

RosiLib:

Das Ziel des Verbundvorhabens „RoSi“ ist die Entwicklung eines neuartigen Anodematerials für Lithium-Ionen-Batterien (LIB). Dieses ermöglicht eine höhere Speicherkapazität der LIBs bei gleichem Volumen oder Gewicht, eine Hauptforderung der Elektromobilität. Der Ersatz des aktuellen Anodenmaterials Graphit durch Silizium bringt diesen Fortschritt, allerdings pulverisiert Si nach wenigen Ladezyklen, die LIBs haben keine akzeptable Lebensdauer. Nur nanostrukturierte Si-Anoden führen zu stabilen LIBs. „Rosi“ entwickelt ein kostengünstiges Verfahren zur Herstellung von nanoporösen Si-Mikroteilchen mit weiterer Verbesserung durch nanoskalige Teilchenbeschichtung mit Kohlenstoff. Die nanotechnologischen F&E-Aufgaben in Rosi erfordern eine fortschrittliche nanoskopische Analytik, die am HZDR verfügbar ist. Dazu gehören die Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) zur Untersuchung der Nanoporosität und die Charakterisierung nanoskaliger Schichten auf Mikroteilchen. Eine bildgebende Elementanalyse (EDX) wird eingesetzt, um den Auslaugungsprozess der Metallmatrix aus dem Si-Schwamm zu kontrollieren. Neueste Methoden wie TEM-Tomografie und Helium-Ionen-Mikroskopie, die am HZDR im Rahmen eines EU-Projektes weiterentwickelt wird, kommen zur Anwendung. Ein zweiter Beitrag des HZDR zum Verbundvorhaben ist die Nutzung seiner materialwissenschaftlichen Kompetenz, insbesondere zu Prozessmodellierungen und Computersimulationen. Zur Synthese von Si-Nanoschwammschichten hat das HZDR ein internationales BMBF-Verbundprojekt koordiniert. Das dort eingesetzte kinetische 3D Monte-Carlo-Programm wird für das Rosi-Projekt modifiziert. Simulationen zur Rascherstarrung von Mikrotröpfchen reduzieren den experimentellen Aufwand. Weitere Prozesssimulationen werden zur Teilchendynamik im Pulver während der Vakuumbeschichtung durchgeführt. Erst durch solche Simulationen kann eine Beschichtung der Teilchen unter der Einwirkung von Gravitation, Dampfdruck und elektrischen Feldern optimiert werden.

The project „Rosi“ aims at the development of a novel anode material for Lithium-Ion-Batteries (LIB). This material, a powder, will increase the capacity of LIBs at unchanged weight and volume, the principle claim of electric mobility. The progress will be achieved by the replacement of the present anode material graphite with silicon. However, Si pulverizes after a few charging cycle, the LIBs have no tolerable lifetime. Only nanostructured Si anodes result in stable LIBs. „Rosi“ develops a cost-efficient fabrication technique of nanoporous Si microparticles, which will be improved further by nanoscale coating with carbon. The nanotechnological R&D tasks of Rosi require advanced nanoscopic analysis which is available at the HZDR. Among others, there is Transmission Electron Microscopy (TEM) to study the nanoporosity and to characterize nanoscale layers on microparticles. An imaging method of the distribution of elements in the nanosponge (EDX) will be employed to study the extraction of the metallic matrix from the Si sponge. Advanced methods like TEM tomography and Helium Ion Microscopy, which is under development at HZDR in the framework of an EU project, will be applied. A second HZDR contribution to Rosi is the supply of its expertise in materials science, especially process modelling and computer simulations. The HZDR coordinated an international BMBF project on the synthesis of thin layers of Si nanosponge. The kinetic 3D Monte Carlo program adapted for that project will be modified for the Rosi project to study the phase separation during quenching of microdroplets. This can reduce the experimental effort considerably. Additional process simulations deal with the powder particle dynamics during the coating process in vacuum. Only such calculations of particle trajectories under the impact of gravity, vapor pressure and electric fields allow the optimization of the coating process.