

PRESSEINFORMATION

PRESSEINFORMATION07. Januar 2020 || Seite 1 | 4

Mit atomaren Simulationen schneller zu interessanten Batteriematerialien

Vielversprechende Feststoff-Elektrolyte für leistungsstarke Lithium-Ionen Batterien

Leistungsfähige, langlebige Energiespeicher sind für viele Zukunftstechnologien von zentraler Bedeutung: Etwa für die Elektromobilität, für mobile Endgeräte wie Tablets oder Smartphones oder zur effizienten Nutzung regenerativer Energien. Dr. Daniel Mutter vom Freiburger Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM konnte klären, wie Feststoff-Elektrolyte aus Keramik chemisch zusammengesetzt sein müssen, um gute Leistung in Lithium-Ionen Batterien zu erbringen. Dies hat er im Journal of Applied Physics (<https://doi.org/10.1063/1.5091969>) veröffentlicht. Solche Feststoff-Elektrolyte sind umweltfreundlicher als herkömmliche Flüssig-Elektrolyte und könnten Lithium-Ionen Batterien deutlich leistungsfähiger und betriebssicherer machen.

»Die Überlegung, dass keramische Festkörper-Elektrolyte eine vielversprechende Alternative für herkömmliche Flüssig-Elektrolyte in Batterien und Akkumulatoren sein könnten, ist in der Materialwissenschaft nicht neu«, erklärt Dr. Daniel Mutter, Wissenschaftler der Gruppe [Materialmodellierung](#) am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM. Im Vergleich zu herkömmlichen Flüssig-Elektrolyten sind Festkörper-Elektrolyte sicherer im laufenden Betrieb: Sie bergen eine deutlich geringere Explosionsgefahr und bei einer Beschädigung, beispielsweise durch einen Crash, tritt keine Säure aus, die bei Menschen Verätzungen und Vergiftungen hervorrufen kann.

Geeignete chemische Verbindungen zur Gestaltung von Festkörper-Elektrolyten entdeckt

Im Allgemeinen fällt die ionische Leitfähigkeit von Keramik-Materialien geringer aus als die von Flüssig-Elektrolyten. Eine hohe ionische Leitfähigkeit verspricht jedoch die Klasse der sogenannten NZP-Keramiken: Ihr struktureller Aufbau ermöglicht die Existenz von »Wanderpfaden«, auf denen sich Lithium-Ionen leicht fortbewegen können. Das macht sie zum interessanten Kandidat für hochleistungsfähige Festkörperelektrolyte für Lithium-Ionen Batterien.

Unklar war bisher allerdings, warum bestimmte Verbindungen leistungsfähiger sind als andere und welche tatsächlich besonders gute Leistung erbringen. Die Anforderungen an die Materialeigenschaften von Batterie-Elektrolyten sind beachtlich: Die ionische

Pressekontakt

Thomas Götz | Telefon +49 761 5142-153 | thomas.goetz@iwm.fraunhofer.de | www.iwm.fraunhofer.de

Katharina Hien | Telefon +49 761 5142-154 | katharina.hien@iwm.fraunhofer.de | www.iwm.fraunhofer.de

FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR WERKSTOFFMECHANIK IWM

Leitfähigkeit soll hoch und die verwendeten chemischen Elemente sowohl ungiftig als auch reichhaltig in der Erdkruste vorhanden sein.

PRESSEINFORMATION07. Januar 2020 || Seite 2 | 4

Dr. Mutter identifizierte nun mithilfe atomistischer Simulationen mehrere Kombinationen chemischer Elemente für NZP-Keramiken, die für diese Anforderungen besonders vielversprechend sind. »Mit dieser computerbasierten Forschung können wir gesicherte Aussagen zu den Eigenschaften und der Stabilität verschiedener chemischer Elementverbindungen machen, ohne diese tatsächlich chemisch synthetisieren zu müssen«, erklärt der Forscher. Der Vorteil: Die tatsächliche Synthese ist teuer und benötigt Ressourcen. Die Simulationen führte er am Großrechner des Steinbuch-Supercomputer-Centers am Karlsruher Institut für Technologie durch.

Kürzeres Laden bei längerem Betrieb

»Diese besonders vorteilhaften Keramik-Festkörper-Elektrolyte können wir unter Umständen mit sehr leistungsfähigen Lithium-Metall-Anoden kombinieren – das ist bei den heute gebräuchlichen flüssigen Elektrolyten nicht möglich, denn sie reagieren stark mit metallischem Lithium und beschädigen dadurch die Batterie«, erklärt Dr. Mutter. »Im nächsten Schritt könnten wir mit Partnern praktisch testen, ob unsere vorhergesagten Elektrolytmaterialien die Ionenleitfähigkeit wie erwartet deutlich steigern und daraus bestehende Batterien eine sehr viel höhere Energie- und Leistungsdichte erreichen«, sagt der Physiker. Das hieße konkret: Kürzere Ladedauer bei längerer Betriebszeit, was insbesondere für die Elektromobilität von Vorteil wäre. Zudem bedeutet diese Kombination weniger Gewicht, da Lithium-Metall-Anoden bei gleicher Kapazität deutlich leichter sind als die bisher verwendeten Graphit-Anoden.

Leichtere Batterien mit zahlreich in der Erde vorhandenen Elementen

Die chemischen Elemente, aus denen die Elektrolytmaterialien bestehen, an denen Dr. Mutter forscht, sind zahlreich in der Erdkruste in Europa vorhanden und verhältnismäßig leicht abbaubar. So wird vermieden, dass Elemente wie etwa Kobalt, das beispielsweise in Lithium-Ionen-Batterien von Smartphones zum Einsatz kommt und oftmals aus dem Kongo importiert wird, zur Herstellung benötigt werden.

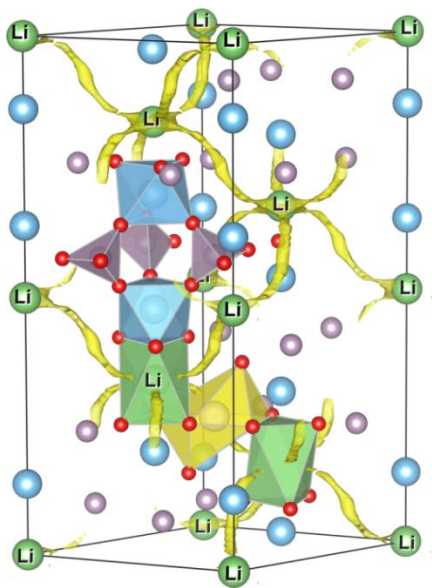
Über die Vorhersage vielversprechender Materialzusammensetzungen hinaus trägt Dr. Mutter mit seiner Forschung zum besseren Verständnis der atomaren Vorgänge in NZP-Keramiken bei. Er fand heraus, dass die für die Lithium-Ionen-Wanderung nötige Migrationsenergie auf eine andere Weise von der Sauerstoffumgebung um den Ionenwanderungspfad abhängt als bisher vermutet. Identifizierte Struktur-Eigenschaftsbeziehungen ermöglichen deutlich fundiertere Vorhersagen über die Auswirkungen der elementaren Besetzungen auf das Strukturgerüst und die Ionenleitfähigkeit der NZP-Keramiken.

Dr. Mutters Analysen sind Teil eines DFG-geförderten Forschungsprojekts zum Thema »Herstellung und Charakterisierung keramischer Festkörper-Elektrolyte mit hoher

Lithiumionenleitfähigkeit«, das er in Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und der TU München durchgeführt hat. Für seine hervorragende wissenschaftliche Leistung hat Dr. Mutter den Werkstoffmechanik-Preis 2019 des Fraunhofer-IWM erhalten. Die Originalpublikation zum Thema ist im Journal of Applied Physics erschienen (<https://doi.org/10.1063/1.5091969>).

PRESEINFORMATION

07. Januar 2020 || Seite 3 | 4



Hoffnungsträger für noch leistungsfähigere Lithium-Ionen-Batterien: Festkörper-Elektrolyt (hier $\text{LiTi}_2(\text{PO}_4)_3$, Li-grün, Ti-blau, P-lila, O-rot) mit Darstellung der »Wanderungspfade« für Lithium-Ionen (gelbe Bänder).

© Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM

Bild in Druckqualität: www.iwm.fraunhofer.de

Infokasten: Was sind NZP-Keramiken?

Die Klasse der NZP-Keramiken ist seit den 1960er Jahren bekannt und wird auch mit dem Begriff NASICON bezeichnet. Ihren Namen erhielt sie von der chemischen Struktur $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$, für die besonders positive Eigenschaften für die Herstellung von Festkörper-Elektrolyten entdeckt wurden. Die Stabilität von NZP-Keramiken wird durch eine charakteristische »Laternen«-Struktur der von den Sauerstoffatomen gebildeten Polyeder um die anderen Elemente ermöglicht. Daraus ergibt sich ein dreidimensionales Netzwerk von Wanderungspfaden für Lithium-Ionen, was zu einer hohen Ionenleitfähigkeit der Keramik führt. Die chemischen Elemente Natrium, Zirkonium und Phosphor können variiert werden. So kann – wie in der Grafik zu sehen – Natrium durch Lithium und Zirkonium durch Titan ersetzt werden. Die Variierbarkeit der Elemente ermöglicht, die Materialeigenschaften für eine Vielzahl elementarer Kombinationen computergestützt zu analysieren.

Fraunhofer IWM – Werkstoffe intelligent nutzen

- Wir machen Mechanismen und Prozesse in Werkstoffen und Materialsystemen beherrschbar, indem wir sie bewerten und modellhaft beschreiben. Dadurch erschließen wir Reserven bei der Leistungsfähigkeit und Effizienz von technischen Systemen.
- Wir erfassen Werkstoffe bis in atomare Strukturen und nehmen Einfluss auf Wechselwirkungen. Damit können wir Werkstoffeigenschaften für geforderte und neue Funktionalitäten einstellen.
- Wir durchdringen Materialsysteme und Fertigungsprozesse grundlegend und überführen sie in zuverlässige Produkte und Technologien. So verwirklichen wir gemeinsam mit Partnern aus Wissenschaft und Wirtschaft wettbewerbsentscheidende Innovationen.

Die **Fraunhofer-Gesellschaft** ist die führende Organisation für angewandte Forschung in Europa. Unter ihrem Dach arbeiten 72 Institute und Forschungseinrichtungen an Standorten in ganz Deutschland. Mehr als 26 600 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter erzielen das jährliche Forschungsvolumen von 2,6 Milliarden Euro. Davon fallen knapp 2,2 Milliarden Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung. Rund 70 Prozent dieses Leistungsbereichs erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten Forschungsprojekten

Weitere Ansprechpartner

Dr. Daniel Mutter | Telefon +49 761 5142-415 | daniel.mutter@iwm.fraunhofer.de | Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM, Freiburg
| www.iwm.fraunhofer.de