **Akteuren "downstream"** der Wertschöpfungskette (z.B. Kunden und Recyclern) potentiell den Zugang ermöglichen,
- **automatisierte, einheitliche und nachvollziehbare Kalkulationschemata zur Verarbeitung von Batteriepassdaten,** insb. zur Kalkulation des CO2-Fußabdrucks auf Basis von Primär- und Sekundärdaten bereitstellen (vgl. (27) BattVO),
- Schnittstellen zur **Anbindung an bestehende Informationssysteme und Sekundärdatenbanken** bieten,
- **transparente Daten** für weitere Einblicke in die Wertschöpfungskette **nutzbar machen,** bspw. für dezentrale Applikationen (DApps), Datenanalyse, etc., zwecks Entscheidungsunterstützung, Effizienzsteigerung, anonymisierter Vergleich mit Mitbewerbern, etc. (vgl. (19) BattVO),
- die **automatisierte Generierung von Berichten** ermöglichen (vgl. Anhang XIII BattVO).

*Abbildung 8: "MUSS" und "SOLL" Anforderungen an eine Transparenzplattform in der Batteriewertschöpfungskette.*

Vor diesem Hintergrund lassen sich die Anforderungen an die in SUSTRAB zu entwickelnde Transparenzplattform wie in Abbildung 8 zusammenfassen. Dabei beschreiben „MUSS“ Anforderungen die sich aus der BattVO und dem aktuellen Entwurf der ESPR identifizierten Mindestanforderungen an ein nach Artikel 49 (1(d)) der BattVO gefordertes System. „SOLL“ Anforderungen leiten sich insbesondere aus den durchgeführten Gesprächen mit Industrie und Wissenschaft ab, und gehen über die Verordnungen hinaus.

Ergänzend zu den Muss- und Soll-Anforderungen bestehen weitere Anforderungen an die Sicherstellung der Nutzerfreundlichkeit. Dies umfassen beispielsweise eine ansprechende Nutzeroberfläche, Visualisierung von Informationen, Zugriffs- und Rechtemanagement, etc. Tabelle 4 bietet einen generellen Überblick über den Technologievergleich um die identifizierten Anforderungen zu adressieren. Insbesondere die Anforderungen an ein dezentrales Informationssystem, die Sicherstellung des vertrauensvollen Informationsaustauschs zwischen verschiedenen Akteuren, die automatisierte Datenverarbeitung, sowie die Rückverfolgbarkeit und Überprüfbarkeit von Informationen weisen auf ein großes Potential von Blockchain-Technologien und deren Einsatz für den SUSTRAB Demonstrator hin. Im SUSTRAB Anwendungsfall bietet sich ein zugangsbeschränktes Netzwerk weitestgehend bekannter Akteure und somit die Wahl einer Permissioned Blockchain an. Als dafür vielversprechendste Blockchain-Architektur wurde Hyperledger Fabric ausgewählt, welches open source verfügbar ist und sich durch generische Programmiersprachen, u.A. TypeScript, an die Anforderungen im Projekt anpassen lässt. Es ist modular aufgebaut, erlaubt den Einsatz von individuellen Consensus-Algorithmen, den Einsatz von so genannten Smart Contracts zur automatisierten Datenverarbeitung und die Einführung unterschiedlicher Ebenen der Datenzugänglichkeit.

*Tabelle 4: Vergleich verschiedener Systeme und Bewertung technischer Eigenschaften, adaptiert von Wüst et al. (2018). *Starke Verbesserungen in neuesten Updates, vgl. Dreyer et al. (2020). **Abhängig von Netzwerkverteilung (Peer-to-Peer oder Cloud).*

| Technische Eigenschaften | Permissionless Blockchain | Permissioned Blockchain | Cloud-basierte Datenverwaltung | Zentrale Datenverwaltung |
|---|---|---|---|---|
| **Datendurchsatz** | Gering | Hoch | Hoch | Sehr hoch |
| **Latenz** | Langsam | Mittel* | Mittel | Schnell |
| **Anzahl der Lesenden** | Hoch | Hoch | Hoch | Hoch |
| **Anzahl der Schreibenden** | Hoch | Gering* | Hoch | Hoch |
| **Anzahl unseriöser Schreibenden** | Hoch | Gering* | 0 | 0 |
| **Skalierbarkeit** | Hoch | Mittel* | Hoch | Gering |
| **Consensus Mechanismus** | Hauptsächlich PoW / PoS | BFT Protokolle (z.B. PBFT) | Keine | Keine |
| **Zentrales Management** | Nein | Ja (Ordering Service) | Ja, in flexiblen Servicemodellen | Ja |
| **Zuverlässigkeit** | Hoch** | Hoch** | Hoch | Gering |

### UAP 3.2: Konzeptentwicklung und Systemarchitektur

Das Gesamtkonzept der Transparenzplattform und das Zusammenwirken der einzelnen Komponenten wird in Abbildung 9 dargestellt. Die Abbildung stellt fünf Module vor, darunter die (1) Datenakquise aus der Produktion, die (2) Verarbeitung der Daten zu Produkt-spezifischen Informationen, die (3) Speicherung und den Zugriff auf die Informationen im Blockchain-Netzwerk, (4) Analyse der Produktinformationen und Entscheidungsunterstützung sowie die (5) Gesamtsystemevaluation. Während die Module (1) und (5) unter dem Abschnitt des Arbeitspakets 4 näher erläutert werden, beschreibt das Arbeitspaket 3 im Folgenden die Module (2) bis (4).

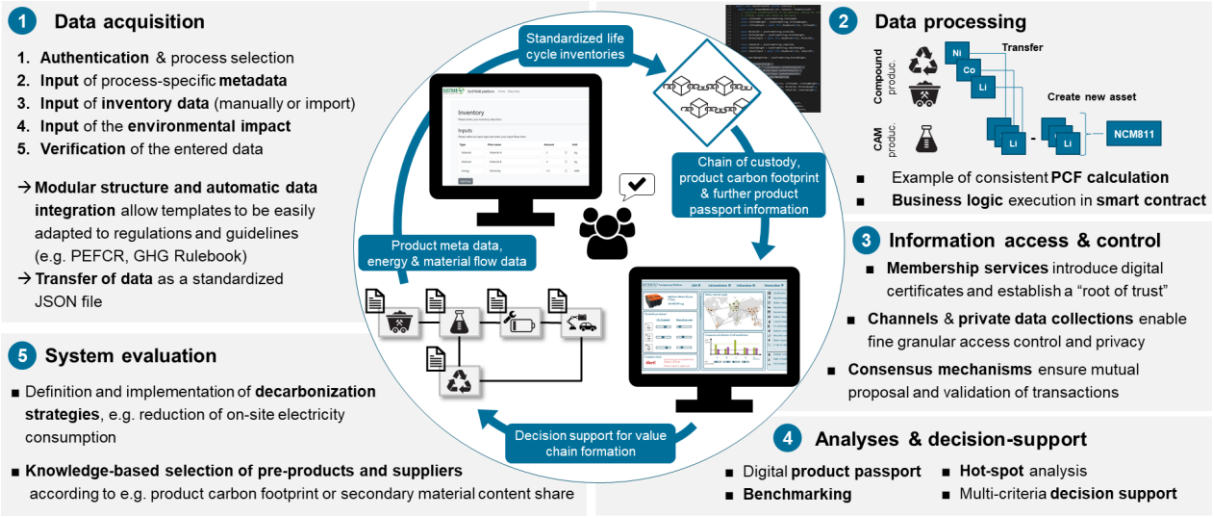



*Abbildung 9: Informationsfluss im Projekt und Elemente der Transparenzplattform.*

**Modul (2)** ermöglicht verschiedene Funktionen zur automatisierten Datenverarbeitung über so genannte Smart Contracts. Hierzu gehört neben der Ausführung von Transfers zum Handel von Gütern die automatisierte Kalkulation des $CO_2$-Fußabdrucks und des Recyclinganteils nachverfolgter Materialien. Die automatisierte Kalkulation des $CO_2$-Fußabdrucks geschieht durch die Übertragung eines JSON-Files, das durch die LCA Abfragemaske in AP4 generiert wird. Mit Ausführung einer Transaktion zur Erstellung eines neuen „Assets", einem Wertgegenstand, der bspw. eine Losgröße an Kathodenaktivmaterial oder eine Zelle digital repräsentiert, werden die Information aus dem hinterlegten JSON-File genutzt, um den $CO_2$-Fußabdruck zu berechnen. Dabei werden Input- und Outputflüsse aus der Produktion mit den im Smart Contract unveränderlich hinterlegten Kohlenstoff-Intensitäten dieser Flüsse verrechnet. Hergeleitet von dem Entwurf der delegierten Verordnung der europäischen Kommission zur Kalkulation und Verifikation des $CO_2$-Fußabdrucks (PCF) von Batterien [13], dient die folgende Kalkulation als Vorlage für die angewendete Logik:

$$PCF = (\sum_{i=1}^{n} ActivityFlow_i * CarbonIntensity_i) \; / \; FunctionalUnit \qquad (1)$$

Dabei ist $n$ die Anzahl der Input- und Outputflüsse eines Produktionsschritts. Da die Kalkulationslogik sowohl für die Synthese des Kathodenaktivmaterials als auch die Produktion von Batteriezellen ausgeführt wird, ist die Functional Unit je nach Asset entweder das Gewicht der produzierten Losgröße oder die Kapazität einer Zelle.

**Modul (3)** realisiert digitale Marktplätze einer bestimmten Gruppe von Lieferanten und Kunden sowie deren persönliche Lager im Blockchain-Netzwerk als so genannte Data Collections, auf die nur die jeweiligen Organisationen Zugriff haben. Darüber hinaus wird über die Blockchain der aktuelle Informationsstatus „Channel State" mit jeder Transaktion zur Herstellung oder dem Transfer von Gütern aktualisiert. Hierauf können alle Organisationen zugreifen, die über den gleichen Kanal des Blockchain-Netzwerks organisiert sind. Abhängig von der jeweiligen Data Collection, wird nur ein Teil der Informationen über ein Produkt zur Verfügung gestellt. Somit lassen sich Zugriffe verschiedenerer Organisationen vordefinieren und steuern.

Abbildung 10 stellt den Informationsfluss zwischen verschiedenen Stakeholdern beim Transfer der so genannten Assets dar. Die durch die **Module (2) und (3)** unterstützten Transaktionen werden von links nach rechts in chronologischer Reihenfolge aufgeführt. Möchte ein Hersteller

von Kathodenaktivmaterial (CAM) neues Material herstellen, benötigt dieser als Ausgangsmaterial u.A. Lithium-Hydroxid, Nickel- und Cobalt-Sulfat. Dieses wird vom Lieferanten auf einem digitalen Marktplatz zur Verfügung gestellt (Schritt 0). Der CAM-Hersteller kann in seinem eigenen Lager (Schritt 1) oder auf dem Marktplatz überprüfen (Schritt 2), ob die benötigten Ausgangsstoffe zur Verfügung stehen. Will der CAM-Hersteller Material kaufen, so erstellt er eine Transfervereinbarung (Schritt 3), womit seine Kaufabsicht gegenüber dem Lieferanten geäußert. Diese Vereinbarung kann durch den Lieferanten überprüft (Schritt 4) und das Material an den CAM-Hersteller transferiert werden (Schritt 5). Sobald das Material eingelagert wurde (Schritt 6) kann ein neues digitales Asset, das Kathodenaktivmaterial auf Basis der vorab bereitgestellten Informationen zu Input- und Outputflüssen erstellt werden und steht damit wiederum auf dem Markt für folgende Zellhersteller zur Verfügung (Schritt 7).

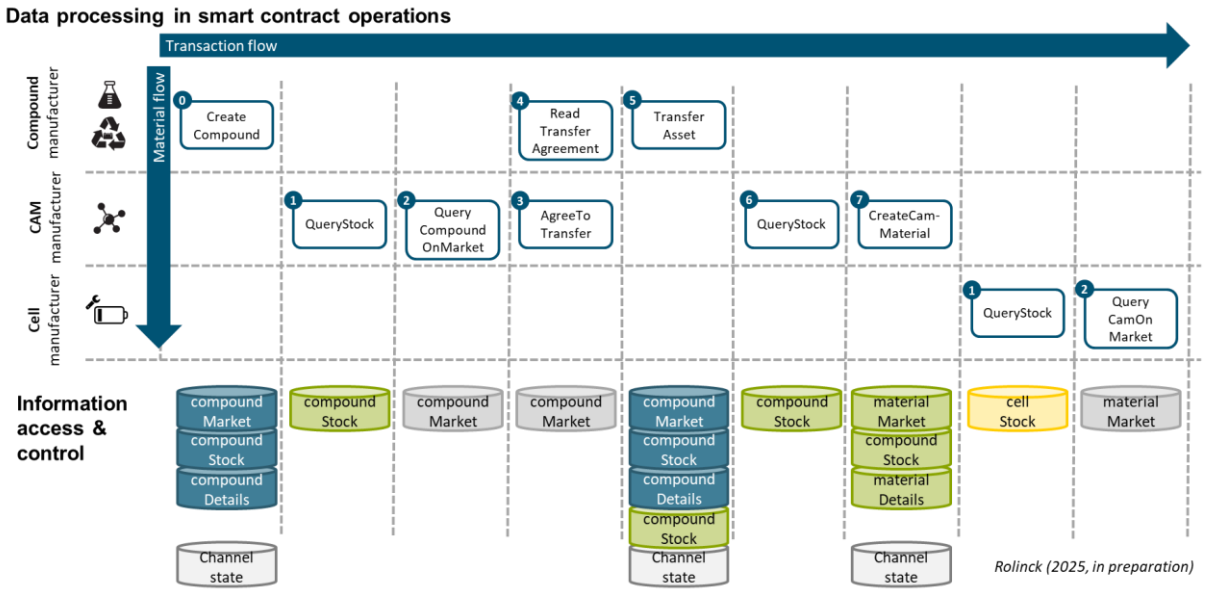



*Abbildung 10: Transaktionen zwischen Organisationen im Blockchain-Netzwerk.*

Um, wie von der Batterieverordnung gefordert [13], einen Nachweis über den Recyclinganteil bestimmter Materialien führen zu können, werden mit der Erstellung eines neuen Assets neben dem PCF auch die Recyclinganteile für Nickel, Cobalt und Lithium berechnet. Auf diesen Materialien liegt ein besonderes Interesse, da ab 2031 ein Mindestanteil an Sekundärmaterialien vorgeschrieben wird. Der Recyclinganteil eines Assets kalkuliert sich aus den Recyclinganteilen der Vorprodukte nach Element und deren Mischverhältnisse und gibt Auskunft über den Anteil recycelten Materials an dessen Gesamtmenge. Die Kalkulation des PCF und des recycelten Materialanteils werden automatisch im Smart Contract ausgeführt.

Aus der Herkunft eines Materials lässt sich auch Auskunft über mögliche Restriktionen gewinnen. So führt die Plattform Nachweis über die Beteiligung so genannter „Foreign Entities of Concern“, wie sie im Rahmen des US Inflation Reduction Acts definiert werden. Hierzu gehört insbesondere die Herstellung von Vorprodukten in China und deren Ursprungsnachweis. Der dazugehörige Parameter „FeocRestriction“ kann dabei entweder true oder false sein. Außerdem werden für das Rohmaterial der „Responsible Mining Index“ (RMI) nachverfolgt um sicherzustellen, dass Ausgangsmaterialien aus verantwortungsvollen Quellen stammen. Ein Zertifikat wird zum Zeitpunkt des Projekts nicht durch die Plattform verwaltet. Es handelt sich hier lediglich um einzelne Parameter, die den RMI zwischen 0 und 1 entsprechend der Vorgaben der Responsible Mining Foundation beziffern [14].

**Modul (4)** umfasst Methoden der visuellen Analyse und Entscheidungsunterstützung. Es greift auf die Informationen im Blockchain-Netzwerk zurück und visualisiert diese in einer Nutzerschnittstelle. Die Visualisierungen umfassen u.A. Balken-, Boxplot- und Netzdiagramme über Eigenschaften der Assets sowie Marktanteile der Organisationen. Darüber hinaus bietet das Modul einen automatisierten Analytischen Hierarchieprozess (AHP) zur Entscheidungsunterstützung. Auf Basis der zur Verfügung stehenden Alternativen auf dem Markt sowie vordefinierten Gewichtungsfaktoren, wird eine Rangordnung der am besten passenden Alternativen ausgegeben. Beispiele aus der Nutzerschnittstelle werden unter UAP 3.3 vorgestellt.

**UAP 3.3: Aufbau einer Datenplattform**

Der Demonstrator der Transparenzplattform wurde auf Servern der lokalen Infrastruktur des IWF und des EducationLab @BLB+ implementiert. Er läuft auf einem Linux-Betriebssystem und besteht aus vier wesentlichen Elementen, dem Blockchain-Netzwerk, dem Smart Contract, den Unternehmens-spezifischen Applikationen und den Nutzerschnittstellen.

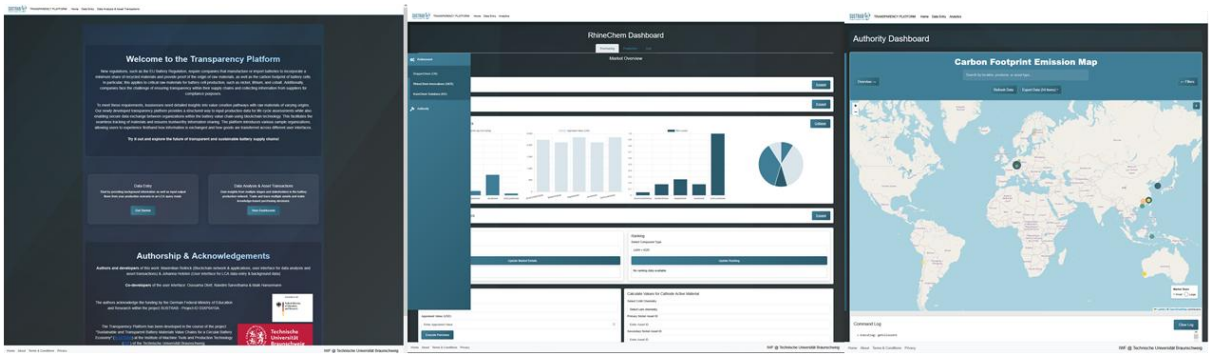
Das Blockchain-Netzwerk basiert auf einer Hyperledger Fabric Test-Umgebung aus 10 Organisationen, die auf Basis von Docker Containern realisiert wurde. Pro Organisation wird je ein Docker-Container für die Verwaltung von Zertifikaten und Zugängen, für die Speicherung von Transaktionen in einer CouchDB Datenbank und für die Interaktion im Netzwerk initialisiert. Für jede Organisation wird zusätzlich ein Docker-Container mit der Installation des Smart Contracts initialisiert. Dieser wurde in der Programmiersprache TypeScript programmiert und umfasst Funktionen, die Definition von Assets und Data Collections um die Transaktionen aus Abbildung 5 zu ermöglichen.

Die Unternehmens-spezifischen Applikationen wurden ebenfalls in TypeScript programmiert und können von außerhalb auf das Netzwerk per gRPC Protokoll zurückgreifen und Funktionen im Smart Contract ausführen. Die Applikationen ermöglichen zudem die weitere Sortierung und Verarbeitungen von Information als Schnittstelle zwischen Nutzereingabe und Netzwerk. Hier sind auch die wesentlichen Funktionen für die Erstellung von Rangordnungen durch AHP implementiert.

Die Nutzerschnittstellen sind in JavaScript auf Basis der React Programmbibliothek erstellt worden und bieten einen Organisations-spezifischen Zugang zur Transparenzplattform. Die Kommunikation zur Applikation läuft über ExpressJS und ermöglicht somit den Zugang und die Kommunikation mit weiteren Organisationen im Blockchain-Netzwerk. Dabei können Beispielunternehmen für die Produktionsschritte der Materialherstellung, Kathodenaktivmaterialsynthese, Zellproduktion und Systemintegration unterschiedliche Funktionen in der Rolle der Abteilungen Einkauf, Produktion und Verkauf ausführen. Informationen, die aus der Blockchain bezogen werden, werden visuell aufbereitet und Assets auf dem Markt zwecks Entscheidungsunterstützung nach verschiedenen Kriterien verglichen.

Abbildung 11 zeigt Bildschirmaufnahmen einer Auswahl von Nutzerschnittstellen der prototypischen Plattform, wie sie bis zum Berichtszeitpunkt realisiert wurde. Abbildung 7a) zeigt den Startbildschirm. Von hier aus können Nutzende die LCA Abfragemaske (s. AP 4) und die Organisations-spezifischen Nutzerschnittstellen aufrufen. Für die Entwicklung und Demonstration wurden fiktive, aber der aktuellen Marktsituation entsprechende Unternehmen in der Transparenzplattform angelegt. Abbildung 7b) zeigt das Beispiel einer Nutzerschnittstelle des fiktiven Kathodenaktivmaterialherstellers RhineChem. Über verschiedene Tabs am oberen Rand lässt sich die Ansicht zwischen den Abteilungen ändern. Über eine Navigationsleiste auf

der linken Seite lässt sich die Ansicht der Organisation ändern. Durch die Visualisierungen werden Unternehmen unterstützt, Marktstrategien im Einkauf von Materialien und Zellen umzusetzen und Grenzwerte, wie sie durch die EU für den PCF und Recyclinganteil vorgegeben werden, einzuhalten. Abbildung 7c) zeigt eine Weltkarte der im Netzwerk teilnehmenden Unternehmen und bietet Behörden, wie bspw. der EU-Kommission, Einblick über Produkte auf dem Markt sowie der Berichts-relevanten Kennzahlen.




**a)** Integration of LCA query mask (WP4) and transparency platform (WP3) in one platform.

**b)** Stakeholder-specific user interfaces and applications to invoke smart contract functions in the blockchain network.

**c)** Visual analyses and decision-support based on product- and company-specific information.

*Abbildung 11: Auszug aus den Nutzerschnittstellen der Transparenzplattform.*

Um die Datentransaktionen über die Plattform zu demonstrieren und an Industrie-nahen Beispielen zu untersuchen, wurden verschiedene Unternehmensprofile und Datensätze angelegt. Hiermit wurden die Funktionalitäten der Transparenzplattform weiter untersucht. Anhand fiktiver Beispielunternehmen, u.A. dem australischem Lithium-Hersteller KangarooLith, dem deutschen Kathodenaktivmaterialhersteller RhineChem oder dem schwedische Zellhersteller SveaCell, konnte gezeigt werden, wie sich Strategien der Unternehmen für bestimmte Märkte durch die entwickelte Transparenzplattform nachvollziehbar realisieren lassen. Dazu gehörte der gezielte Einkauf von Materialien aus bestimmten Quellen um bspw. die Vorgaben der BattVO einhalten zu können. Auf Basis der vordefinierten Beispielunternehmen können durch die Transparenzplattform über 300.000 verschiedene Kombinationsmöglichkeiten von der Materialgewinnung bis zur Zellproduktion über die Batteriematerialwertschöpfungskette darstellen und nachvollziehen.

Zum Ende des Projekts wurde das System im EducationLab @BLB+ integriert und eine Schnittstelle zu einem Server geschaffen, der die Datenübertragung Maschine-zu-Maschine ermöglicht. So können zukünftig Daten direkt von Produktionsanlagen an die Transparenzplattform übertragen werden und mit jeder produzierten Zelle ein digitales Asset erstellt und nachverfolgt werden. Die Transparenzplattform steht über das Projektende hinaus Forschenden, Lehrenden, Studierenden sowie der interessierten Öffentlichkeit als Demonstrator zur Verfügung.

## Arbeitspaket 4: Ressourceneffizienzstrategien und Umweltbewertung (IWF)

### UAP 4.1: Definition der Systemgrenzen und zu betrachteten Rohstoffrouten

Für die ökologische Bewertung im Rahmen des Arbeitspakets 4 wurden alle Prozesse der Wertschöpfungskette von Abbau der Erze bis hin zur Fertigung von Elektroden und Zellen analysiert (siehe Abbildung 12). Dabei wird unterschieden in die im Projekt SUSTRAB durchgeführten Prozesse (Aktivmaterialsynthese, Fertigung von Elektroden und Zellen) und in der Wertschöpfungskette vorgelagerte Prozesse (Abbau der Erze und Veredelung der Materialien). Während für die vorgelagerten Prozesse Literaturdaten herangezogen wurden, konnten für die Prozesse der Aktivmaterialsynthese sowie Elektroden- und Zellproduktion Primärdaten aus dem Projekt in der Ökobilanzierung verwendet werden.

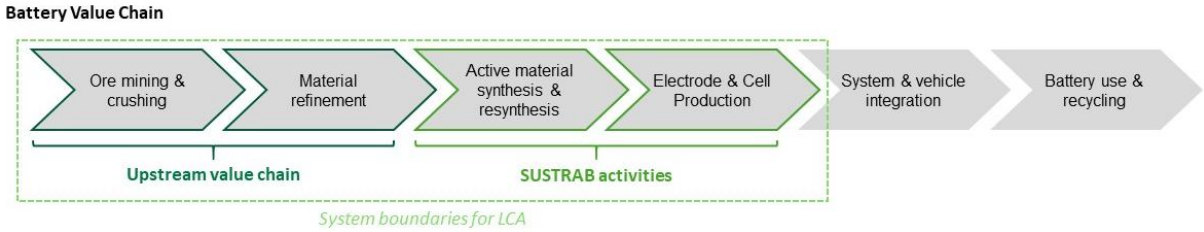



*Abbildung 12: Übersicht der gewählten Systemgrenzen.*

Für die literaturbasierte Recherche von bestehenden Sachbilanzdaten für die vorgelagerte Wertschöpfungskette wurde die Batteriematerialien Lithium, Nickel, Mangan und Kobalt (für die Zellchemie NMC) sowie Graphit (als Anodenmaterial) ausgewählt. Für jedes der ausgewählten Materialien wurde eine Marktrecherche zu den globalen Rohstoffvorkommen, Veredlungsprozesse (inkl. Standorte) und Rohstoffströmen durchgeführt. Parallel wurde pro Material eine Übersicht der verfügbaren Sachbilanzdaten für die Abbau- und Veredlungsprozesse erstellt. Die gesammelten Daten wurden in einem Datenblatt pro Material zusammengefasst, welches einen Überblick über die für die Ökobilanz des Materials relevanten Daten gibt. Ein beispielhaftes Datenblatt ist für das Material Graphit in Abbildung 13 dargestellt.

Weiterhin erfolgte pro Material ein Vergleich der aus den LCI-Datensätzen resultierenden Umweltwirkung. Ein besonderer Fokus lag hierbei auf dem Treibhausgaspotential. Die Auswertung der gesammelten Daten zeigte, dass die berechneten Umweltwirkungen zwischen den Datensätzen stark variieren und zudem nicht alle Prozessrouten und Standorten mit den derzeit verfügbaren Datensätzen abgedeckt sind. Diese Ergebnisse dienen als Grundlage für die folgende ökologische Bewertung (UAP 4.4) und unterstreichen den Bedarf einer einheitlichen und transparenten Nachverfolgung der Wertschöpfungsketten.

Neben der detaillierten Recherche zu den Kathodenmetallen und Graphit wurde zudem eine Datenbank mit $CO_2$-Fußabdrücken der Produktion weiterer Materialien und Komponenten für die Batterieherstellung zusammengestellt, welche für den Aufbau der Datentransparenzplattform und die Auswertung der aufgenommenen Sachbilanzdaten genutzt wurde. Dabei wurden Datensätze aus öffentlich verfügbaren Quellen (z.B. Greet [15] oder Probas [16]) für weitere notwendige Materialflüsse recherchiert, da die Daten aus der LCA-Datenbank ecoinvent aufgrund von geänderten Lizenzbedingungen nicht in die zu entwickelnde Plattform eingebunden werden durften.

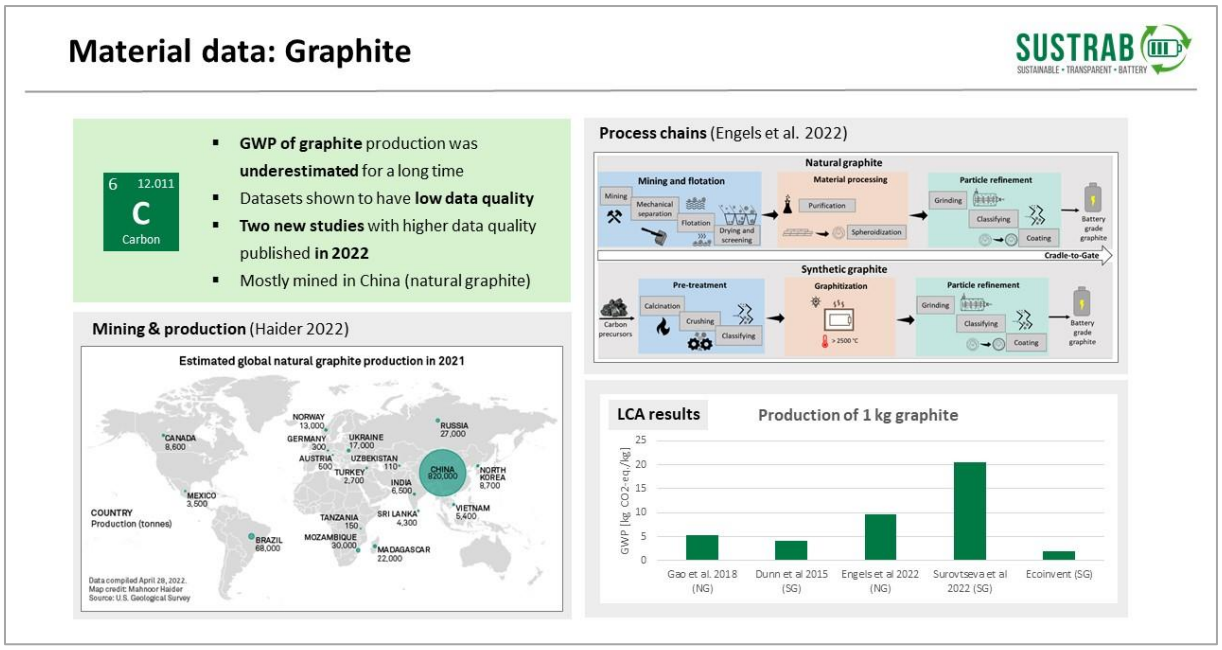



*Abbildung 13: Datenblatt zu den Rohstoffvorkommen, Herstellungsprozessen und LCA-Daten zu Graphit.*

### UAP 4.2: Entwickeln einer ökobilanziell-konformen Abfragemaske

Zur Entwicklung der ökobilanziell-konformen Abfragemaske wurden zunächst ein Anforderungskatalog an die (teil-)automatisierte Datenerhebung und Ökobilanz im Rahmen der zu entwickelnden Datentransparenzplattform erstellt. Dazu wurden zuerst die Stakeholder der Datenplattform mittels Analyse der Batteriewertschöpfungskette und unterstützender Literaturrecherche identifiziert. Neben direkt an der Batteriewertschöpfungskette beteiligten Stakeholder (wie z.B. Raffenerien, Komponentenhersteller oder OEMs) bestehen weitere materialflussbezogene Stakeholder wie Logistikunternehmen oder Energieversorger sowie strategieorientierte Stakeholder wie die Europäische Politik, Marktaufsichtsbehörden und Forschungseinrichtungen.

Die individuellen Anforderungen der identifizierten Stakeholder wurden mithilfe von leitfadenbasierten Experteninterviews sowie ergänzender Literaturrecherche und methodischer Anforderungsableitung ermittelt. Dabei wurde zusätzlich ein besonderer Fokus auf die Anforderungen der neuen EU-Batteriedirektive gelegt, welche in die Analyse eingeflossen sind. Die ermittelten Anforderungen wurden anschließend klassifiziert und nach Gemeinsamkeiten und Konfliktfeldern untersucht. Grundsätzlich können die Anforderungen in allgemeine Anforderungen an die Datenplattform sowie Anforderungen an die Durchführung der Ökobilanz mithilfe der Plattform unterschieden werden. Aus den Anforderungen der verschiedenen Stakeholder ergeben sich neben größtenteils Übereinstimmungen auch einige Konfliktfelder:

- Datenbereitstellung: Die beteiligten Unternehmen haben aus Geheimhaltungsgründen eine unterschiedliche Bereitschaft, Daten, welche für die Erstellung der Ökobilanz relevant sind (u.a. Material- und Energieflussdaten), zu teilen.
- Unterstützungsgrad: Größere Unternehmen haben unterschiedliche Anforderungen an die Durchführung und Automatisierung der Ökobilanz als kleinere Unternehmen. Je nach Größe und Kompetenzen der Unternehmen sollte die Plattform die Erstellung der Ökobilanz gezielt unterstützen oder automatisiert durchführen.
- Methodische Standards: Bisher führen die Unternehmen die Ökobilanzen nach unterschiedlichen Standards durch, welche sich teilweise widersprechen. Daher wird für die Datenplattform ein einheitlicher, von allen Stakeholdern geteilter Standard benötigt. Zudem

muss vereinheitlicht werden, für welche Teile der Ökobilanz Primärdaten verwendet werden müssen oder Sekundärdaten verwendet werden dürfen.

Die identifizierten Anforderungen und Konfliktfelder wurden zum einen mit Arbeitspaket 3 für die Konzeptentwicklung und Systemarchitektur ausgetauscht und zum anderen für den Aufbau der nutzendenfreundlichen Datenabfragemaske und der anschließenden Integration in die Plattform genutzt. Zudem erfolgte die Veröffentlichung des Anforderungskatalog mit dem Fokus auf der Integration der Methodik des Life Cycle Assessments (LCA) in digitale Produktpässe (wie den kommenden europäischen Batteriepass) sowie die dabei bestehenden Konfliktfelder und Herausforderungen in Form eines Konferenzbeitrags (siehe Haupt et al., 2024).

Auf Basis des Anforderungskatalogs konnten drei mögliche Anwendungsfälle für die LCA-Integration in die SUSTRAB-Datenplattform auf Basis verschiedener Stakeholder-Profile identifiziert werden (siehe Tabelle 5). Kleinere Unternehmen mit bisher wenig Erfahrung im Bereich LCA könnten die Ökobilanz mithilfe der Plattform durchführen (siehe Fall 1), während beispielweise größere Unternehmen die Ökobilanz bereits selbstständig durchführen und diese über die Plattform gemäß den gesetzlichen Vorgaben nur reporten (siehe Fall 2). Sollten Unternehmen die sensiblen Daten der Sachbilanz nicht vollständig offenlegen wollen, könnte über die Plattform eine Verifizierung der LCA-Ergebnisse auf Basis von Metadaten wie den Produktcharakteristiken, einer grundlegenden Beschreibung des Herstellungsprozesses sowie Herstellungsort und -zeitpunkt erfolgen (siehe Fall 3). Dies ist rechtlich im aktuellen Stand der EU-Batterieverordnung jedoch bisher nicht vorgesehen.

*Tabelle 5: Anwendungsfälle der LCA bezogenen Datenaufnahme.*

| | **Fall 1** | **Fall 2** | **Fall 3** |
|---|---|---|---|
| Nutzenden-Profil | Kleinere Unternehmen mit wenig LCA-Erfahrung | Unternehmen mit bestehender LCA-Expertise | Unternehmen mit Geheimhaltungsbedarf |
| Ziel | Durchführung & Reporting der LCA | Reporting der LCA | Reporting der LCA-Ergebnisse |
| Eingabe | Metadaten,<br>Sachbilanz | Metadaten,<br>Sachbilanz,<br>Ergebnisse | Metadaten,<br><br>Ergebnisse |
| Benötigte Funktion | Verifizierung der Sachbilanz, Durchführung der LCA, Reporting und Analyse der LCA-Ergebnisse | Verifizierung und Reporting der LCA | Verifizierung und Reporting der LCA-Ergebnisse |

Basierend auf den ermittelten Anforderungen sowie definierten Anwendungsfällen wurde die Abfragemaske der Plattform für die Dateneingabe entwickelt. Diese wurde zunächst in Form einer Excel-Arbeitsmappe umgesetzt, um die Projektpartner kurzfristig in der Datenaufnahme zu unterstützen, und anschließend als Web-Oberfläche implementiert. Dazu wurde in der technischen Umsetzung die JavaScript-Bibliothek React in Verbindung mit dem CSS-Framework Bootstrap genutzt. Aufbauend auf der Umsetzung in Excel, können nach der Eingabe von Kontaktinformationen basierend auf der Auswahl eines Prozesses Metadaten wie Standort und Herstellungszeitpunkt erfasst und die Input- und Outputflüsse detailliert beschrieben werden (siehe Abbildung 14). Dazu werden Templates genutzt, welche basierend auf dem aus-

gewählten Prozess zugeordnet werden können und die prozessrelevanten Informationen sowie Material- und Energieströme (abgeleitet aus dem Greenhouse Gas Rulebook der Global Battery Alliance [18]) abfragen. Ausgehend von den Templates können Nutzende einzelne Flüsse hinzufügen oder entfernen. Aufgrund des modularen Aufbaus des Backends der Datenabfrage-Maske können die Templates bei einer Aktualisierung des GHG Rulebooks angepasst werden oder durch die Vorgaben anderer Regelwerke ersetzt werden.

Die erstellte Masse- und Energiebilanz wird anschließend automatisch auf Vollständigkeit und Ausgeglichenheit geprüft und kann zudem über die jeweilige Fluss-ID und die eingegebenen Meta-Daten mit vordefinierten LCA-Datensätzen für das Hintergrundsystem verknüpft werden. Entsprechend der Anwendungsfälle 2 und 3 kann zudem, falls bereits berechnet, die Umweltwirkung des ausgewählten Prozesses durch die Abfragemaske übermittelt und verifiziert werden. Der damit durchgeführte Datenvergleich und Plausibilitätscheck kann durch weitere Verifikationsoptionen ergänzt werden, wie z.B. einer manuellen Prüfung durch Dritte oder einer Zertifizierung des Datenaufnahme- und Auswertungssystems.

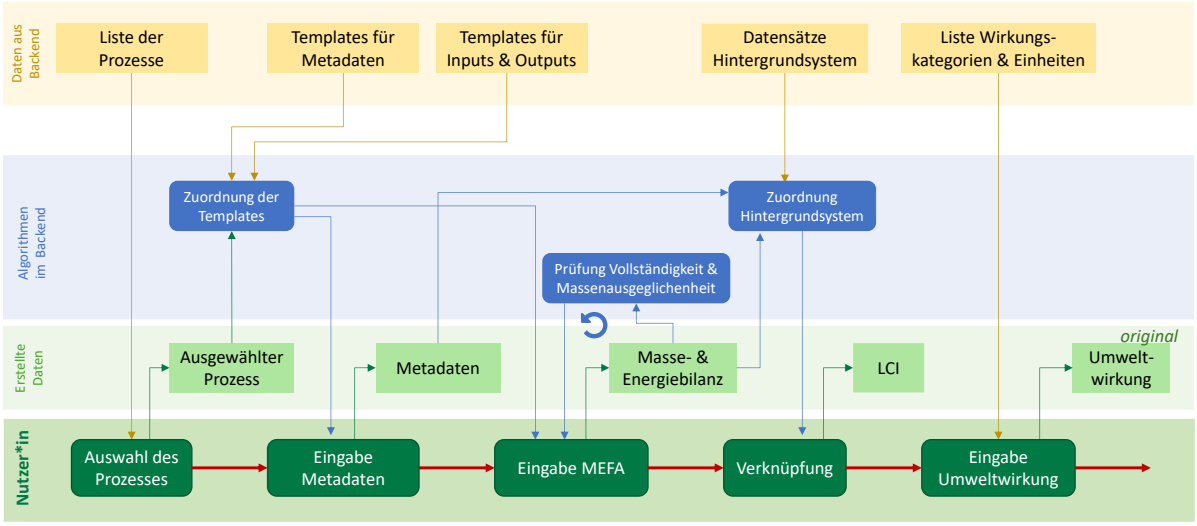



*Abbildung 14: Struktur der Datenabfragemaske – Schritte der Nutzenden und zugeordnete Datenflüsse und Algorithmen.*

Mit der Umsetzung der Abfragemaske wurde der Meilenstein 1 „Abfragemaske für Prozessdaten einsatzbereit“ erreicht. Im weiteren Projektverlauf wurden die Funktionalitäten der Abfragemaske für Ökobilanzdaten (als Modul (1) des Gesamtkonzepts der Transparenzplattform, siehe Abbildung 9) stetig erweitert. Dabei wurde sich u.a. auf die automatisierte Zuordnung von Herstellungsort und den passenden LCA-Datensätzen basierend auf dem Prinzip der Repräsentativität (technologische, geografische und zeitliche Übereinstimmung) für die Modellierung des Hintergrundsystems fokussiert. Bei der Eingabe der Meta-Daten zum Herstellungsprozess wird dafür durch die Nutzenden der Herstellungsort hinterlegt. Dieser kann mittels Drop-Down-Menu aus einer Liste von Ländern und Sub-Regionen ausgewählt werden und ist dadurch automatisch mit einem standardisierten Länder-/Regions-Code verknüpft. Über den Länder-/Regions-Code kann dann im Rahmen der $CO_2$-Fußabdruck-Berechnung eine Verknüpfung zu für diese Region passenden LCA-Datensätzen erfolgen. Beispielweise kann über die API der Plattform „Electricity Maps“ des gleichnamigen Start-Ups [19] auf diese Weise der lokale $CO_2$-Fußabdruck der Elektrizitätsgewinnung unter Nutzung von Live-Daten importiert werden. Die technische Umsetzung erfolgte in Zusammenarbeit mit Arbeitspaket 3 im Rahmen der Smart Contract-Programmierung. Die Einbindung des Herstellungsstandorts über eine

standardisierte Schnittstelle kann so für eine spezifischere Modellierung des Hintergrundsystems für die Ökobilanzierung genutzt werden.

Zum Testen der Abfragemaske und der Zuordnungs- und Berechnungsprozesse wurden basierend auf den im Projekt erhobenen Daten (siehe Arbeitspaket 4.3, ergänzt mit Literaturdaten) Testdateien mit Sachbilanzdaten der CAM-Herstellung über die Datenabfragemaske erzeugt. Dabei handelt es sich um Prozessdaten für die pCAM- und CAM-Herstellung unter der Anwendung unterschiedlicher Prozessparameter und -effizienzen. Die Daten wurden für Test- und Auswertungszwecke an das Arbeitspaket 3 übergeben.

**UAP 4.3: Primärdatenerhebung und Energie- und Stoffstromanalyse**

Zur Sensibilisierung der Projektpartner für die Primärdatenerhebung wurde zunächst ein einführender Workshop zum Thema Life Cycle Assessment (LCA) durchgeführt. Anschließend wurde gemeinsam mit den Projektpartnern die Definition der jeweils beteiligten Produktsysteme (z.B. Prozessschritte der Aktivmaterialsynthese) im Projekt SUSTRAB durchgeführt und die relevanten Material- und Energieflüsse wurden identifiziert. Aufbauend auf den erstellten Prozessmodellen wurden die Methoden und Werkzeuge der Datenaufnahme mit den Projektpartnern abgestimmt. Parallel wurden bestehende Sachbilanz-Modelle der im Projekt durchgeführten Prozesse für Vergleichszwecke in der Literatur recherchiert. Die Aufnahme erster Prozessdaten erfolgte ab Anfang 2023 aufgrund des Verzugs der Materiallieferungen im Projekt.

Für die CAM-Synthese wurden verschiedene Messkampagnen am Fraunhofer IST durchgeführt. Dabei konnte der Energiebedarf der für die Prozessschritte verwendeten Geräte (Fällungsreaktor, Sprühtrockner, Kalzinierungsofen) auf Labormaßstab bestimmt werden. Beispielweise konnte für die Ko-Fällungsreaktion eine starke Abhängigkeit des Energiebedarfs zur Temperatur beobachtet werden (siehe Abbildung 15). Parallel wurden die Massen der verwendeten Materialien aufgenommen, um die Sachbilanz für die Chemie NCM 622 zu vervollständigen. Zudem wurden seitens BASF mithilfe des Datenaufnahmebogens Sachbilanzdaten für die CAM-Synthese auf Pilot-Maßstab übermittelt.

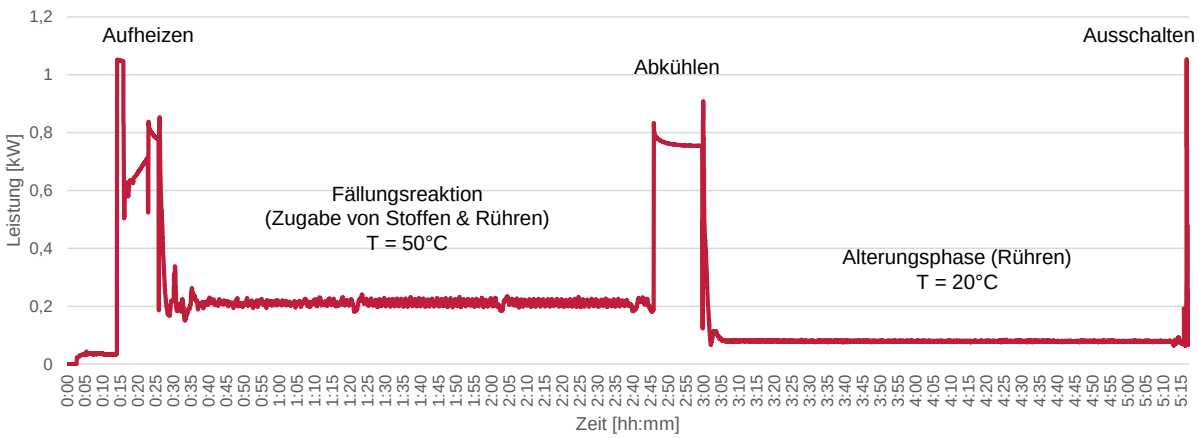



*Abbildung 15: Leistungsprofil des Reaktors bei der Ko-Fällungsreaktion zur CAM-Synthese, gemessen am Fraunhofer IST.*

Somit konnten für die Kathodenaktivmaterial-Synthese sowohl Labor- als auch Pilot-Ebene Daten beim Fraunhofer IST und von BASF aufgenommen werden. Dabei wurden unterschiedlichen Kathodenzusammensetzungen wie z.B. NMC 622 oder höhere Nickelanteile bis zu 91% und deren entsprechender Herstellungsprozess im Rahmen der Material- und Energieflussanalyse (MEFA) untersucht. Eine Darstellung der Materialflüsse für die CAM-Herstellung bei Fraunhofer IST und BASF findet sich als Sankey-Diagramm in Abbildung 16. Zu beobachten sind neben den unterschiedlichen Metallanteilen steigende Prozesseffizienzen und somit geringere Verluste bei einer höheren Prozessskalierung. Zudem gibt es Unterschiede in der Prozessführung wie z.B. unterschiedlichen Trocknungsverfahren oder Nachbehandlungsschritten. Ein weiterer Aspekt ist der Wasserbedarf, welcher vor allem bei der Fällungsreaktion und der anschließenden Filtration auftritt. Beispielsweise wird für das Sprühtrocknen die Precursor-Lösung noch einmal verdünnt, während dieser zusätzliche Wasserbedarf beim Einsatz von Trockenschränken bei der BASF nicht auftritt.

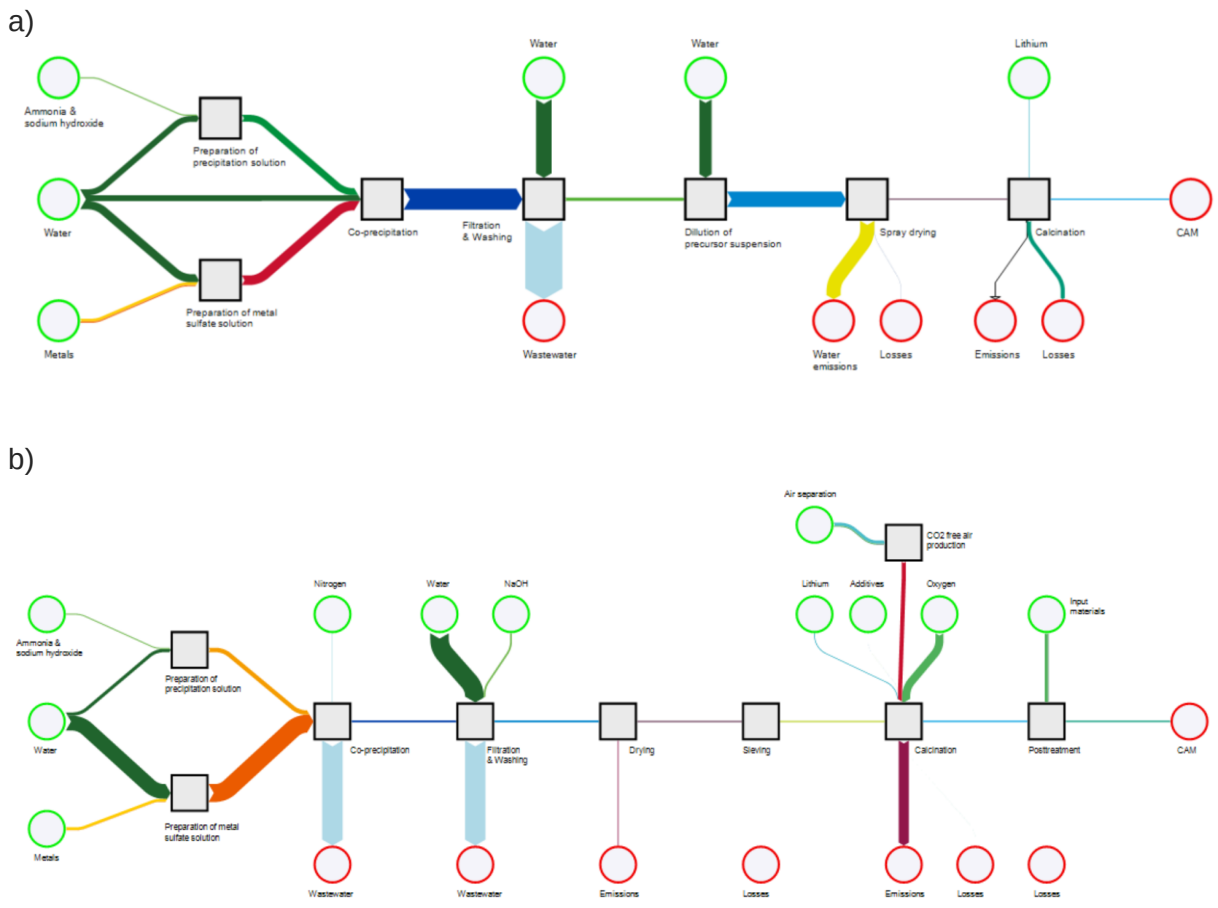



*Abbildung 16: Materialflüsse für die Herstellung von 1 kg Kathodenaktivmaterial (CAM): a) NMC622 beim Fraunhofer IST (exkl. Gase), b) NMC914545 bei BASF.*

Neben den Materialflüssen wurde auch der Energiebedarf der Prozesskette für die CAM-Herstellung ausgewertet (siehe Abbildung 17). Die Daten sind aufgrund der unterschiedlichen Prozessskalierungen jedoch nur bedingt vergleichbar. Es ist zu beobachten, dass der Energiebedarf mit steigendem Umsatz pro Zeiteinheit/Batch stark sinkt. Weiterhin konnte in den Messungen beim Fraunhofer IST eine Temperaturabhängigkeit des Energiebedarfs für sowohl die Fällungsreaktion als auch die Kalzinierung festgestellt werden.

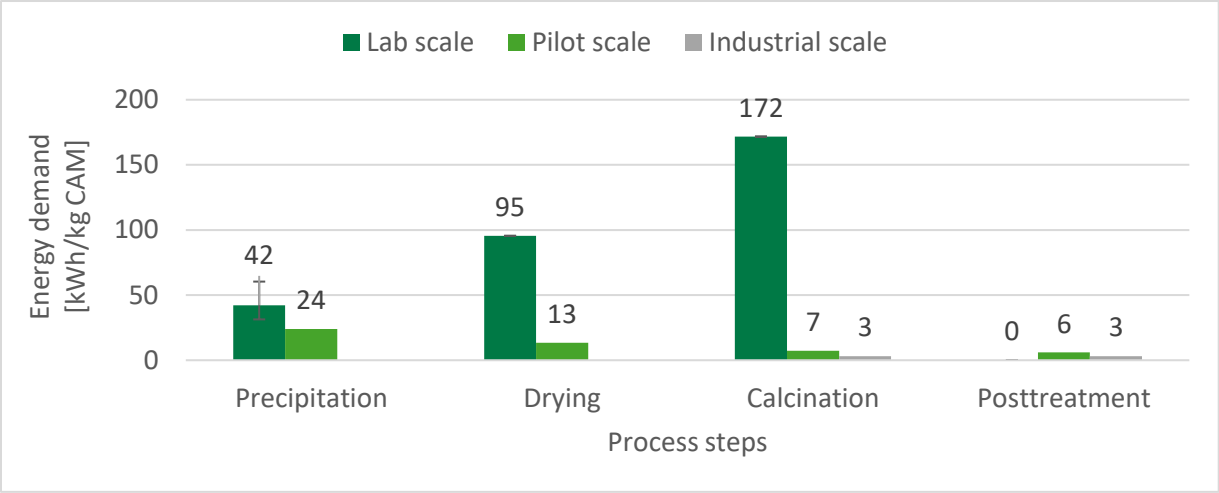



*Abbildung 17: Energiebedarf der Herstellung von 1 kg CAM nach Prozessschritt für verschiedene Prozess-skalierungen (Werte für Industrieprozess nur für Kalzinierung und Nachbehandlung durch BASF gegeben).*

Für die anschließende Elektrodenfertigung wurden Messungen des Energiebedarfs während der Versuche des Instituts für Partikeltechnik (iPAT) durchgeführt. Hierdurch konnten die energetischen Hotspots und Einflussparameter identifiziert werden (siehe Abbildung 18). Während der eingesetzte Mischer und der Dissolver einen vergleichsweise geringen Energiebedarf besitzen, stellen im Labor-Setting die für das Dispergieren eingesetzte Kühlung und Vakuumpumpe die Haupttreiber des Energiebedarfs da. Zudem stellt sich auch der händisch durchgeführte Beschichtungsprozess unter Nutzung eines Filmziehgeräts mit integrierter Heizplatte und Vakuumpumpe als sehr energieintensiv dar. Gemeinsam mit den durch das iPAT übermittelten Informationen zu den Materialströme bei der Zellherstellung standen damit alle notwendigen Primärdaten für die Ökobilanz zur Verfügung, sodass der Meilenstein 2 „Experimentelle Daten aus Aktivmaterialsynthese sowie Elektroden- und Zellproduktion stehen für die Ökobilanzierung zur Verfügung“ erreicht wurde.

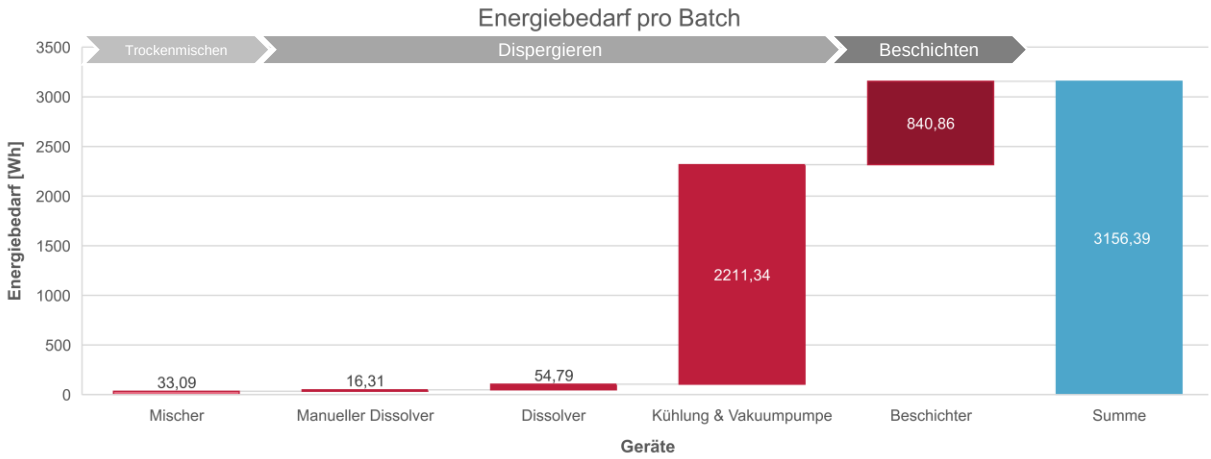



*Abbildung 18: Energiebedarf der Elektrodenfertigung basierend auf Messungen beim Institut für Partikeltechnik während der Fertigung der 2 Ah-Zellen.*

**UAP 4.4: Ableitung und Transfer von Ressourceneffizienzstrategien mittels LCA**

Für die Ableitung der Ressourceneffizienz- und Dekarbonisierungsstrategien wurde aufbauend auf den in Arbeitspaket 4.3 gesammelten Prozessdaten eine Ökobilanzierung durchgeführt. Die beschriebenen Prozessdaten wurden in der LCA-Software Umberto modelliert und mit entsprechenden ecoinvent-Datensätzen verknüpft.

Die Auswertung in Bezug auf Klimaänderung erfolgte zunächst für den reinen CAM-Syntheseprozess unter Ausschluss der Vorketten für die NMC-Metalle und Lithium. Dabei wurden vier Szenarien für unterschiedliche Zusammensetzungen der Elektrizitätsgewinnung analysiert: ein Best-Case-Szenario unter Nutzung nahezu ausschließlich erneuerbarer Energien (dargestellt durch den Strommix Schwedens), eine Basis-Szenario unter Nutzung des deutschen Strommix, ein Worst-Case-Szenario unter Nutzung eines von fossilen Energieträgern dominierten Strommix (dargestellt durch den Strommix Polens) und als Ausblick ein Szenario unter Nutzung von Strom rein aus Windenergie in Deutschland. Die Auswertung in Abbildung 19 zeigt, dass das Potential zur Klimaänderung in den Szenarien mit deutschem oder polnischen Strommix größtenteils durch den Energiebedarf von Fällung, Kalzinierung und der Erzeugung der Prozessgase (in Luftabscheidungsanlage) bestimmt wird. Sinkt die $CO_2$-Intensität des Strommix wird die Klimaänderung vor allem durch den Einsatz von Chemikalien wie Natriumhydroxid bei der Fällung und Filtration dominiert.

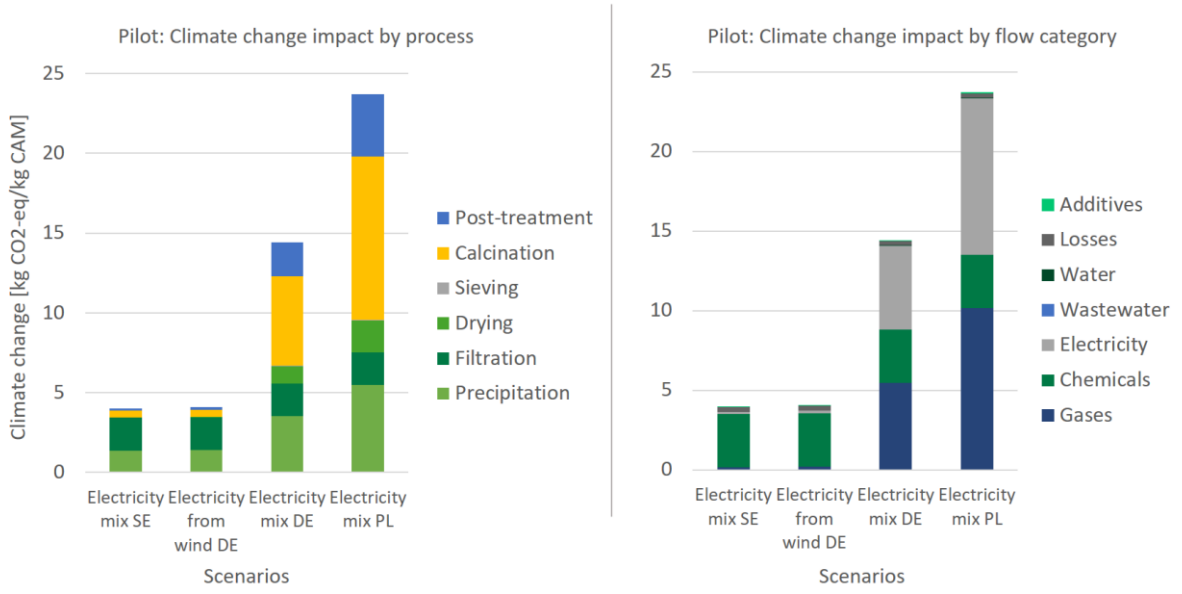



*Abbildung 19: Klimaänderung [kg $CO_2$-Äq.] der Herstellung von 1 kg CAM (914545) bei der BASF unter Nutzung verschiedener Strommixe: a) nach Unterprozessen, b) nach Material- und Energieflüssen.*

Anschließend wurden die Systemgrenzen erweitert und die Vorketten von Nickel, Mangan, Cobalt und Lithium in die Ökobilanz aufgenommen. Um die Varianz der Umweltwirkungen der Metalle sowie der Elektrizitätsgewinnung und damit auch der Umweltwirkung der CAM-Herstellung abzubilden, wurden 48 Stichproben aus Kombination von Best- und Worst-Case-Szenarien für die Metalle und den Strommix (hier auch ein Basis-Szenario mit deutschem Strommix) generiert und ausgewertet (siehe Abbildung 20). Dabei zeigt sich ein hoher Einfluss des Elektrizitätsmix sowie der Nickel-Vorketten auf die Klimaänderung der Herstellung des nickelreichen CAMs. Der Einfluss der Vorketten von Lithium, Mangan und Cobalt auf die Klimaänderung ist dagegen eher gering.

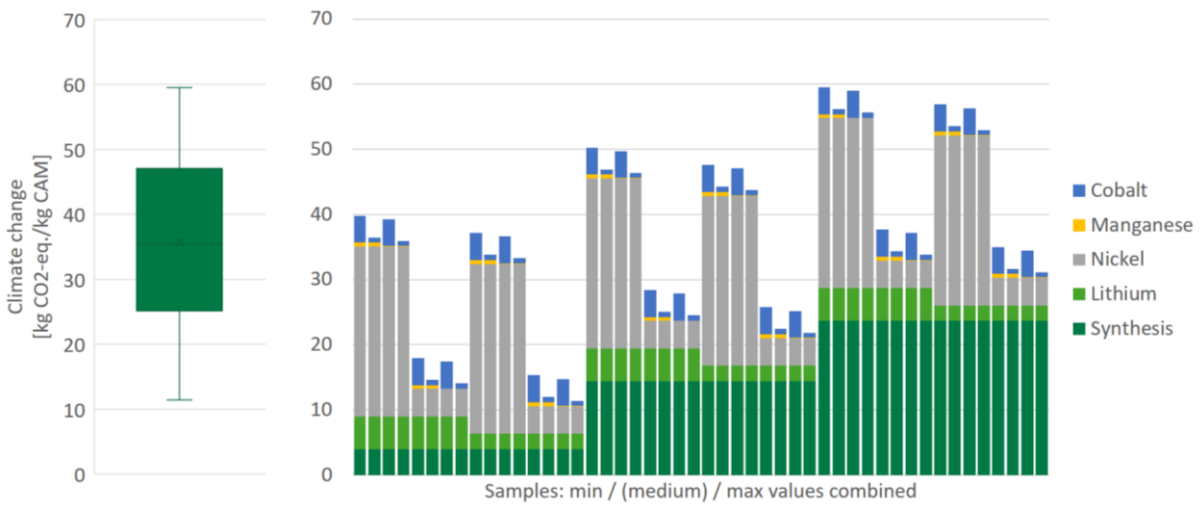



*Abbildung 20: Klimaänderung [kg $CO_2$-Äq.] der Herstellung von 1 kg CAM (914545) unter Variation der Vorketten für Nickel, Mangan, Cobalt und Lithium sowie des Strommix für die Syntheseprozesse, dargestellt als Boxplot (links) und Beitragsanalyse der Stichproben (rechts).*

Somit konnten entsprechend Meilenstein 3 („Ressourceneffizienzstrategien sind identifiziert") die folgenden Dekarbonisierungsstrategien abgeleitet werden: Auf der Wertschöpfungsketten-Ebene sollten erneuerbaren Energien mit geringeren Einfluss auf die Klimaänderung eingesetzt werden. Zudem sollten CAM-Produzenten Rohmaterialien (insbesondere Nickel) mit geringen Umweltwirkungen sourcen. Für Nickel bedeutet das z.B. die Gewinnung aus sulfidischen statt lateritischen Erzen und den Bezug des Rohmaterials aus Regionen mit geringerem $CO_2$-Fußabdruck in der Energiegewinnung (z.B. aus Kanada oder Russland statt Indonesien oder Philippinen). Auf Prozessebene sollte der Ressourceneinsatz beispielsweise durch Skalierung der Prozesse reduziert werden, sodass der Energiebedarf, die Materialverluste und der Einsatz von Chemikalien sinken.

## 2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Aufgrund der umfangreichen experimentellen und Entwicklungsarbeiten stellten ein Großteil des Budgets der TU Braunschweig im Projekt SUSTRAB Personalmittel dar, welche im Laufe des Projekts zudem aus anderen Positionen mittels Umwidmungen aufgestockt wurden. Weiterhin traten Reisekosten für Konferenzteilnahmen, Projekttreffen und Austausche mit den assoziierten australischen Partnern auf. Zum Ausgleich des weltweit gestiegenen Preisniveaus und somit Mehrkosten für Flüge und Hotels wurden die Reisemittel ebenso durch Umwidmungen aus anderen Positionen innerhalb des Projekts aufgestockt, sodass das Budget nur leicht überschritten wurde. Die Kosten für Materialien und Investitionen (für die Zell- und Elektrodenproduktion sowie den Demonstrator-Aufbau) traten dagegen in geringerem Maße als geplant auf, sodass insgesamt das Projektbudget nicht überschritten wurde.

## 3. Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse

Im Rahmen des Projektes sind seitens der TU Braunschweig mehrere wissenschaftliche Veröffentlichungen entstanden, welche u.a. auf der CIRP Life Cycle Engineering-Konferenz oder der International Battery Production Conference vorgestellt und dort mit dem Fachpublikum diskutiert wurden (während der Projektlaufzeit). Durch die Konferenzteilnahmen, aber auch die projektinternen Austausche mit assoziierten Partnern wurden die Projektergebnisse bereits

während des Projektes der Industrie zugänglich gemacht. Insbesondere die enge Orientierung der Projektarbeit an der EU-Batterieverordnung kann den Unternehmen helfen, die kommenden komplexen gesetzlichen Vorgaben einzuhalten und gleichzeitig einen Mehrwert bzw. Marktvorteil aus der frühen Anpassung zu generieren (1-3 Jahre nach Projektende).

Die Projektergebnisse werden zudem über die Veröffentlichungen hinaus zur Erweiterung bestehender Lehrveranstaltungen genutzt (1-3 Jahre nach Projektende) und in zukünftigen studentischen Arbeiten sowie Promotionsvorhaben aufgegriffen und erweitert (1-5 Jahre nach Projektende). Insbesondere die Integration des Demonstrators aus AP 3 & 4 in die Lernfabrik des für zirkuläre Batteriezellproduktion (EducationLab @BLB+) stellt den direkten Einsatz als Lehrobjekt dar und bietet die Möglichkeit für weitere (studentische) Forschungsarbeiten sowie Formate mit der Industrie (ab Projektende für 3-5 Jahre). Darüber hinaus wird aus dem Projekt eine Dissertation zum Thema Blockchain-gestützte Transparenz zur Förderung der Nachhaltigkeit in Batterieproduktionsnetz-werken abgeschlossen (0-1 Jahr nach Projektende).

## 4. Während der Laufzeit bekannt gewordene, relevante Ergebnisse Dritter

Die am 14.06.2023 verabschiedete EU-Batterieverordnung [20] wurde als ein wesentlicher Aspekt in der Anforderungsanalyse in AP 3 berücksichtigt. Hierin wird u.a. die Implementierung eines Rückverfolgungssystems, bzw. „System von Kontrollen und Transparenz hinsichtlich der Lieferkette“, nach Artikel 49 (1(d)) von den Wirtschaftsakteuren gefordert. Ein solches System ist bisher noch nicht weiter definiert. Die in SUSTRAB im Rahmen von AP 3 erarbeitete Transparenzplattform stellt einen Vorschlag und Prototypen dar, um genau diese neue Vorgabe an die Wirtschaftsakteure zukünftig erfüllen zu können. Weiterhin wurden sich an den Vorschlägen zur technischen Umsetzung des Batteriepasses [21] seitens des Projekts „Battery Pass“ orientiert, welche später in den Standard DIN DKE SPEC 99100 [22] überführt wurde.

Im April 2024 wurde durch die Europäische Kommission der Entwurf der delegierten Verordnung zur neuen Batterieverordnung [13] veröffentlicht. Darin sind Durchführungsvorschriften für die Berechnung und Überprüfung des $CO_2$-Fußabdrucks von Batterien über den gesamten Lebenszyklus zu finden. Die vielfältigen Rückmeldungen aus Industrie und Wissenschaft auf die vorgegebene Methode wurden im Rahmen des Arbeitspakets 4 berücksichtigt.

## 5. Erfolgte und geplante Veröffentlichungen

### Fachartikel

| Lfd. Nr. | Autoren | Titel | Journal, Volume, Issue, Page | DOI | Jahr |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | Rolinck, M., Khakmardan, S., Cerdas, F., Mennenga, M., Li, W., & Herrmann, C. | Completeness evaluation of LCI datasets for the environmental assessment of lithium compound production scenarios. | Procedia CIRP, 116, 726–731 | https://doi.org/10.1016/j.procir.2023.02.122 | 2023 |
| 2 | Khakmardan, S., Rolinck, M., Cerdas, F., Herrmann, C., Giurco, D., Crawford, R., & Li, W. | Comparative Life Cycle Assessment of Lithium Mining, Extraction, and Refining Technologies: a Global Perspective | Procedia CIRP, 116, 606–611 | https://doi.org/10.1016/j.procir.2023.02.102 | 2023 |
| 3 | Haupt, J., Cerdas, F., & Herrmann, C. | Derivation of requirements for life cycle assessment-related information to be integrated in digital battery passports | Procedia CIRP, 122: 300–305 | https://doi.org/10.1016/j.procir.2024.01.044 | 2024 |
| 4 | Grenda, T., Meer, H., Keilhofer, J., Daub, R., & Kwade, A. | Impact of dissolver setup on the performance of Nickel-rich active material cathodes for lithium ion batteries | Energy Technology | https://doi.org/10.1002/ente.202500331 | 2025 |

### Promotionen

| Lfd. Nr. | Autoren | Titel | Jahr | Status |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Rolinck, M. | Blockchain-enhanced transparency to support sustainability in battery production networks | 2025 | Laufendes Verfahren; Abschluss voraussichtlich bis Ende 2025 |

**Konferenzbeitrag**

| Lfd. Nr. | Autoren | Titel | Typ (Poster, Präsentation) | Konferenz/Tagung | Datum |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | Haupt, J., Rolinck, M., Cerdas, F., & Herrmann, C. | Development of a data transparency platform for sustainable battery material value chains | Poster | Advanced Battery Power, Aachen | 26. – 28.04.2023 |
| 2 | Rolinck, M. | A blockchain platform demonstrator to increase transparency and to enhance more sustainable battery material value chains | Präsentation | International Battery Production Conference (IBPC), Braunschweig | 08.11.2023 |
| 3 | Rolinck, M., Holsten, J., Mennenga, M., & Herrmann, C. | Blockchain-enhanced information flows to increase transparency and support sustainable battery material value chains | Poster | International Battery Production Conference (IBPC), Braunschweig | 27. – 29.2024 |
| 4 | Grenda, T., & Kwade, A. | Study of Electrochemical Characteristics of Differently Produced Nickel-Rich Cathodes | Präsentation | ECS PRiME, Honolulu | 06. - 11.10.2024 |

**Quellen**


[1] T. Grenda, H. Meer, J. Keilhofer, R. Daub, und A. Kwade, „Impact of Dissolver Setup on the Performance of Nickel-Rich Active Material Cathodes for Lithium Ion Batteries“, *Energy Technology*, Juli 2025, doi: 10.1002/ente.202500331.

[2] K. Wang *u. a.*, „Hybrid super-aligned carbon nanotube/carbon black conductive networks: A strategy to improve both electrical conductivity and capacity for lithium ion batteries“, *J Power Sources*, Bd. 233, S. 209–215, Juli 2013, doi: 10.1016/j.jpowsour.2013.01.102.

[3] H. Bockholt, M. Indrikova, A. Netz, F. Golks, und A. Kwade, „The interaction of consecutive process steps in the manufacturing of lithium-ion battery electrodes with regard to structural and electrochemical properties“, *J Power Sources*, Bd. 325, S. 140–151, Sep. 2016, doi: 10.1016/j.jpowsour.2016.05.127.

[4] G. Liu, H. Zheng, X. Song, und V. S. Battaglia, „Particles and Polymer Binder Interaction: A Controlling Factor in Lithium-Ion Electrode Performance“, *J Electrochem Soc*, Bd. 159, Nr. 3, S. A214–A221, Jan. 2012, doi: 10.1149/2.024203jes.

[5] J. Kim, H. Lee, H. Cha, M. Yoon, M. Park, und J. Cho, „Prospect and Reality of Ni-Rich Cathode for Commercialization“, *Adv Energy Mater*, Bd. 8, Nr. 6, S. 1–25, Feb. 2018, doi: 10.1002/aenm.201702028.

[6] M. Beak *u. a.*, „Understanding the effect of nonmetallic impurities in regenerated cathode materials for lithium-ion battery recycling by tracking down impurity elements“, *J Hazard Mater*, Bd. 425, S. 127907, März 2022, doi: 10.1016/j.jhazmat.2021.127907.

[7] M. Ge *u. a.*, „Kinetic Limitations in Single-Crystal High-Nickel Cathodes“, *Angewandte Chemie International Edition*, Bd. 60, Nr. 32, S. 17350–17355, Aug. 2021, doi: 10.1002/anie.202012773.

[8] M. Jo, H. Ku, S. Park, J. Song, und K. Kwon, „Effects of Residual Lithium in the precursors of Li[Ni 1/3 Co 1/3 Mn 1/3 ]O 2 on their lithium-ion battery performance“, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Bd. 118, S. 47–52, Juli 2018, doi: 10.1016/j.jpcs.2018.02.043.

[9] Q. Sa, J. A. Heelan, Y. Lu, D. Apelian, und Y. Wang, „Copper Impurity Effects on $LiNi_{1/3}Mn_{1/3}Co_{1/3}O_2$ Cathode Material“, *ACS Appl Mater Interfaces*, Bd. 7, Nr. 37, S. 20585–20590, Sep. 2015, doi: 10.1021/acsami.5b04426.

[10] R. Zhang *u. a.*, „Systematic Study of Al Impurity for NCM622 Cathode Materials“, *ACS Sustain Chem Eng*, Bd. 8, Nr. 26, S. 9875–9884, Juli 2020, doi: 10.1021/acssuschemeng.0c02965.

[11] M. Rolinck, S. Khakmardan, F. Cerdas, M. Mennenga, W. Li, und C. Herrmann, „Completeness evaluation of LCI datasets for the environmental assessment of lithium compound production scenarios“, *Procedia CIRP*, Bd. 116, S. 726–731, 2023, doi: 10.1016/j.procir.2023.02.122.

[12] S. Khakmardan *u. a.*, „Comparative Life Cycle Assessment of Lithium Mining, Extraction, and Refining Technologies: a Global Perspective“, *Procedia CIRP*, Bd. 116, S. 606–611, 2023, doi: 10.1016/j.procir.2023.02.102.

[13] European Commission, „Draft: Commission delegated regulation (EU) supplementing Regulation (EU) 2023/1542 of the European Parliament and of the Council by establishing the methodology for the calculation and verification of the carbon footprint of electric vehicle“, 2024

[14] Responsible Mining Foundation, „Responsible Mining Index: Methodology 2022“, Sep. 2021. Zugegriffen: 16. Oktober 2024. [Online]. Verfügbar unter: https://2022.responsiblemininingindex.org/en/methodology

[15] Argonne National Laboratory, „GREET“, 2023. [Online]. Verfügbar unter: https://www.energy.gov/eere/greet

[16] Umweltbundesamt, „Probas“. Zugegriffen: 24. März 2025. [Online]. Verfügbar unter: https://www.probas.umweltbundesamt.de/

[17] J. Haupt, F. Cerdas, und C. Herrmann, „Derivation of requirements for life cycle assessment-related information to be integrated in digital battery passports“, *Procedia CIRP*, Bd. 122, S. 300–305, 2024, doi: 10.1016/j.procir.2024.01.044.

[18] Global Battery Alliance, „Greenhouse Gas Rulebook - Generic Rules, Version 2.0“, 2023.

[19] Electricity Maps ApS, „Electricity Maps: $CO_2$-Emissionen des Stromverbrauchs in Echtzeit“. [Online]. Verfügbar unter: https://www.electricitymaps.com/

[20] European Parliament, „Regulation (EU) 2023/1542 of the European parliament and the council of 12 July 2023 concerning batteries and waste batteries, amending Directive 2008/98/EC and Regulation (EU) 2019/1020 and repealing Directive 2006/66/EC“, 2023

[21] Battery Pass Consortium, „Battery Passport Technical Guidance: Technical challenges, standards and recommendations for a battery passport system“, März 2024.

[22] „Anforderungen an Datenattribute des Batteriepasses“, DIN DKE SPEC 99100:2025-02, Februar 2025 [Online]. Verfügbar unter: www.din.de