

News

Projektabschluss - Lernende Multi-Skalen-Optimierung SiO₂-basierende Anodenmaterialien (LeMO_{2n})

Würzburg, 24.06.2024

Im LeMO_{2n}-Projekt hat das CAE SiO₂-basierte poröse Matrixmaterialien für die Verwendung in Si-basierten Lithium-Ionen-Batterien entwickelt. Bei der Materialentwicklung sowohl auf Seiten der SiO₂-Matrix, als auch bei den Si/SiO₂-Aktivmaterialien kam KI zur Beschleunigung und Verbesserung der Materialentwicklung zum Einsatz.

SiO₂-Matrixmaterial

Das erste Projekt am CAE, bei dem die Materialentwicklung mit Künstlicher Intelligenz (KI) verknüpft wurde, ist abgeschlossen. Im LeMO_{2n}-Projekt wurden seitens des CAE poröse Silica-Materialien mit spezieller Porengeometrie entwickelt, die als Matrixmaterial für Si-basierte Lithium-Ionen-Batterien Verwendung finden. Wesentliche Herausforderung hierbei war die Anforderung, möglichst große Porenvolumina bei möglichst kleinen Poren, sogenannten Mikroporen (< 2 nm) bereitzustellen. Diese für poröse Kohlenstoffe typische Eigenschaft gab es für Silica bisher nicht – und im LeMO_{2n}-Projekt konnten SiO₂-Materialien mit strukturellen Eigenschaften synthetisiert werden, die bisher nicht zugänglich waren.

Si/SiO₂-Aktivmaterial

Die am CAE entwickelten SiO₂-Matrixmaterialien wurden dann beim Projektpartner WACKER zu Si-basierten Aktivmaterialien weiterprozessiert und elektrochemisch vermessen. Dabei standen insbesondere die initiale Coulombeffizienz, die Anodenkapazität und die Zyklenbeständigkeit der mit den Aktivmaterialien hergestellten Elektroden im Vordergrund.

Charakterisierung & KI

In beiden Stufen der Materialentwicklung, SiO₂-Matrix- und Si/SiO₂-Aktivmaterial hat das CAE seine herausragende Messtechnik eingesetzt, in diesem Fall die Röntgenkleinwinkelstreuung (Small Angle X-ray Scattering – SAXS), um mit diesem schnellen High-Throughput-Verfahren strukturelle Parameter zu bestimmen und „Fingerprint-Spektren“ für den Einsatz von KI zu liefern. An der THWS (Technische Hochschule Würzburg-Schweinfurt) kam dann das Maschinelle Lernen (ML) unter Verwendung von neuronalen Netzen und Autoencoder zum Einsatz. Damit konnten mittels struktureller Daten und SAXS-Spektren einerseits eine Optimierung der Syntheseparameter der SiO₂-Matrixmaterialien ermöglicht werden. Andererseits gelang es, aufgrund der strukturellen Eigenschaften und SAXS-Spektren auch die elektrochemischen Eigenschaften von Si/SiO₂-Aktivmaterialien vorherzusagen und Rückmeldung für eine optimale Prozessierung zu geben.

Center for Applied Energy
Research e.V.
Magdalene-Schoch-Straße 3
97074 Würzburg
T +49 (0) 931 70564-0

www.cae-zeroarbon.de

Vorstand
Dr. Hans-Peter Ebert
Geschäftsführender
Vorstandsvorsitzender

Prof. Dr. Jürgen Hartmann
Vorstand u. wissenschaftlicher Leiter

USt-IdNr.
DE 356797496

Registergericht
Amtsgericht Würzburg
VR 201439

Bankverbindung
VR-Bank Würzburg
IBAN | DE45 7909 0000
0200 5708 69
BIC | GENODEF1WU1

in-operando SAXS

Zum Abschluss des LeMO₂n-Projekts stand noch ein wissenschaftliches Highlight an: die hergestellten Elektroden wurden in-operando, d.h. während des Lade- und Entladevorgangs auf mikroskopischer Ebene mit SAXS untersucht. Abbildung 1 zeigt die neue SAXS-Messzelle für elektrochemische Untersuchungen am CAE. Aus den Streukurven der Zyklierung (Abbildung 2) gehen zwei wesentliche Aspekte hervor:

- 1) Der geladene Zustand ist klar von den entladenen Kurven zu unterscheiden aufgrund des Quell- (geladen) und Kontraktionsverhaltens (entladen).
- 2) Der kontinuierliche Anstieg der Streuintensität mit zunehmender Zyklenzahl beweist eine irreversible Änderung der Strukturen auf der Nanoskala und deutet auf eine zunehmende Zerkleinerung des Aktivmaterials hin, z.B. durch Mikrorisse oder Fragmentierung. Dieser recht deutlich ausgeprägte Degradationseffekt ist vermutlich für den Abfall der Elektrodenkapazität verantwortlich und begrenzt damit die Zyklenstabilität der Si/SiO₂-Aktivmaterialien.

Mit der neuen Messtechnik sind nun auch Informationen auf der Nanoskala zu Degradationsmechanismen von elektrochemischen Systemen zugänglich. Mit einem verbesserten Verständnis dieser Mechanismen ist es möglich, Gegenmaßnahmen zu entwickeln und die technischen Eigenschaften von Batterien in der Zukunft zu verbessern.

Danksagung

Das LeMO₂n-Projekt wurde vom Bayerisches Staatsministerium für Wirtschaft, Landesentwicklung und Energie gefördert (Förderkennzeichen: 47-6665g/1301/2-MW-2012-00019). Das CAE bedankt sich beim Fördergeber und seinen Projektpartnern WACKER und THWS für die exzellente Zusammenarbeit der letzten 3 Jahre.

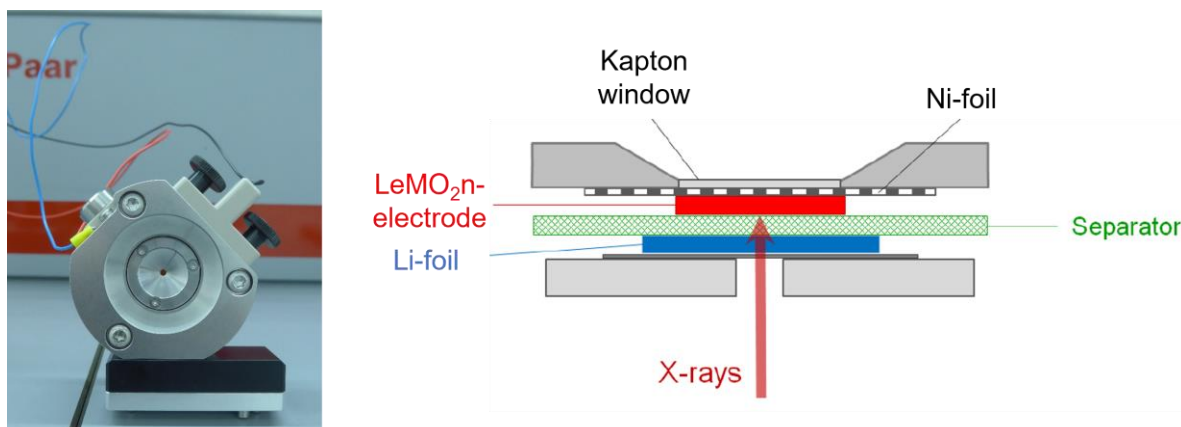


Abbildung 1: Links: SAXS-Messzelle für Elektrochemie. Rechts: schematischer Messaufbau zur in-situ SAXS-Charakterisierung während der elektrochemischen Zyklierung der LeMO₂n-Elektrode.

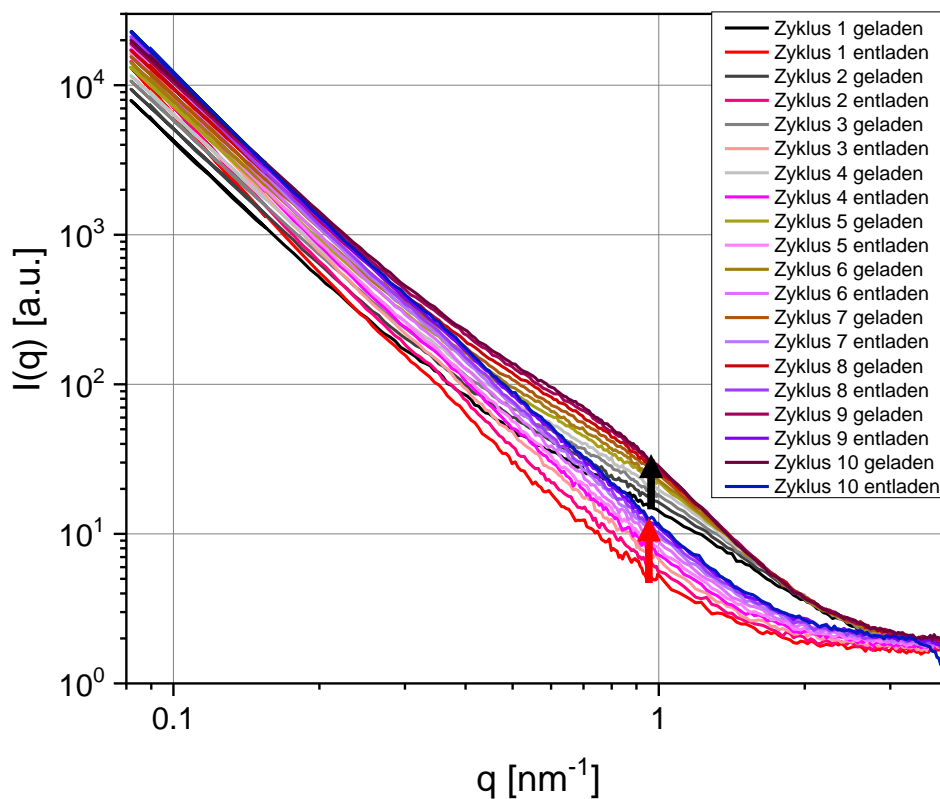


Abbildung 2: Streukurven während der Zyklisierung einer LeMO_{2n} -Elektrode. Ge- und entladener Zustand sind klar unterscheidbar. Die Streuintensität steigt kontinuierlich mit zunehmender Zyklenzahl an.