

OpMoSi

Optimierung der Morphologie eines Si-basierten Elektrodensystems für Li-Ionen Zellen im Produktionsprozess

Programm / Ausschreibung	Mobilität der Zukunft, Mobilität der Zukunft, MdZ M-EraNet Ausschreibung 2021	Status	laufend
Projektstart	01.04.2022	Projektende	31.01.2026
Zeitraum	2022 - 2026	Projektlaufzeit	46 Monate
Keywords	Li-Ionen Batterie; Silizium-Anoden; Zellproduktion; Zellcharakterisierung; Digitaler Zwilling;		

Projektbeschreibung

Im Projekt OpMoSi werden zukunftsweisende Batterietechnologien, namentlich Hollow Core-Shell Silizium-Kohlenstoff (HCS Si-C) Komposit Anoden, mittels Unterstützung hochauflösender bildgebender Verfahren und modernster Simulationstechnologie, entwickelt und optimiert.

Diese neuartige Chemie zeichnet sich durch ihre, gegenüber herkömmlichen Graphit-Anoden, signifikant erhöhte Kapazität (1500 Ah/kg vs. 370 Ah/kg) sowie eine ausgezeichnete Zyklfestigkeit aus. Außerdem minimiert die Morphologie und insbesondere die Mikrostruktur der verwendeten Partikel das bekannte Problem der Volumenausdehnung von bis zu 300% bei herkömmlichem Silizium.

Dennoch bleibt die Volumenausdehnung eine kritische Kenngröße, die zu schweren strukturellen Schäden bis hin zum Totalausfall der Zelle führen kann. Die Steuerung der Volumenausdehnung kann prozesstechnisch über die Verdichtung des Elektrodenmaterials (Kalandrieren) erfolgen, wobei man sich hier in ein Spannungsfeld aus Energiedichte, Zyklstabilität und Volumenausdehnung begibt.

Im Projekt soll deswegen der Prozessschritt des Kalandrierens in den Mittelpunkt gesetzt werden und dessen Auswirkungen auf das Material durch bildgebende Verfahren in Nanometer Auflösung verstanden und vermessen werden. Aufgrund der großen zu erwartenden Datenmengen werden neuronale Netze entwickelt, die die Auswertung dieser Daten systematisieren sollen.

Parallel dazu werden kontinuumsmechanische Multi-Skalen Modelle entwickelt, die in bestehenden Simulationsframeworks implementiert werden, mittels deren eine virtuelle Optimierung des Prozesses sowie der Zellen durchgeführt wird. Diese Tools werden durch Standardisierung in einen industriell erprobten Kontext eingepflegt, validiert und einem virtuellen Upscaling auf Zell-, Modul- und Packebene zugeführt.

Das so gewonnene Verständnis wird eingesetzt, um NMC622/(HCS Si-C) Zellen mit Anoden im 1000 Ah/L Kapazitätsbereich mit 1000 Zyklen Lebensdauer und einer vertretbaren maximalen Ausdehnung von 12% im Labormaßstab zu erzeugen. Als Projektresultat wird für die Vollzellen eine um 20-30% erhöhte Energiedichte im Vergleich zu State-of-the-Art Zellen angestrebt.

Abstract

In the OpMoSi project, pioneering battery technologies, namely hollow core-shell silicon-carbon (HCS Si-C) anodes, are being developed and optimised with the support of high-resolution imaging methods and advanced simulation technology. This novel chemistry is characterised by its significantly increased capacity (1500 Ah/kg vs. 370 Ah/kg) compared to conventional graphite anodes, as well as excellent cycle stability. In addition, the morphology and especially the microstructure of the particles used minimise the well-known problem of volume expansion of up to 300% with conventional silicon.

Nevertheless, volume expansion remains a critical parameter that can lead to severe structural damage and even total cell failure. The volume expansion can be controlled by process engineering via the compression of the electrode material (calendering), whereby one enters a field of tension between energy density, cycle stability and volume expansion.

The project will therefore focus on the process step of calendering and its effects on the material will be understood and measured using imaging methods with nanometre resolution. Due to the large amounts of data to be expected, neural networks will be developed to systematise the evaluation of this data.

In parallel, continuum mechanical multi-scale models will be developed which will be implemented in existing simulation frameworks, by means of which a virtual optimisation of both the process and the cells will be carried out.

These tools will be standardised into an industrially proven context, validated, and subjected to a virtual upscaling to cell, module, and pack level.

The gained knowledge is used to produce NMC622/(HCS Si-C) cells with anodes in the 1000Ah/L capacity range with a lifetime of 1000 cycles and a reasonable maximum expansion of 12% on a laboratory scale. As a result of the project, for full cells an increase in energy density by 20-30% compared to state-of-the-art cells is targeted.

Endberichtkurzfassung

Im Projekt OpMoSi wurden innovative Silizium-Kohlenstoff-Anoden für Lithium-Ionen-Batterien entwickelt und deren Herstellung sowie deren Einsatz durch moderne bildgebende Verfahren, KI-gestützte Auswertung und Multiskalen-Simulationen umfassend untersucht. Dabei konnten wesentliche Zusammenhänge zwischen Materialdesign, Prozessführung und Zellperformance systematisch aufgezeigt werden.

Ein besonderer Fokus lag auf dem Kalandrierprozess, dessen Einfluss auf Mikrostruktur, mechanische Stabilität und elektrochemische Performance detailliert analysiert wurde. Durch die gewonnenen Erkenntnisse konnten optimale Verdichtungsfenster identifiziert sowie ein besseres Verständnis der Zielkonflikte zwischen Energiedichte, Zyklenstabilität und Volumenausdehnung erlangt werden.

Die Kombination aus experimentellen Methoden und einer neu entwickelten Digital-Twin-Toolkette ermöglichte es, die Entwicklung neuer Zellkonzepte deutlich zu beschleunigen und die Anzahl notwendiger Iterationen im Entwicklungsprozess zu reduzieren. Zudem wurden standardisierbare Methoden zur Datenanalyse und Modellvalidierung geschaffen, die auch für zukünftige Material- und Zellgenerationen nutzbar sind.

Im Labormaßstab wurden Anoden mit hoher Kapazität, guter Zyklenstabilität und kontrollierter Ausdehnung realisiert, wodurch eine deutliche Steigerung der Energiedichte gegenüber konventionellen Graphit-Systemen erzielt werden konnte. Insgesamt leistet das Projekt damit einen wichtigen Beitrag zur Entwicklung leistungsfähiger, ressourceneffizienter und industrienaher Batterietechnologien der nächsten Generation.

Projektkoordinator

- Virtual Vehicle Research GmbH

Projektpartner

- AVL List GmbH
- Materials Center Leoben Forschung GmbH
- VARTA Innovation GmbH