OpMoSi

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

Programm / Ausschreibung	Mobilität der Zukunft, MdZ M-EraNet Ausschreibung 2021	**Status**	abgeschlossen
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 Zyklenfestigkeit 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, Zyklenstabilität 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.

Projektkoordinator

- Virtual Vehicle Research GmbH

Projektpartner

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