BayBatt
Bayerisches Zentrum für Batterietechnik

UNIVERSITÄT BAYREUTH

Bayerisches Zentrum für Batterietechnik (BayBatt)

Die Batterie der Zukunft erforschen.

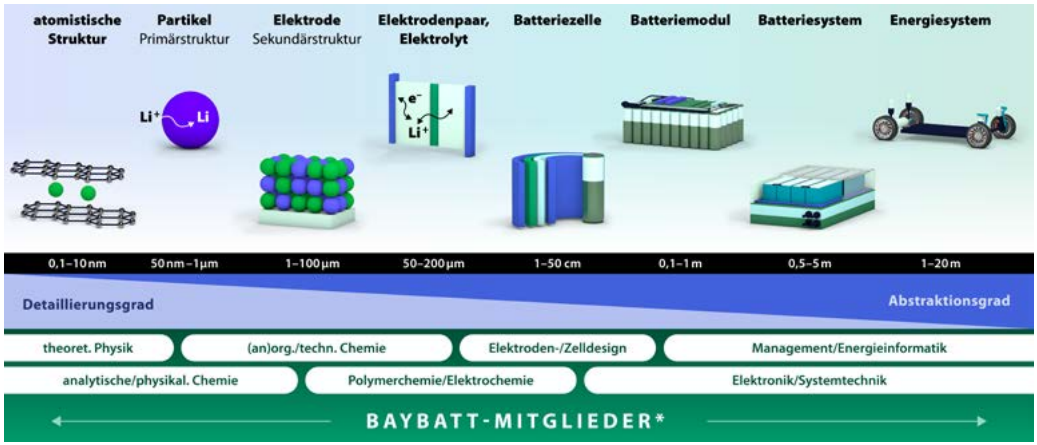
Bayerisches Zentrum für Batterietechnik (BayBatt)

Nachhaltig – Sicher – Intelligent: Energiespeicher der Zukunft entwickeln

Die Forschungsarbeiten am Bayerischen Zentrum für Batterietechnik (BayBatt) umfassen das gesamte Spektrum innovativer Batterietechnik: Sie reichen von molekularen Grundlagen über die Strukturierung von Elektroden und der Zellherstellung bis hin zum Einsatz von Batterien in vernetzten Energiespeichern. Die in Deutschland einzigartige fachliche Bandbreite spiegelt sich auch in den fachlichen Profilen der beteiligten Lehrstühle und ihren Forschungsschwerpunkten. Fragestellungen zu zukünftigen, verbesserten Recyclingpotentialen werden hier genauso bearbeitet wie die Entwicklung von Festkörperbatterien auf Natrium-Basis für mehr Reichweite und Sicherheit oder Aspekte moderner Batteriemanagementsysteme. Das BayBatt beschäftigt sich auf interdisziplinärer Basis mit allen zentralen Herausforderungen der Energiewende und der Elektromobilität.

Die Forschungsarbeiten des Zentrums sind umfassend und weitreichend, sie beschäftigen sich mit modernen Batteriespeichertechnologien aller Größenordnungen. Kernthemen sind die Sicherheit und Nachhaltigkeit von Batterien und deren Komponenten, aber auch die Intelligenz des Speichermediums selbst bis hin zur Wirtschaftsfähigkeit.

Entsprechend der interdisziplinären Ausrichtung stammen die BayBatt-Mitglieder aus vier verschiedenen Fakultäten und decken alle Größenskalen der Batterieforschung beziehungsweise alle Stufen der Wertschöpfungskette der Batterie ab.



Batterieforschung am BayBatt. Grafik: Daniela Leitner, Design trifft Wissenschaft.

Bayerisches Zentrum für Batterietechnik (BayBatt)

Ein Zentrum für die nächsten Generationen der Batterie

Überregionales Kompetenzzentrum am Standort Bayreuth

E-Mobilität, Energiespeicher der Zukunft, intelligente Batterien und Stromnetze – aktuelle Themen, die eine große Herausforderung für Industrie, Forschung und Gesellschaft darstellen. Das BayBatt setzt hier an und widmet sich der Erforschung und Entwicklung neuer Batterietechnologien für nachhaltige Lösungen zur Energieversorgung. Im BayBatt sollen Batteriespeicher für mobile und stationäre Anwendungen in Elektrofahrzeugen, Gebäuden und Netzen erforscht und weiterentwickelt werden, um zu intelligenten, zuverlässigen, sicheren, langlebigen, leistungsfähigen und nachhaltigen Energiespeichern zu werden. Das Zentrum baut dafür Brücken zwischen elektrochemischer, materialwissenschaftlicher und ingenieurwissenschaftlicher Grundlagenforschung und der industriellen Nutzung der entwickelten Verfahren und Modelle.

Das BayBatt bündelt batteriespezifische Expertise in Physik und Chemie, Material- und Ingenieurwissenschaften sowie Informatik und Ökonomie als überregionales Kompetenzzentrum am Standort Bayreuth.

Das Bayerische Zentrum für Batterietechnik

Vorstand

Direktor
Prof. Dr.-Ing. Michael Danzer
Lehrstuhl für elektrische Energiesysteme

Stellvertretender Direktor
Prof. Dr. Josef Breu
Lehrstuhl für Anorganische Kolloidchemie für elektrochemische Energiepeicher

Prof. Dr. Matteo Bianchini
Lehrstuhl für Anorganische Aktivmaterialien für elektrochemische Energiespeicher

Prof. Dr.-Ing. Ralf Moos
Lehrstuhl für Funktionsmaterialien

Prof. Dr.-Ing. Christina Roth
Lehrstuhl für Werkstoffverfahrenstechnik

Geschäftsstelle

Koordination
Dr. Matthias Daab
Dr. Maike Brütting

Ingenieur
BayBatt Cell Technology Center
Ehsan Emamjomeh, M.Sc.

v.l.n.r.: Prof. Dr.-Ing. Ralf Moos, Prof. Dr. Bianchini, Prof. Dr.-Ing. Christina Roth, Prof. Dr. Josef Breu, Prof. Dr.-Ing. Michael Danzer

Beirat

Das BayBatt wird in seiner fachlichen und strategischen Ausrichtung durch namhafte Vertreterinnen und Vertreter aus Industrie und Wissenschaft beraten.

Beirat

Vorsitzender des Beirats

Dr. Nicolas Bucher
VARTA

Stellvertretender Vorsitzender des Beirats

Dr. Martin Krebs
Freiberuflicher Batterieberater

Mitglieder des Beirats

Prof. Dr. Philipp Adelhelm
Humboldt-Universität Berlin

Dr. Klaus Eichhorn
Moll Batterien

Dr. Andreas Fischer
BASF

Prof. Dr. Jürgen Janek
Justus-Liebig-Universität Gießen

Prof. Dr.-Ing. Andreas Jossen
Technische Universität München

Dr. Edwin Knobbe
BMW

Prof. Dr.-Ing. Ulrike Krewer
Karlsruher Institut für Technologie

Dr. Markus Meiler
Webasto

Dr. Oswin Öttinger
Öttinger Consulting

Dr. Rainer Saliger
Siemens AG

Dr. Ingo Schmidt
TenneT

Dr. Christian Schreiner
SGL Carbon

Prof. Dr. Werner Tillmetz
Universität Ulm

Mitglieder

Physik

- Prof. Dr. Harald Oberhofer
  Theoretische Physik VII

Chemistry

- Prof. Dr. Seema Agarwal
  Makromolekulare Chemie II
- Prof. Dr. Matteo Bianchini
  Anorganische Aktivmaterialien elektrochemischer Speicher
- Prof. Dr. Josef Breu
  Anorganische Chemie I
- Prof. Dr. André Gröschel
  Polymermaterialien für elektrochemische Speicher
- *Prof. Dr. Thomas Lunkenbein*
  Operando-Analytik elektrochemischer Energiespeicher
- Prof. Dr. Johannes Margraf
  Physikalische Chemie V
- Prof. Dr. Roland Marschall
  Physikalische Chemie III
- Prof. Dr. Georg Papastavrou
  Physikalische Chemie II
- Prof. Dr. Markus Retsch
  Physikalische Chemie I
- Prof. Dr. Jürgen Senker
  Anorganische Chemie III
- Prof. Dr. Mukundan Thelakkat
  Angewandte Funktionspolymere
- Prof. Dr. Nella Vargas-Barbosa
  Elektrochemie

Ingenieurwissenschaften

- Prof. Dr.-Ing. Mark-Matthias Bakran
  Mechatronik
- Prof. Dr. Francesco Ciucci
  Elektrodendesign für elektrochemische Energiespeicher
- Prof. Dr.-Ing. Michael Danzer
  Elektrische Energiesysteme
- Prof. Dr.-Ing. Frank Döpper
  Umweltgerechte Produktionstechnik
- Prof. Dr.-Ing. Thorsten Gerdes
  Keylab Glastechnologie
- Prof. Dr. Christoph Helbig
  Ökologische Ressourcentechnologie
- Prof. Dr. Christopher Künneth
  Computational Materials Science
- Prof. Dr.-Ing. Vincent Lorentz
  Elektronik elektrischer Energiespeicher
- Prof. Dr.-Ing. Ralf Moos
  Funktionsmaterialien
- Prof. Dr. Vedran Perić
  Intelligentes Energiemanagement
- Prof. Dr.-Ing. Fridolin Röder
  Methoden des Batteriemanagements
- Prof. Dr.-Ing. Christina Roth
  Werkstoffverfahrenstechnik
- Prof. Dr.-Ing. Jan Philipp Schmidt
  Systemtechnik elektrischer Energiespeicher

Wirtschaftsinformatik

- Prof. Dr. Marie-Louise Arlt
  Wirtschaftsinformatik und vernetzte Energiespeicher
- Prof. Dr. Jens Strüker
  Wirtschaftsinformatik und Digitales Energiemanagement

Junior Principal Investigators

- Dr. Helen Grüninger
  Anorganische Chemie III
- Dr. Liang-Yin Kuo
  Theoretische Physik VII
- Dr. Qingsong Wang
  Anorganische Aktivmaterialien elektrochemischer Speicher

Theoretische Physik VII | Prof. Dr. Harald Oberhofer

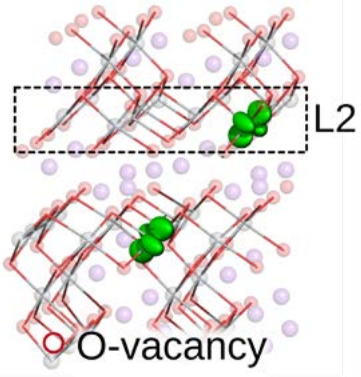
Batteriematerialien und Computergestütztes Materialdesign

Der Lehrstuhl für Theoretische Physik VII konzentriert sich auf Computer- und Datengestützte Untersuchungen von Ladungsträgertransport in verschiedenen Materialien, wie Batteriekomponenten und Photoelektrokatalysatoren und (Metall-)organischen Halbleitern. Grundlegende Prozesse werden dabei mittels ab-initio Methoden simuliert und die so generierten Daten mit statistischen und maschinenlernenden Methoden analysiert, um generelle Struktur/ Funktionsbeziehungen abzuleiten.

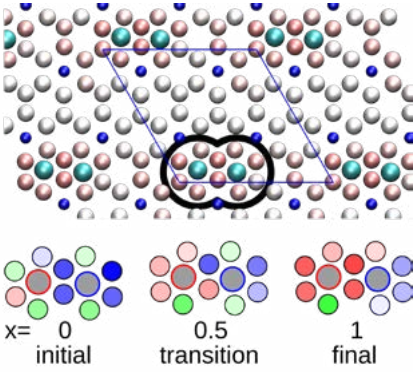
Batteriematerialien

Angesichts des immer dringender werdenden Umstiegs auf ein CO_2-neutrales Wirtschaftssystem ist neben den Problemen bei der nachhaltigen Energieerzeugung eine der größten Herausforderungen die effiziente Speicherung der so erzeugten Energie. Eine Option, elektrochemische Batteriesysteme, die im Prinzip seit über 200 Jahren bekannt sind, zeigen nur mangelhafte Energiedichten und Langzeitstabilitäten, wie sie z.B. fossile Energieträger aufweisen. Um diese Limitationen zu überwinden, werden auf der ganzen Welt innovative neue Konzepte, wie z.B. Festkörperbatterien erforscht.

Ein großer Teil dieser Forschungen bezieht sich dabei auf die Identifikation neuer Materialien und die Charakterisierung der beteiligten mikroskopischen Mechanismen, um diese für maximale Effizienz einsetzen zu können. Aufgrund der Natur einer elektrischen Batterie, beruhen diese Mechanismen auf dem Transport von Ladungsträgern, wie Elektronen oder Ionen. Über die Jahre hat die Gruppe eine Reihe von Methoden implementiert, die sich perfekt dafür eignen die grundlegenden Prozesse, die in Batteriematerialien auftreten, zu untersuchen.



Darstellung einer Lithium Titanat (LTO) Zelle mit Sauerstoff Fehlstelle. Die daraus resultierenden elektronischen Polaronezustände sind in Grün dargestellt.

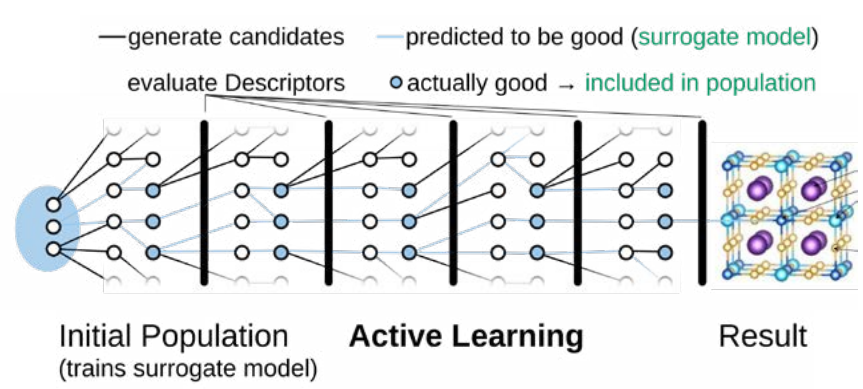


Rechts oben:
Schnitt durch die LTO Zelle in der Schicht L2 am Übergangszustand einer Polaronen Migration. In Cyan sind Anfangs- und Endzustand hervorgehoben, während Rotschattierungen die stärke der Verschiebung der Umgebungsatome anzeigen.

Diese mikroskopischen Einsichten können dann dazu dienen, bereits bekannte Materialien weiter zu optimieren, z.B. durch Erzeugung von Defekten in spezifischen Mustern. Dadurch lassen sich Materialien erzeugen, die nicht nur erhöhte Leitfähigkeiten, sondern auch bessere Stabilitäten aufweisen.

Computergestütztes Materialdesign

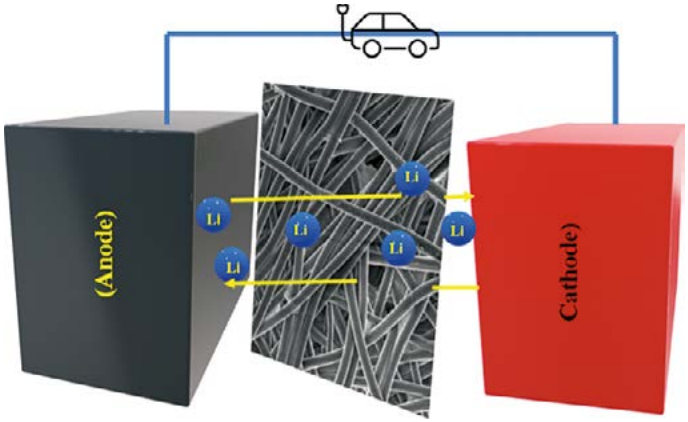
Ein großer Teil unserer Forschung ist das Design neuer Materialien für verschiedenste Anwendungen. Jedoch ist, zum Beispiel für organische Elektronikanwendungen, der Designraum möglicher molekularer Kristalle riesig, mit vielen Milliarden von möglichen Molekülen. Für die Anwendung entstehen dadurch unübertroffene Flexibilitäten bezüglich möglicher Material- oder elektronischer Eigenschaften, welche je nach Bedarf zurechtgezimmert werden können. Gleichzeitig behindert diese große Variabilität die Identifikation neuer Materialien aufgrund der enormen Räume die theoretisch durchsucht werden müssten. Daher arbeiten wir an der Bestimmung guter Deskriptoren, rechnerisch wenig fordernde Eigenschaften der Systeme, die mit den gewünschten Observablen, wie z.B. der Ladungsträgermobilität, korrelieren sowie Methoden diese mit ausreichender Genauigkeit zu berechnen. Mit diesen können wir dann nicht nur vielversprechende Materialien in entweder klassischem in-silico screening oder mittels maschinengelernter Modelle identifizieren, sondern generieren auch enorme Datenmengen für die weitergehende Analyse des Designraums. In der Tat versuchen wir in unserer Arbeit generelle Designkriterien abzuleiten aus einer Kombination fortgeschrittener Visualisierungstechninken und mathematisch solider statistischer Tests. Visualisierungen erlauben uns dabei Zusammenhänge zwischen chemisch ähnlichen Materialien zu erkennen und so Bereiche des Designraums zu finden, die bislang nicht ausreichend systematisch verbessert wurden, wie z.B. durch Synthese modifizierter Moleküle und Kristalle. Unsere rigoros getesteten Designregeln, wie z.B. bestimmte Kombinationen von molekularen Bausteinen, können in dieser Hinsicht einen Weg zur vollständigen Erforschung des Designraums darstellen.



Schematische Darstellung der Polaronmigration.

Hochtemperaturstabile polymere elektrogesponnene Separatoren

Die AG von Prof. Seema Agarwal am Lehrstuhl Makromolekulare Chemie II verfügt über Expertise in der Polymersynthese, der Herstellung und Strukturierung von Kompositen sowie Prozessierungsmethoden. Innerhalb des BayBatt werden Batterieseparatoren auf Basis elektrogesponnener Hochtemperaturpolymere entwickelt, um thermische und mechanische Stabilität sowie gute Benetzbarkeit zu erreichen. Die ionische Leitfähigkeit des Separators wird durch Verwendung von lithiumionenleitenden additivierten Polymeren erreicht. Chemisch modifizierte hochtemperaturstabile polymere elektrogesponnene Separatoren als Quasi-Feststoffpolyelektrolyte bei Raumtemperatur werden auch untersucht.



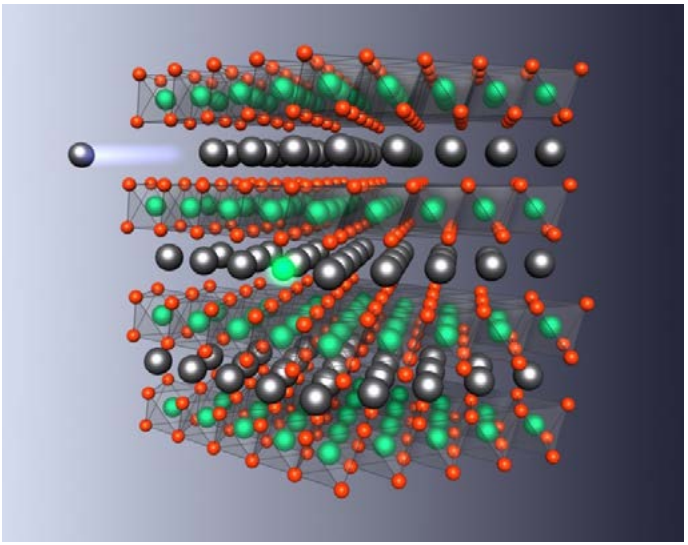
Batteriematerialien

Dringend erforderliche technologische Entwicklungen bei Energiespeichern sind geringes Gewicht, Sicherheit und Effizienz. Wir nutzen rational gestaltete Nanomaterialien, um über den Horizont der bekannter LIBs hinauszugehen und erforschen damit die nächste Generation von Batterien. Eines unserer Ziele ist die Herstellung der nächsten Generation von ultraleichten, starken und sicheren Separatoren mit hervorragender Benetzbarkeit, Lithium-Ionen-Leitfähigkeit bei Raumtemperatur und ohne Lithiumdendritenbildung. Die Separatoren basieren auf hochtemperaturstabilen, speziell entwickelten Polymeren mit oder ohne anorganische Zusätze. Das Elektrospinnen wird als Verarbeitungsmethode zur Herstellung defektfreier großflächiger und extrem dünner Separatoren (< 10 µm) eingesetzt. Der Einsatz skalierbarer synthetischer Verfahren und Verarbeitungsmethoden macht den Technologietransfer im industriellen Maßstab sehr vielversprechend. Diese passiven Separatoren werden in Zukunft in modularer Form für den Übergang zu starken, ultradünnen, flexiblen Quasi- Festkörperelektrolyten durch chemische Modifikationen verwendet werden, die die schlechte Grenzflächenstabilität, die Bildung von Lithiumdendriten, die schlechte elektrochemische Leistung und die Brandgefahr beseitigen. Dadurch lassen sich Materialien erzeugen, die nicht nur erhöhte Leitfähigkeiten, sondern auch bessere Stabilitäten aufweisen.

Schematische Darstellung eines elektrogesponnenen Separators/ Festelektrolyts, als wichtigem Teil einer Batteriezelle.

Na-ion Batterieentwicklung und 4SBATT

Der Schwerpunkt des Lehrstuhls für Anorganische Aktivmaterialien für elektrochemische Energiespeicher liegt in der Verbesserung der aktuellen Generation von Li-Ionen-Batterien sowie in der Entwicklung von Technologien der nächsten Generation wie Na-Ionen- oder Festkörperbatterien durch Design, Synthese und Charakterisierung neuartiger Elektrodenmaterialien. Elektrodenmaterialien sind das „Herz" von Energiespeichern und bestimmen deren Leistungsfähigkeit. Verbesserte Kathoden- und Anodenmaterialien sind der Schlüssel zu leistungsfähigeren und langlebigeren Batterien.



Schichtstruktur eines typischen Elektrodenmaterials für Li-Ionen- oder Na-Ionen-Batterien

Na-Ionen-Batterieentwicklung

Na-Ionen-Batterien sind potenzielle Alternativen zu Li-Ionen-Batterien (LIBs). Sie basieren auf reichlich vorhandenen Elementen (Na, Fe, Mn, ...) und können billiger sein als ihre Li-Ionen-Pendants. Obwohl ihre Energiedichte nicht mit der von NCM-basierten Li-Ionen-Systemen mithalten kann, können sie ähnliche Leistungen wie $LiFePO_4$ (LFP)-basierte Systeme erreichen. Dies macht sie zu interessanten Alternativen zu LIBs für kostengünstigere Anwendungen. Gegenwärtig sind Verbesserungen sowohl an der positiven, als auch an der negativen Elektrode erforderlich. Auf der positiven Seite suchen wir nach neuen Kathodenmaterialien mit verbesserter Energiedichte; die in Frage kommenden Materialien gehören sowohl zur Klasse der geschichteten, als auch der polyanionischen Verbindungen. An der Anode werden amorphe Kohlenstoffe verwendet, da Graphit kein Na einlagern kann. Gesucht werden Kohlenstoffe mit hoher Kapazität und hohem Wirkungsgrad sowie Verbundwerkstoffe mit Legierungselementen.

4SBATT Projekt (ERC Starting Grant)

Die Li-Ionen-Batterie, die in den letzten 30 Jahren entwickelt wurde, ist eine sehr erfolgreiche Technologie. Allerdings steht sie nun vor der Herausforderung, die Revolution der Elektromobilität voranzutreiben, was eine erhebliche Steigerung der Verfügbarkeit von Rohstoffen erfordert. In

Anbetracht des europäischen Green Deals und der Notwendigkeit, die CO_2-Emissionen zu reduzieren, sollte eine solche Ausweitung als einmalige Gelegenheit gesehen werden, nicht nachhaltige Elemente aus den Batterien zu entfernen. Die Li-Ionen-Batterie ist jedoch auf eine Reihe kritischer Elemente angewiesen, vor allem auf Lithium, Cobalt und natürlichen Graphit. Darüber hinaus wird die Sicherheit von Li-Ionen-Batterien häufig in Frage gestellt und ihr Energiegehalt muss noch erhöht werden, um die Nachfrage nach größeren Reichweiten zu befriedigen. In diesem Zusammenhang zielt 4SBATT darauf ab, eine Festkörperbatterie auf der Basis von Na anstelle von Li zu entwickeln, die die beste Lösung in Bezug auf vier Schlüsselparameter darstellt: Nachhaltigkeit, Energiedichte (spezifisch und volumetrisch), Bereitschaft zur Übernahme (d.h. Kompatibilität mit bestehenden Li-Ionen-Produktionslinien) und Sicherheit. Um ein solch anspruchsvolles Ziel zu erreichen, wird 4SBATT an der Schnittstelle zwischen anorganischer Chemie, Materialwissenschaft und Technik arbeiten. Mein Team und ich werden einen kombinierten rechnerischen und experimentellen Ansatz auf der Grundlage der Dichtefunktionaltheorie und der Röntgenbeugung in-situ während der Synthese entwickeln, der es uns ermöglichen wird, große Mengen an temperaturabhängigen Multikomponenten-Phasendiagrammen für verschiedene Materialklassen zu untersuchen. Auf diese Weise werden wir neuartige anorganische Verbindungen auf Na-Basis für positive Elektroden, Festelektrolyte und negative Elektroden entwickeln und herstellen. Anschließend werden wir die physikalischen Eigenschaften der Materialien und der Verbundelektroden charakterisieren, um ihre Leistungen zu verstehen, zu verbessern und zu entwickeln. Schließlich werden wir Festkörperbatterien auf der Grundlage von Na und nachhaltigen Elementen wie Fe, Mn und Si zusammenstellen, die aufgrund des nicht entflammbaren Festelektrolyten inhärent sicher sind und auf Zellebene Energiedichten von 300 Wh/kg und 750 Wh/l erreichen sollen.

Glovebox-Anlagen der Bianchini Gruppe zur Assemblierung von Li-Ionen und Na-Ionen Batterien.

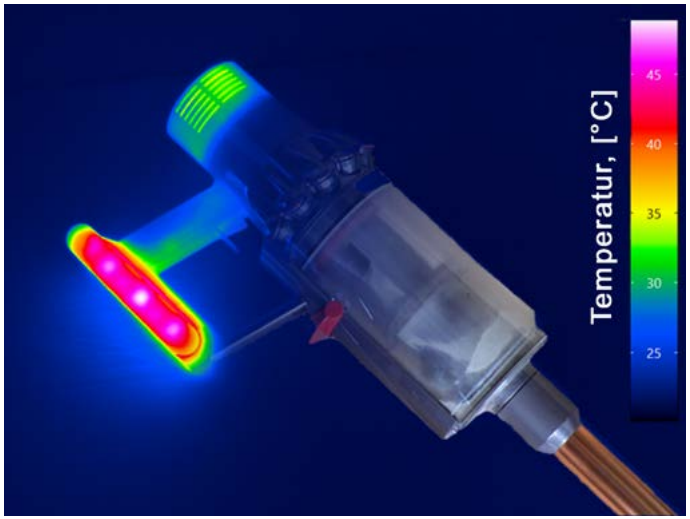
Entwicklung neuer Aktivmaterialien

Der Lehrstuhl für Physikalische Chemie III kombiniert anorganische Synthesemethoden mit gründlicher physikochemischer Charakterisierung. Im Rahmen des BayBatt werden neue Aktivmaterialien entwickelt und im Hinblick auf optimales Benetzungsverhalten strukturiert. Darüber hinaus werden detaillierte elektrochemische und spektroskopische Untersuchungen an Materialentwicklungen von Kooperationspartnern durchgeführt.

Die Arbeitsgruppe Marschall untersucht die Nanostrukturierung bekannter und die Synthese neuer Aktivmaterialien für Anoden und Kathoden in Li-Ionen und Na-Ionen-Batterien. Die AG Marschall hat eine breite Expertise in der Synthese komplexer Übergangsmetalloxid-Materialien für verschiedene katalytische und elektrochemische Anwendungen. Dies beinhaltet ternäre und quaternäre Feststoffe mit schichtförmigen (z.B. Schichtperowskite), tunnelartigen (z.B. Defekt-Pyrochlore) und spinellförmigen Kristallstrukturen. Zum Portfolio der Synthesemethoden gehören Sol-Gel-Synthese, Festkörpersynthesen, Ammonolyse, Hydrothermalsynthese, Schmelzsynthesen und mikrowellenunterstützte Synthesen. Die großen Stärken und breiten Anwendungsmöglichkeiten der Sol-Gel-Chemie werden in der AG Marschall umfassend genutzt, zum Beispiel für templatunterstützte Synthesen zu mesoporösen Materialien in Form von Pulvern und Beschichtungen, für kontrollierte Nanopartikelsynthesen, aber auch zum Elektrospinnen faserförmiger Oxide. Hinzu kommen eine Vielzahl an auf Materialanalytik zugeschnittene Charakterisierungsmethoden, inklusive Physisorption, Absorptionsspektroskopie in diffuser Reflektion, und DRIFTSpektroskopie. Mit diesen Kompetenzen im Bereich der Materialsynthese, -strukturierung und -analytik ist die AG Marschall in verschiedene Projekte und Themen des BayBatt eingegliedert. Mischoxide des Eisens haben zum Beispiel in den letzten Jahren großes Interesse für Elektroden in Lithium- und Natrium-Ionen Batterien geweckt, insbesondere im Bereich der Konversionselektroden. Die AG Marschall ist in der Lage, größenkontrollierte Nanopartikel ternärer Eisenoxide (AFe_2O_4, A= Zn, Mg, Mn, Fe, Co, Ni) herzustellen, um damit zum Beispiel eine bessere Verteilung in der aktiven Anode zu erhalten. Unsere mikrowellenunterstützte Synthese eignet sich dafür besonders gut, da die Temperatur der Sol-Gel-Chemie in einer Labormikrowelle sehr effizient und schnell erreicht werden kann. In einigen Fällen benötigen darin hergestellte Metalloxide nicht mal einen anschließenden Temperaturschritt, können also zeitsparend und schnell hergestellt werden. Zusätzlich konnte ein makroporöses $CaFe_2O_4$ kürzlich zusammen mit der AG Weber und der AG Breu berichtet werden. Molybdän-Eisenoxide für elektro- und photokatalytische Anwendungen werden aktuell in der AG Marschall untersucht. Das sind hochinteressante Materialien für Batterieanwendungen, die als Kathodenmaterialien für Li, Na und Mg-Batterien eingesetzt werden können. Bis zu 2 mol Li+ oder Na+ können in einige Eisenmolybdat-Strukturen eingebaut werden, während die Zellspannung während des Einlagerungsprozesses nahezu konstant bleibt. So kann eine Nanostrukturierung in Form von Nanofasern oder (porösen) Nanopartikeln die schlechte berichtete Leitfähigkeit verbessern und die langen Na-Diffusionswege verkürzen.

Analytik des Wärmetransports

Der Lehrstuhl für Physikalische Chemie I ist ausgewiesen in der Modellierung von Wärmetransport und dessen Analytik, unter anderem via Laser-Flash-Analyse, Lock-In-Thermographie und photo-akustischen Methoden. Schwerpunkte sind der Wärmetransport in kolloidalen Materialien sowie dünnen Filmen. Innerhalb des BayBatt werden auf Basis dieser Tätigkeiten Operando-Analysen und echtzeitfähige Methoden entwickelt, die der Beschreibung des internen aktuellen und zukünftigen Zellzustands dienen und damit eine sensorgestützte, modellbasierte Selbsteinschätzung des Batteriesystems erlauben.



Temperaturentwicklung eines typischen batteriebetriebenen Haushaltsgeräts während des Betriebs.

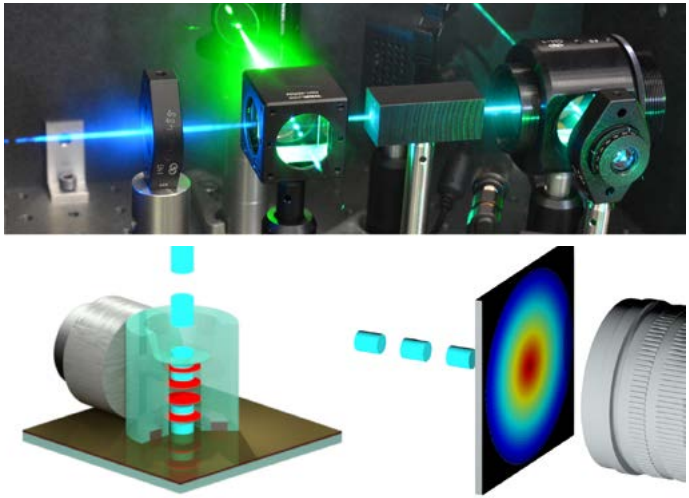
Wärmemanagement der nächsten Generation

Der Wärmetransport in nano- und mesostrukturierten Materialien spielt bei vielen technologischen Anwendungen eine wichtige Rolle. Effiziente Isolierung sowie effiziente Wärmeableitung stehen im Mittelpunkt vieler aktueller Forschungsanstrengungen. Im Rahmen einer Lichtenberg-Professur der Volkswagen Stiftung haben wir viele grundlegende Wärmetransportphänomene in kolloidalen Materialien untersucht. Gleichzeitig haben wir eine Vielzahl fortschrittlicher Charakterisierungsmethoden etabliert, mit denen dünne Materialien und mesostrukturierte Filme untersucht werden können. Aufbauend auf diesen Arbeiten untersuchen wir nun anisotrope Transportphänomene sowie schaltbare und stimuliresponsive Systeme.

Die Vision, den Wärmefluss, d.h. den Transport von Phononen, zu kontrollieren, wird in Analogie zur Elektronik als „Phononik“ bezeichnet und wird für zukünftige Technologien von großer Bedeutung sein, so wie es die Elektronik in den letzten 50 Jahren war. Gerade die Rolle von Grenzflächen, der mikroskopischen Materialzusammensetzung und ihrer Nanostrukturierung ist maßgeblich für den effektiven Wärmetransport verantwortlich. Daher dienen kolloidale Kristalle als Modellsystem, wegen ihrer wohldefinierten Struktur zusammen mit einer großen Variabilität der Längenskalen und der Materialzusammensetzung.

Wir untersuchten kolloidale Polystyrol-Kristalle, die eine geringe Wärmeleitfähigkeit von ~ 51 $mWm^{-1}K^{-1}$ bei einer vergleichsweise hohen Dichte (740 kgm^{-3}) aufweisen. Die offene, poröse Struktur (< 200 nm) macht solche Teilchenanordnungen ziemlich unempfindlich gegenüber der umgebenden Atmosphäre. Gleichzeitig hat die Filmbildung einen extrem großen Effekt auf den effektiven Wärmetransport, der bei Überschreiten der Glasübergangstemperatur sprunghaft ansteigt. Der spezifische Aufbau kolloidaler Mesostrukturen ist zudem geeignet, spezifische programmierte Sprünge in der Wärmeleitfähigkeit zu realisieren.

Mit hohlen Silika-Nanopartikeln untersuchten wir eine weitere hochporöse und hochisolierende Materialklasse. In Analogie zu Aerogelen ist es hier möglich extrem effiziente thermische Isolatoren herzustellen. Die gute Strukturkontrolle in hohlen Silikananopartikeln ermöglichte außerdem die Ausarbeitung klarer Struktur-Eigenschafts-Beziehungen, die die Bedeutung der Adhäsion zwischen benachbarten Partikeln unterstreicht. Wir dehnen diese Untersuchungen nun auf eine Vielzahl anderer, gut definierter kolloidaler Systeme aus, die von eindimensionalen bis zu dreidimensionalen Systemen reichen. Auf kleinsten Längenskalen arbeiten wir mit exfolierten Schichtsilikaten, Einzelfasern und Faserbündeln bis hin zu 3D-gedruckten Formkörpern. Wir verwenden einen großen Teil unserer Arbeit auf die Entwicklung, Anpassung und Optimierung spezifischer Messmethoden. Gegenwärtig sind dies die Laserblitzanalyse (LFA), eine transiente Wärmeflussmessung, die Thermoreflexion im akustischen Frequenzbereich, die Lock-in-Thermografie (LIT) und die photoakustische Charakterisierung (PA). So sind wir nun in der Lage für einen sehr großen Material- und Probengeometriebereich thermische Transporteigenschaften zu bestimmen. Highlights sind unter anderem anisotrope Messungen (auch innerhalb einer Probenebene), die Variation von Temperatur und Druck, sowie die Messung unter externer Stimulation, z.B. durch Licht. Die experimentellen Techniken werden durch die Modellierung unserer Hybridstrukturen, insbesondere durch FEM-Simulationen basierend auf COMSOL®, unterstützt.



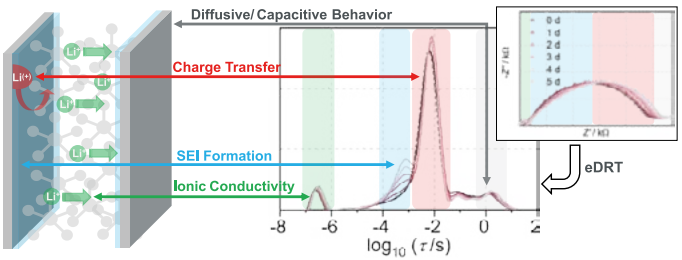
Sammlung von Methoden zur Charakterisierung des Wärmetransports, einschließlich Thermoreflexion im Frequenzbereich, photoakustischer Charakterisierung und Lock-In-Thermografie

Design und kontrollierte Synthese neuartiger Polymerelektrolyte

Die Thelakkat AG konzentriert sich auf das Design und die kontrollierte Synthese neuartiger Polymerelektrolyte, die die gegenwärtigen Elektrolytsysteme auf Basis organischer Flüssigkeiten auf dem Weg zu Lithium-Metall-Batterien in festem Zustand (ASSLMBs) ersetzen können. Die Herausforderung besteht darin, in solchen ASSLMBs gleichzeitig eine hohe ionische Leitfähigkeit, eine hohe mechanische Stabilität und eine gut definierte SEI-Bildung zu erhalten. Einige der Designkonzepte und untersuchten Systeme sind unten aufgeführt.

Wärmemanagement der nächsten Generation

Es wurden sowohl PEO- als auch „Beyond PEO"-Systeme entwickelt und umfassend auf ihre elektrochemischen Eigenschaften und Batteriezykluseigenschaften getestet. Das erste Ziel bestand darin, die hohe Kristallinität in PEO-Systemen zu unterdrücken, was durch die Bürstenarchitektur erreicht wurde, bei der verschiedene Grundgerüste wie Polymethacrylat oder Polynorbornen mit unterschiedlichen PEO-Seitenkettenlängen dekoriert wurden (ACS Appl. Energy Mater. 2019, 2, 3373-3388). Bei dieser Architektur wurden vollständig amorphe Polymere erhalten. Da diese neuartigen Polymere nur dann hohe Ionenleitfähigkeiten liefern, wenn ihre T_g sehr niedrig ist, müssen sie durch Zugabe von Füllstoffen wie TiO_2 mechanisch verstärkt werden. Dies führte zu Polymer-Nanokomposit-Elektrolyten, die sehr gute Leistungen erbringen, sowohl in Bezug auf eine niedrige Grenzflächenimpedanz, als auch auf eine lange Lebensdauer mit einer beträchtlich hohen spezifischen Kapazitätserhaltung bei Raumtemperatur (Electrochimica Acta 2021, 387, 138455).



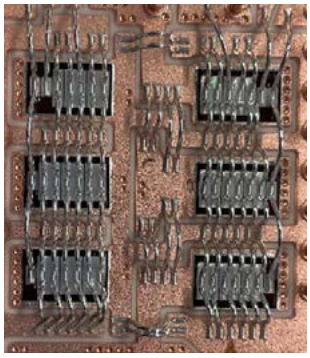
Untersuchung der Prozesse in der Batterie mittels DRT

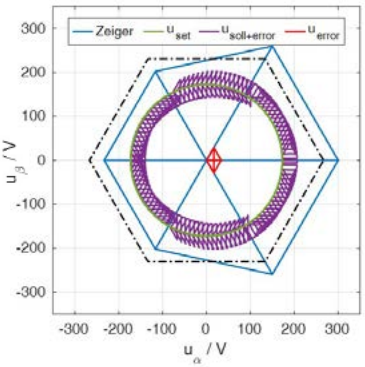
In einem anderen Konzept wurde eine Reihe von Polyestern mit Diesterseitenketten synthetisiert und als „beyond PEO"-Polyelektrolyte getestet. Diese neue Klasse von Polyestern funktioniert sehr gut in ASSLMBs in Kombination mit Füllstoffen und LFP als Kathode (J. Mater. Chem. A 2022, 10, 8932-8947). In einer gemeinsamen Arbeit zwischen drei Arbeitsgruppen im Rahmen von BayBatt wurden die elektrochemischen Eigenschaften von fünf verschiedenen SPEs auf der Grundlage von drei verschiedenen Polymerarchitekturen (lineares PEO, auf Methacrylat basierende Bottlebrushes und auf Poly(glycidylpropargylether) (PGPE) basierende Pfropfcopolymere) und einem keramischen Elektrolyten (LLZO) verglichen (Electrochimica Acta 2020, 344, 136060). Es wurde eine eingehende Analyse der SEI-Bildung und des Einflusses verschiedener Lithiumsalze durchgeführt. Als Referenz-SPE wurde PEO+LiTFSI elektrochemisch mittels EIS analysiert (siehe Abbildung unten). Die Messdaten wurden erfolgreich interpretiert und signifikante Unterschiede zwischen den Materialien wurden durch eDRT aufgedeckt.

Elektrische Energiewandlung mit Leistungselektronik

Das Forschungsgebiet des Lehrstuhls für Mechatronik ist die elektrische Energiewandlung mit Leistungselektronik, wobei die Untersuchungen vom Halbleiter bis zum System reichen. Damit stellt das Forschungsgebiet das Bindeglied zwischen Batterie und Verbraucher bzw. Erzeuger dar.

Die Forschung des Lehrstuhls konzentriert sich auf energie- und antriebstechnische Anwendungen der Mechatronik, wobei die Leistungselektronik die verbindende Rolle einnimmt. Hier trifft die Steuerung und Regelung auf die Aktorik und Sensorik, welche in der Antriebstechnik dann die Verbindung zur Mechanik findet. Die Entwicklung von neuen Schaltungstechniken, die Nutzung neuartiger Bauelemente und die systemtechnische Optimierung sind Schwerpunkte der Arbeit:





Links: Moderne Leustungshalbleiter auf einem DCB-Substrat,
Rechts: Raumverktormodulation unter asymmetrischen Bedingungen.

- Elektrische Energiewandlung mit erhöhter Leistungsdichte
- Neuartige Bauelemente für die Leistungselektronik
- Integration von Energiespeichern
- Energiewandlung im Hochleistungsbereich
- Zuverlässigkeit und Lebensdauer von elektrischen Energiewandlern
- Optimierung von Antriebssystemen besonders für Traktionsanwendungen
- Messtechnik an schnellen Leistungshalbleitern

Dieses breite Themengebiet findet in der Leistungselektronik die gemeinsame Klammer.

Die Forschungsthemen sind damit anwendungsnah und behandeln gleichzeitig Schlüsseltechnologien der folgenden Zukunftsthemen:

- Elektromobilität: Elektrische Antriebe für Fahrzeuge vom Kfz über Bahn bis zum Flugzeug
- Integration regenerativer Energiequellen in das Netz: HVDC-Übertragung, Kopplung von DC-Netzen
- Erhöhung der Energieeffizienz: Integration von Energiespeichern in Antriebssysteme, Leistungselektronik mit erhöhtem Wirkungsgrad
- Erhöhung der Betriebssicherheit und Verfügbarkeit von Schaltungen der elektrischen Energiewandlung

Elektrodendesign

Der Lehrstuhl für Elektrodendesign für elektrochemische Energiespeicher konzentriert sich auf Materialentwicklung, Zellexpansion und Diagnostik mit Schwerpunkt auf Festkörper- und Quasi-Festkörpertechnologien. Zu den zentralen Forschungsbereichen gehört die Entwicklung innovativer Materialien und Geräte unter Verwendung von First-Principle- und Kontinuumsmodellen.

Batterien

Seit fast einem Jahrzehnt erforscht das Team von Prof. Ciucci Festkörper- und Quasi-Festkörperbatterien und entwickelt neue Elektrolyte unter Verwendung von Keramiken, Keramik-Polymer-Verbundwerkstoffen und Polymeren. Die beiden letztgenannten Elektrolytarten sind für praktische Anwendungen am vielversprechendsten. Da kommerzielle LIBs steigenden Anforderungen an die Energiedichte und die Aufrechterhaltung der Energiedichte bei Temperaturen unter dem Gefrierpunkt ausgesetzt sind, entwickelte die Gruppe neue Quasi-Festkörper-Polymerelektrolyte, die in Verbindung mit Hochkapazitäts- und Hochspannungselektroden bei Raumtemperatur und unter dem Gefrierpunkt außergewöhnliche Leistungen erbringen. Die Gruppe entwickelte auch neue Herstellungsmethoden für ultradünne Elektrolyte und die In-situ-Polymerisation von Polymerelektrolyten. Die aktuelle Forschung umfasst die Entwicklung von in-situ-polymerisierten Materialien für die Schnellladung. Das Team hat auch Batterieelektroden auf Na-Basis erforscht, insbesondere Sulfidmaterialien des Konversionstyps wie Sb_2S_3 und MoS_2, und dabei die Mechanismen der Na-Insertion untersucht. Durch die Kombination dieser Elektroden mit Kohlenstoffmaterialien und sodiophilen Verbindungen haben die Forscherinnen und Forscher ihre Zyklenstabilität verbessert. Für neu entstehende, kostengünstige, wiederaufladbare Zn-Metall-Batterien optimierten sie tief eutektische Elektrolyte.

Reversible protonische keramische Zellen für Energiespeicher und Power-to-X-Anwendungen

Weltweit sind die Regierungen bestrebt, die Kohlenstoffemissionen bei der Stromerzeugung zu reduzieren. Um die Abhängigkeit von fossilen Brennstoffen zu verringern, wird vorgeschlagen, erneuerbare Energiequellen mit Lithium-Ionen-Batteriespeichern im Netz zu integrieren. Lithiumbatterien und Brennstoffzellen sind für die Weiterentwicklung von Energiespeicherlösungen von entscheidender Bedeutung. Lithiumbatterien sind hocheffizient und vielseitig. Reversible Brennstoffzellen ergänzen diese Vorteile für die Energiespeicherung in großem Maßstab, beispielsweise für die saisonale Speicherung. Herkömmliche reversible Brennstoffzellen,

die sauerstoffleitende Elektrolyte verwenden, arbeiten bei hohen Temperaturen (800-1.000°C), was die Kosten erhöht und die Zuverlässigkeit verringert. Protonenleitende keramische Elektrolyte, die bei niedrigeren Temperaturen (400-600 °C) funktionieren, bieten einen besseren Wirkungsgrad, eine längere Lebensdauer sowie eine geringere Komplexität und geringere Kosten, was sie zu einer vielversprechenden Alternative in der Energielandschaft macht.

Obwohl reversible keramische Protonenzellen ein beträchtliches Potenzial haben, steht die Entwicklung vor großen Herausforderungen, vor allem bei der Verbesserung der Leistungsdichte und des Wirkungsgrads der Zellen. Die erfolgreiche Einführung protonenbasierter keramischer Brennstoffzellen erfordert die Entwicklung eines leistungsstarken und kostengünstigen Kathodenkatalysators. So führte ein rationales, von theoretischen Erkenntnissen geleitetes Design zur Entwicklung des Materials $Ba_{0.875}Fe_{0.875}Zr_{0.125}O_{3-\delta}$, dass eine außergewöhnliche Sauerstoffreduktionsleistung und Oberflächenstabilität aufweist und Rekordleistungsdichten erreicht.

Modellierung von Impedanzdaten

Die elektrochemische Spektroskopie hat sich zu einem wertvollen Instrument für die Untersuchung von Energiespeichersystemen entwickelt. Dennoch kann ihr Nutzen begrenzt sein, insbesondere wenn mehrere Experimente durchgeführt werden. Zu diesem Zweck hat unser Team bedeutende Fortschritte bei der Schätzung von Relaxationszeitverteilungen aus elektrochemischen Impedanzspektren gemacht, indem es fortschrittliche statistische Verfahren wie Bayessche Statistik, Deep Learning, Gaußsche Prozesse und neuronale Netze nutzte. Durch den Einsatz dieser Methoden haben wir hochentwickelte Berechnungswerkzeuge entwickelt, die in der Lage sind, mehrere Experimente gleichzeitig zu verarbeiten und umfassende Einblicke in das untersuchte elektrochemische System zu geben. Infolgedessen hat unsere Software in der wissenschaftlichen Gemeinschaft breite Akzeptanz als leistungsfähiges Werkzeug für die Analyse von Impedanzspektren gefunden.

Analyse und Modellierung von Lithium-Ionen-Batterien

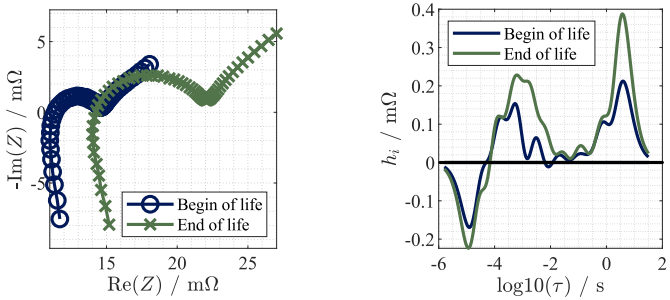
Das Forschungsgebiet des Lehrstuhls Elektrische Energiesysteme ist die systemtechnische Analyse von elektrischen und elektrochemischen Energiespeichern und -wandlern. Fokus der Forschungsaktivitäten ist die Diagnose, die Modellierung und das Management von Lithium-Ionen-Batterien.

Die Arbeit der Gruppe umfasst sowohl experimentelle Studien als auch modellbasierte Untersuchungen. Es werden Analysen der Leistung und der Alterung elektrochemischer Systeme durchgeführt, wobei der Schwerpunkt auf elektrochemischen, elektrothermischen und elektromechanischen Effekten liegt. Es wird ein breites Spektrum von Batteriegrößen abgedeckt, das von der Elektrodenebene bis zu Zellen, Modulen und Batteriesystemen reicht.

Dabei werden verschiedene Methoden zur detaillierten Charakterisierung von elektrochemischen Systemen angewandt, aber auch weiterentwickelt und verbessert. Ziel ist es, eine umfassende Analyse von Batterien zu ermöglichen. Dabei werden zerstörungsfreie Methoden bevorzugt, die für zahlreiche industrielle und kommerzielle Anwendungen von großem Wert sind. Wie unten dargestellt, ist die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) ein leistungsfähiges Werkzeug für diesen Zweck, einschließlich der Analyse der Verteilung der Zeitkonstanten (DRT). Der Lehrstuhl zeichnet sich durch umfangreiche Fachkenntnisse auf diesen Gebieten aus.

Bei den theoretischen Überlegungen ist die Modellierung des Kurzzeit- und Langzeitverhaltens, der Leistung und der Alterung von Batterien ein weiteres großes Thema. Darüber hinaus wird an modellbasierten Methoden der Zustandsschätzung und Leistungs-, Energie- und Lebensdauerprognosen sowie an modellbasierten Algorithmen für Batterie- und Energiemanagementsysteme gearbeitet.

Ein aktuelles Forschungsthema ist die Entwicklung neuer Algorithmen und Ansätze, die helfen können, den Zustand eines gealterten Batteriemoduls im Hinblick auf seine Eignung für die Wiederaufbereitung oder Refabrikation im Rahmen von Kreislaufwirtschaftsentscheidungen zu bestimmen. Weitere Forschungsprojekte reichen von der Untersuchung und Charakterisierung neuer Batteriematerialien und Speicherkonzepte bis hin zur Optimierung von Betriebsstrategien von Batteriespeichersystemen (BESS). Aktuelle Projekte widmen sich z.B. siliziumbasierten Aktivmaterialien, Festkörperbatterien und dem Betrieb von BESS im industriellen Kontext.



Zerstörungsfreie Alterungsanalyse einer Batterie auf Grundlage der elektrochemischen Impedanzspektroskopie (links) und der Analyse der Verteilung der Zeitkonstanten (rechts).

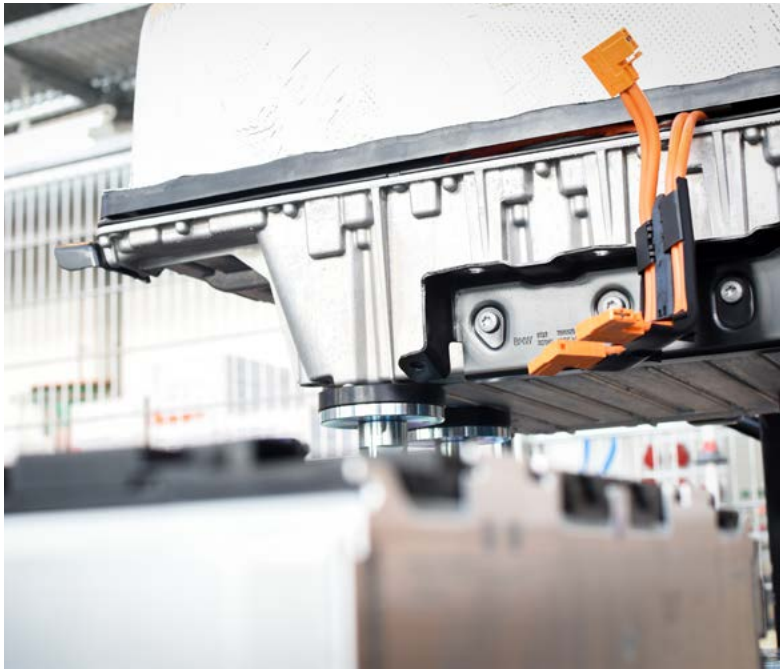
Zukunfts- und Nachhaltigkeitstechnologien

Der Lehrstuhl Umweltgerechte Produktionstechnik arbeitet in enger Verzahnung mit der mittelständischen Wirtschaft in den Forschungsfeldern der Zukunfts- und Nachhaltigkeitstechnologien Additive Fertigung/3D-Druck, Künstliche Intelligenz, Digitalisierung der Produktion, Zerspanung sowie Refabrikation. Im BayBatt werden Grundlagen der Refabrikation von Batteriespeichern fokussiert.

Refabrikation

Die Refabrikation (engl. Remanufacturing) ist ein zentrales Element der Kreislaufwirtschaft und schließt Produktkreisläufe unter Wahrung bzw. Wiederherstellung der Produktgestalt und der zugehörigen Produkteigenschaften ein, wodurch eine Wiederverwendung ermöglicht wird. Dazu werden gebrauchte Produkte (Altteile, engl. Cores) zunächst demontiert, die Bauteile gereinigt und sortiert, anschließend aufgearbeitet und zu neuwertigen Produkten remontiert. Im Gegensatz zur Reparatur stellt die Refabrikation einen industriellen Prozess dar, bei der das aufgearbeitete Produkt auf mindestens das Qualitätsniveau eines Neuprodukts gebracht und ein neuer Produktlebenszyklus ermöglicht wird. Die Refabrikation umfasst sowohl ökologische, ökonomische, als auch soziale Vorteile. Zum einen können Materialverbrauch sowie Umweltwirkung deutlich reduziert werden, bei Anlassern bspw. um 88 % bzw. 37 %. Zum anderen können Kosten gesenkt werden, weshalb die Preise für aufgearbeitete Produkte in der Regel zwischen ca. 40 % bis 80 % unter denen äquivalenter Neuprodukte liegen.

Für die Umsetzung der Refabrikation in der industriellen Praxis gilt es den kompletten Lebenszyklus eines Produkts zu betrachten, wofür am Lehrstuhl Umweltgerechte Produktionstechnik innovative Lösungen erforscht und entwickelt werden. Hierfür arbeiten die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des LUP eng und interdisziplinär mit Kooperationspartnern aus der Wissenschaft und Industrie zusammen.



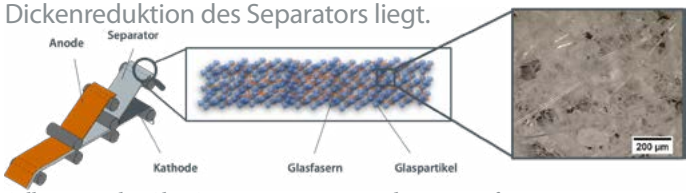
Keylab Glastechnologie | Prof. Dr.-Ing. Thorsten Gerdes

Glasschmelz- und Verarbeitungstechnologie für Funktionsgläser

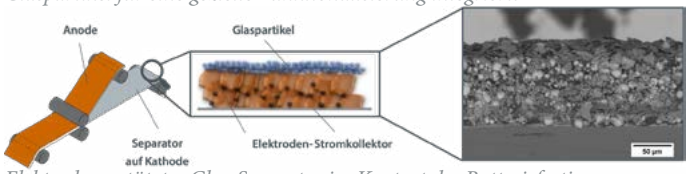
Das Keylab Glastechnologie verbindet grundlegende Forschung mit anwendungsorientierter Entwicklung. Ein Schwerpunkt ist die Schmelz- und Verarbeitungstechnologie für Funktionsgläser, die neue Anwendungen in Batterien ermöglicht. Forschungsaktivitäten im BayBatt sind glasbasierte Separatoren, die in Extremsituationen die Sicherheit von Batterien erhöhen und die Zellalterung durch die chemische Zusammensetzung der Gläser verlangsamen. Die Separatoren werden für unterschiedliche Anwendungen gemeinsam mit Industriepartnern unter anwendungsnahen Bedingungen in Lithium-Ionen Batterien geprüft.

Lithium-Ionen Batterien (LIB) gelten als eine der wichtigsten Energiespeichertechnologien. Anderen Sekundärbatterien sind sie durch eine höhere spezifische Energie(-dichte) überlegen, sodass ein weites Anwendungsspektrum in mobilen elektrischen Geräten über Notebooks und batteriebetriebene Handwerkzeuge, bis in den Automobilbereich, als Energiespeicher für Elektrofahrzeuge, besteht. Bei Überhitzung in Folge von Überladung oder eines mechanischen Defekts der LIB besteht jedoch ein Sicherheitsrisiko aufgrund des thermisch instabilen Elektrolyten. Kontakt mit Luftsauerstoff oder -feuchtigkeit führt zur Oxidation des Elektrolyten und damit zur Wärmeentwicklung, wodurch eine Kettenreaktion, das sogenannte thermische Durchgehen, gestartet wird. Der Batterie-Separator als passives, sicherheitsrelevantes Bauteil in LIBs gewährleistet die räumliche Trennung von Anode und Kathode und verhindert so interne Kurzschlüsse. Als temperaturstabile Alternative zu bisher eingesetzten Polymerseparatoren soll Glas als Separator-Werkstoff eingesetzt werden. Hohe thermische und chemische Beständigkeit sowie gute Benetzbarkeit mit dem Batterieelektrolyten prädestinieren Glas für diese Anwendung.

Im Keylab Glastechnologie werden Separatoren auf Basis von Glasfasern und Glaspartikeln über kolloidale Verfahren hergestellt und charakterisiert. In umfangreichen elektrochemischen Testzyklen konnte die Leistungsfähigkeit und Stabilität der Glas-Separatoren in den Testzellen unter Beweis gestellt werden. Die höhere Dichte von Glas vermindert allerdings die gravimetrische Energiedichte der Batteriezelle, sodass der Fokus der laufenden Forschung auf der Dickenreduktion des Separators liegt.



Selbsttragender Glas-Separator im Kontext der Batteriefertigung
Bei diesem Konzept wird die mechanische Stabilität des Separators durch eine Trägerstruktur aus Glasfasern gewährleistet. In diese Struktur werden Glaspartikel für eine gezielte Funktionalisierung integriert.



Elektrodengestützter Glas-Separator im Kontext der Batteriefertigung
Bei diesem Konzept ist der Separator nicht selbsttragend, sondern wird direkt auf eine Elektrode aufgebracht, wodurch die Stabilität des partikulären Aufbaus auch bei Dicken kleiner 20 µm gewährleistet werden kann.

Materialkreisläufe von Metallen und mineralischen Rohstoffen

Der Lehrstuhl für Ökologische Ressourcentechnologie beschäftigt sich mit der Modellierung, Simulation und Bewertung globaler Materialkreisläufe von Metallen und mineralischen Rohstoffen. Der methodische Fokus liegt dabei auf Materialflussanalysen, Ökobilanzierungen und Rohstoffkritikalitätsbewertungen. Für das BayBatt besonders relevant sind Fragestellungen zur Rohstoffverfügbarkeit von Kathoden- und Anodenmaterialien sowie die zukünftige Entwicklung der Recyclingpotentiale.

Betrachtet werden Prozesse vom Bergbau über die Fertigungs- und Nutzungsphase bis hin zum Recycling, wobei ökologische, ökonomische und soziale Aspekte berücksichtigt werden. Relevante Forschungsgegenstände sind unter anderem:

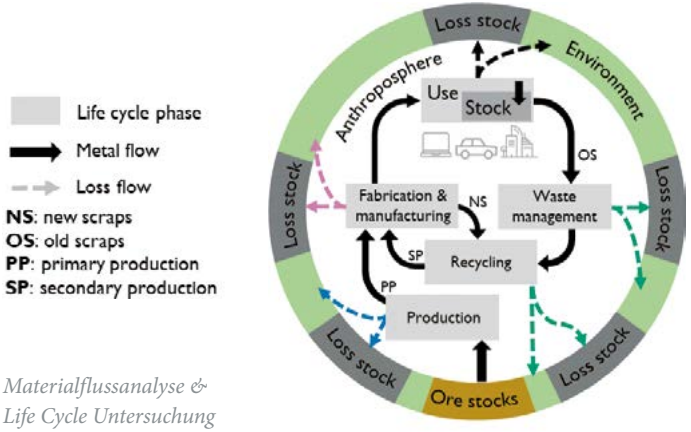
- Versorgungsrisiken für Rohstoffe,
- die Materialintensität von Infrastruktur, Energie- und Mobilitätssystemen,
- Phänomene des Downcyclings im Recycling,
- dissipative Materialverluste,
- Umweltauswirkungen durch Metalle und Minerale beim Bergbau wie auch beim Recycling.

Die am Lehrstuhl für Ökologische Ressourcentechnologie verwendeten Methoden sind insbesondere die Materialflussanalyse, die Ökobilanzierung und die Rohstoffkritikalitätsbewertung. Die Batterieforschung des Lehrstuhls Ökologische Ressourcentechnologie umfasst folgende drei Schwerpunkte:

1. Modellierung und Simulation der Rohstoffbedarfe für Batterieproduktion und des Sekundärrohstoffpotentials aktuell und in den nächsten Jahrzehnten in Deutschland, Europa und weltweit in Abhängigkeit von Technologieentwicklungspfaden.

2. Bewertung der Versorgungsrisiken von Batterierohstoffen und -vorprodukten für Europa und europäische Unternehmen anhand von Kritikalitätsindikatoren für Materialsysteme.

3. Life Cycle Assessment (Ökobilanzierung) mit Life Cycle Costing und Social Life Cycle Assessment für Batterien in verschiedenen Anwendungsfeldern, Produktzusammensetzung und Herstellungsverfahren unter der Berücksichtigung von Circular Economy Maßnahmen.



Materialflussanalyse & Life Cycle Untersuchung

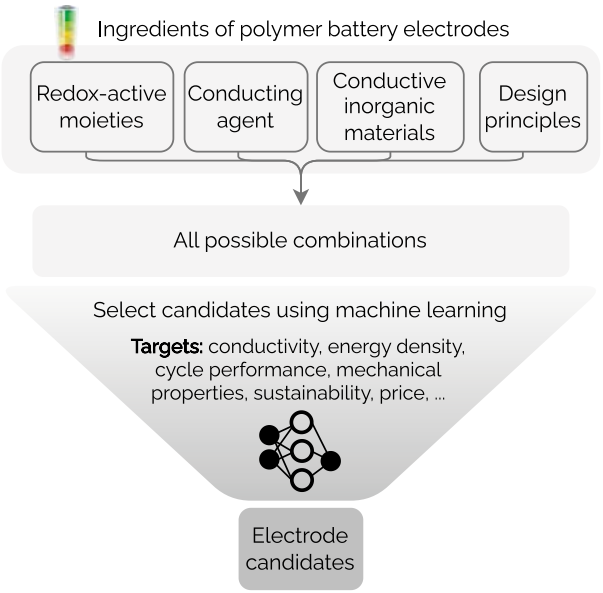
Polymer-Batterie-Informatik

Die Kuenneth Group (Juniorprofessur für Computational Materials Science) widmet sich der Demokratisierung der Anwendung des maschinellen Lernens in der Materialwissenschaft, um die Entdeckung, das Design, die Entwicklung und den Einsatz von Materialien zu beschleunigen und zu rationalisieren, was zu mehr Effizienz, Zugänglichkeit und Inklusion führt. Um dieses Ziel zu erreichen, folgt die Kuenneth Group einer auf maschinelles Lernen konzentrieren Materialinformatik-Pipeline, die durch vier wesentliche Säulen gekennzeichnet ist: Daten, Materialdarstellung, Methoden des maschinellen Lernens und Demokratisierungstechniken.

Batterieelektroden auf Basis redoxaktiver Polymere

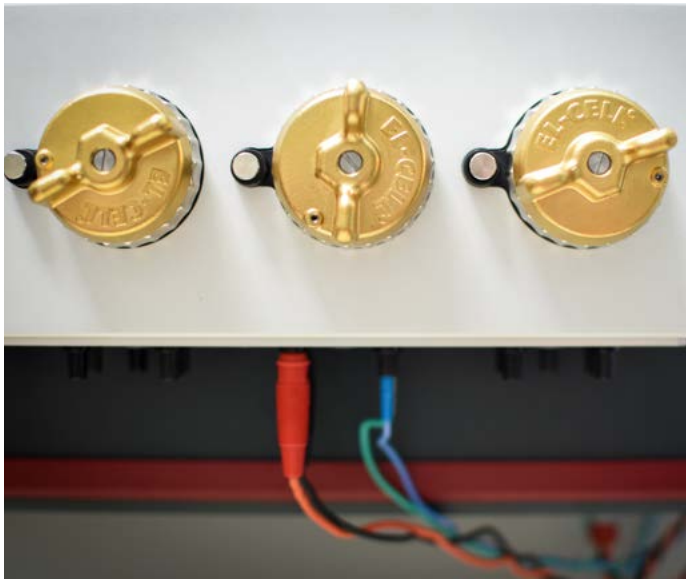
In den letzten Jahrzehnten wurden erhebliche Anstrengungen zur Entwicklung von Batterien unternommen, die redoxaktive Polymere als primäres Elektrodenmaterial verwenden, um ähnliche Eigenschaften wie Batterien auf Basis von Übergangsmetallen zu erreichen. Solche Batterien mit redoxaktiven Polymeren bieten eine Alternative zu Batterien auf der Basis von Übergangsmetallen und gelten aufgrund der Verwendung von Elementen, die in der Erde reichlich vorhanden sind, wie Wasserstoff, Sauerstoff, Kohlenstoff und Stickstoff, als umweltfreundlich. Ein häufiges Problem dieser Batterien ist jedoch ihre relativ hohe Auflösungsanfälligkeit und geringe elektronische Leitfähigkeit. Diese Probleme erfordern oft umfangreiche und kostspielige Experimente im Bereich der fortschrittlichen Elektroden- und Materialentwicklung, um Lösungen in der weitläufigen chemischen Landschaft der Polymerelektroden zu finden.

Das aufstrebende Gebiet der Polymerbatterie-Informatik hat sich als vielversprechende Strategie zur Ergänzung und Überwindung experimenteller Trial-and-Error-Methoden erwiesen. Durch die Nutzung der Leistungsfähigkeit maschineller Lerntechniken bietet dieser Bereich einen datenzentrierten Forschungspfad, um die Herausforderungen beim Elektrodendesign in Bezug auf Auflösung, Leitfähigkeit, Energiedichte und mechanische Eigenschaften, Zyklusleistung, Nachhaltigkeit und Preis zu bewältigen. Modelle des maschinellen Lernens werden anhand von Daten aus



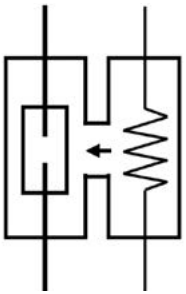
Experimenten, Berechnungen, Literatur und durch synergetische Kombinationen von experimentellen und rechnerischen Methoden trainiert, um potenzielle Kandidaten mit maßgeschneiderten Eigenschaften für Polymerelektroden zu ermitteln.

Das maschinelle Lernen erleichtert die Erkundung eines riesigen Parameterraums, der verschiedene Kombinationen von Polymeren mit redoxaktiven Funktionalitäten, leitenden Substanzen und anderen Faktoren umfasst. Diese Modelle ermöglichen die Identifizierung potenzieller Elektrodenkandidaten, die bestimmten Eigenschaftskriterien entsprechen. Diese Methodik rationalisiert und verbessert den Prozess der Auswahl und Optimierung optimaler Konfigurationen für Polymerelektroden und treibt die Entwicklung bahnbrechender Lösungen für die Energiespeicherung der nächsten Generation voran.

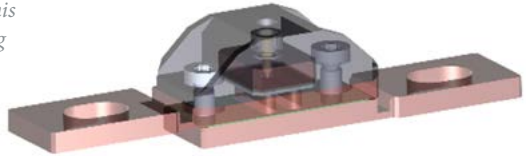


Elektronische Überwachung und Steuerung elektrischer Energiespeicher

Der Lehrstuhl Elektronik elektrischer Energiespeicher arbeitet am BayBatt zusammen mit dem Fraunhofer-Institut für Integrierte Systeme und Bauelementetechnologie (IISB) in Erlangen an Lösungen für die elektronische Überwachung und Steuerung von elektrischen Energiespeichersystemen wie Batterien, Supercaps und Brennstoffzellen, die in mobilen und stationären Anwendungen zum Einsatz kommen. Die eingebettete foxBMS® Batterie-Management-System-Plattform, die aus einer Initiative des Fraunhofer IISB im Jahr 2015 entstand und am BayBatt weiterentwickelt wird, ermöglicht die Erforschung und Validierung von sichereren, robusteren und zuverlässigeren Systemarchitekturen für intelligente Energiespeichersysteme.



Antifuse: Bidirektionale Hochstrom-Überbrückungsvorrichtung, die nach einem einzigen thermischen Ereignis irreversibel leitfähig wird.



Zündvorrichtung: Vorrichtung, die auf einem elektrisch gesteuerten Heizwiderstand basiert und eine einmalige exotherme Reaktion auslöst.

Inverse Sicherung für die Überbrückung defekter Batteriezellen

Sensorik und Aktorik für Batteriesysteme

Die Sensorik spielt in Batteriesystemen eine zentrale Rolle, insbesondere um die Sicherheit des Batteriesystems zu gewährleisten. Der Lehrstuhl beschäftigt sich sowohl mit der Sensorik, als auch mit der benötigten Aktorik, um entsprechend das Batteriesystem vor gefährlichen Situationen zu schützen. Dafür werden am Lehrstuhl digitale und analoge Elektronik, aber auch funktionale Systemarchitekturen für die sensorische Überwachung untersucht, um den sicheren, robusten und zuverlässigen Betrieb von Batterien zu garantieren. Redox-Flow Batterien und Hybridsysteme (d.h. Kombination von Batterie und Brennstoffzelle) kommen auch in Betrachtung. Die Aktorik ermöglicht es, auftretende Fehler im Batteriesystem zu beseitigen oder teilweise zu kompensieren. Dafür wurde eine inverse Leistungssicherung entwickelt, die es ermöglicht, Batteriesysteme trotz defekter Zellen weiterzubetreiben. Der Fokus liegt dabei auf resilienten elektronischen Systemen mit einem hohen Niveau an funktionaler Sicherheit (d.h. Safety: von „fail-safe“ nach „fail-operational“ bis hin zu „fail-aware“). Die Zuverlässigkeit und Verfügbarkeit der elektrischen Komponenten hat an Wichtigkeit gewonnen, da die Elektronik in Batteriesystemen dauernd unter Spannung steht und dadurch hohen Anforderungen unterliegt. Komponenten wie z.B. elektromechanische Schütze, elektromagnetische Sicherung, galvanisch isolierter Stromsensor werden eingesetzt und weiterentwickelt.

Batteriemanagementsysteme
Das Batteriemanagementsystem (BMS) ist das Gehirn des Batteriesystems: alle wichtigen Entscheidungen werden dort getroffen, anhand gemessener physikalischer Größen. Der Lehrstuhl entwickelt und validiert Batteriemanagementsysteme und Batteriesysteme mittels Hardware- bzw. Software-in-the-loop-Konzepten, elektronische Schnittstellen einschließlich der Mensch-Maschine-Schnittstellen, Informationssysteme und intelligente Kommunikationssysteme.

Für die Forschungsarbeiten greift der Lehrstuhl auf die foxBMS Plattform zurück und entwickelt sie weiter. foxBMS ist eine freie, offene und flexible Forschungs- und Entwicklungsumgebung für die Entwicklung von Batteriemanagementsystemen. Vor allem ist es die erste universelle Hardware- und Softwareplattform, die eine vollständig quelloffene BMS-Entwicklungsplattform bietet. Sie zielt darauf ab, moderne und komplexe elektrische Energiespeichersysteme, wie Lithium-Ionen-Batteriepacks zu steuern. Darüber hinaus soll sie die Forschungs-, Entwicklungs- und Testprozesse im Bereich der mobilen und stationären elektrischen Energiespeicher durch nahtlose Entwicklungsprozesse und Integration beschleunigen. Aus diesem Grund eignet sie sich hervorragend für Forschung und Entwicklung, einschließlich schnellem Prototyping und Testen (technische Spezifikationen).

Das BMS sammelt eine Reihe von kritischen Funktionen wie z.B. das elektrische Management der Batterie, die Zellsymmetrierung (passiver und aktiver Ladungsausgleich zwischen Batteriezellen), die Sicherheitsbeschaltung, die galvanische Isolation und Fehlerdetektion im Batteriesystem oder in Hybridsystemen. Das BMS besteht aus eingebetteter Software (z.B. Mikrokontroller, FPGA, System-on-Chip) für verteilte Systeme und steuert Aktuatoren (z.B. Power Antifuse als elektrisches Bypass-Element im Crash- oder Fehlerfall) via physikalischen Messwerten, die von Sensoren (z.B. Einsatz von kalibrationsfreien Stromsensoren basierend auf Quantentechnologie) geliefert werden.

Open-Source Batteriemanagementsystem Forschungsplattform foxBMS

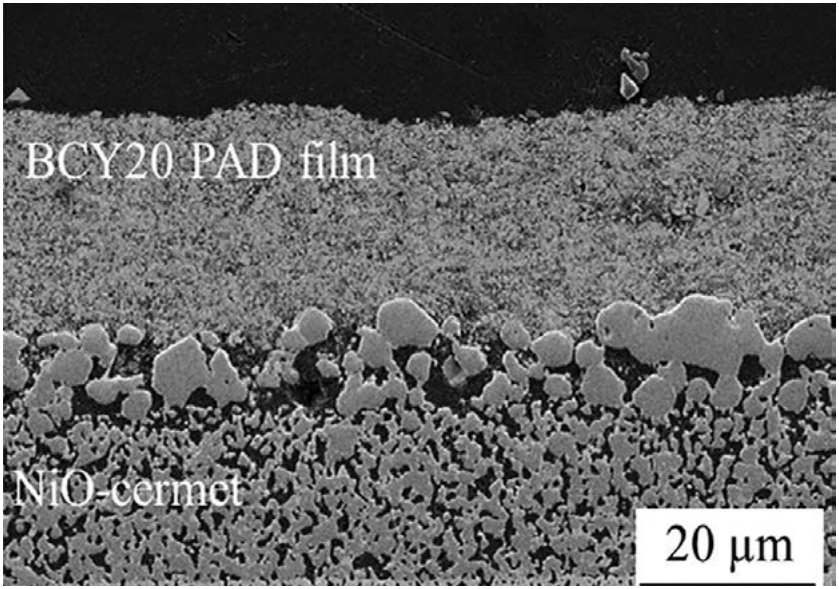
Entwicklung innovativer Batteriespeicher

Der Lehrstuhl Funktionsmaterialien arbeitet u.a. an neuen Materialien und Technologien für die Energiewandlung. Dabei stehen neuartige Batteriekonzepte, Materialien und deren Verarbeitung im Fokus, die innerhalb des BayBatt die Basis für die Entwicklung innovativer Batteriespeicher bilden.

Materialien und Technologien für die Energiewandlung

Die Energiewende ist ein zentrales Zukunftsthema: weg von fossilen Energieträgern hin zu regenerativen Energien aus Sonne und Wind. Elektrische Energiespeicher und -wandler spielen hier eine wichtige Rolle. Im Zentrum der Forschung stehen häufig neue Materialien. Thermoelektrische Materialien sind die Schlüsselkomponente bei der Umwandlung von ungenutzter Abwärme in hochwertige elektrische Energie.

Bei der CO_2-Elektrolyse wird das schädliche Klimagas CO_2 mit grünem Strom in Wertstoffe wie Ethen umgewandelt. Eine entscheidende Rolle spielen hier die Elektrodenmaterialien bzw. die Katalysatorbeschichtungen auf den Elektroden. Aber auch die Prozessführung ist wichtig. Leistungsfähige Batterien sind wichtig für die Speicherung von elektrischer Energie und für die Elektromobilität. Hier stehen neuartige Batteriekonzepte, Materialien und deren Verarbeitung im Fokus.



Keramische Schicht auf einer porösen gasdurchlässigen Elektrode, erzeugt mittels der Pulver-Aerosol-Abscheidungs-Methode (PAD).
Illustration: Jörg Exner

Management zur Überwachung und Regelung von Batterien

Die Juniorprofessur für Methoden des Batteriemanagements befasst sich mit der Entwicklung moderner modellbasierter Methoden zur Optimierung, Überwachung und Regelung von Batterien. Ziel ist es, die Lebensdauer und Sicherheit aktueller Batteriesysteme zu verbessern und maßgeschneiderte Betriebsstrategien für Batterien mit neuartigen Materialien zu entwickeln. Die Forschung widmet sich damit zentralen technischen Herausforderungen für die Energiewende und die Elektromobilität.

Im Mittelpunkt der Forschung stehen Vorhersagemodelle für Batterien, die die Grundlage für die Entwicklung moderner Batteriemanagementsysteme sind. Dabei werden insbesondere die Themen Batteriealterung, Sicherheit und neue Materialien behandelt.

Die elektrochemischen, chemischen und mechanischen Prozesse, die während des Betriebs von Batterien ablaufen, können oft nicht getrennt voneinander betrachtet werden und sind nicht auf eine bestimmte Längenskala beschränkt. Dies ist besonders wichtig für komplexe Degradations- und Umwandlungsprozesse, die erhebliche strukturelle Veränderungen innerhalb der Batteriezelle verursachen. Daher sind skalenübergreifende und multiphysikalische Ansätze erforderlich.

Die Forschungsgruppe entwickelt Vorhersagemodelle auf verschiedenen Skalen, die von elektrochemischen Grenzflächen bis hin zu großformatigen Zellen reichen. Außerdem wird das dynamische Verhalten von Batterien mit modernen elektrochemischen Methoden umfassend charakterisiert. Auf der Grundlage dieser Experimente können die Modellparameter ermittelt und die Vorhersagefähigkeit getestet werden.

Die Forschung ist eingebettet in ein interdisziplinäres Forschungsumfeld und fungiert als Schnittstelle zwischen Materialentwicklung und elektrischer Systemintegration.

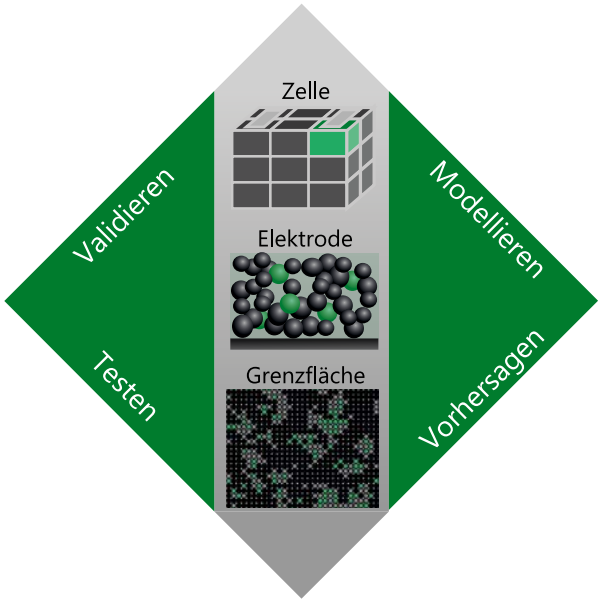


Illustration des Anwendungsbereichs der verwendeten modellbasierten Methoden. Ihre Anwendung reicht von der Entwicklung und Integration neuer Materialien bis hin zur Integration von Zellen in Energiespeicher.

Materialien für die elektrochemische Energiewandlung und -speicherung

Die Forschung am Lehrstuhl Werkstoffverfahrenstechnik konzentriert sich auf neuartige Materialien und Konzepte für die elektrochemische Energiewandlung und -speicherung. Unsere Aktivitäten umfassen die Entwicklung von spektroskopischen Methoden zur in-operando Charakterisierung von Energiematerialien im Betrieb sowie die kontrollierte 3D-Strukturierung von porösen Elektroden, z.B. mittels Elektrospinning und dynamischer Wasserstoffblasentemplatierung. Aktuelle batteriebezogene Projekte befassen sich mit der Verarbeitung und Charakterisierung von Kohlenstoffmaterialien und porösen Elektroden für Lithium-Ionen- und Redox-Flow-Batterien.

Lithium-Ionen-Batterien

Aufgrund ihrer hohen volumetrischen und gravimetrischen Energiedichte sowie ihrer Zyklenstabilität werden Lithium-Ionen-Batterien (LiBs) bereits in mobilen Geräten, wie Laptops und Smartphones, kommerziell eingesetzt, finden aber auch zunehmend Verwendung in Automobilanwendungen. Während kommerzielle LiBs jedoch in der Regel aus einer kohlenstoffbasierten Elektrode auf der Anodenseite und einer Kombination verschiedener Übergangsmetalle, wie Nickel oder Kobalt, mit Lithium auf der Kathodenseite bestehen, befassen wir uns mit umweltfreundlicheren und besser verfügbaren Materialien wie Silizium, Graphitoxid und Schwefel.

Aktuelle Forschungsschwerpunkte sind die Synthese von Silizium-Kohlenstoff-Verbundwerkstoffen als neuartige Anodenmaterialien, die elektrochemische Charakterisierung von glasbasierten Dünnschichtseparatoren und die Entwicklung von in-situ- und in-operando-Analysestrategien zur genaueren Untersuchung der komplexen elektrochemischen Prozesse an der Elektroden-Elektrolyt-Grenzfläche.

Redox-Flow-Batterien

Redox-Flow-Batterien speichern elektrische Energie chemisch in Form von flüssigen Elektrolytlösungen. Der Vorteil von Redox-Flow-Batterien gegenüber anderen Speichersystemen ist, dass die Speicherkapazität durch das Volumen der Elektrolyttanks eingestellt werden kann und keine Phasenübergänge erfolgen. In einigen Projekten werden Elektrospinnen und Templatieren eingesetzt, um verbesserte Kohlenstoffkompositelektroden zu entwickeln. In anderen Projekten werden weitere Erkenntnisse über die Alterung poröser Elektroden mit Hilfe hochentwickelter elektroanalytischer Methoden (RDE, ACCV, DRT-EIS) gewonnen, um die Beziehung zwischen Struktur und Aktivität zu untersuchen.

Elektrolyt für Redox-Flow-Batterien auf Basis von Vanadium in verschiedenen Oxidationsstufen.

Design und Auslegung von Batteriespeichern

Der Lehrstuhl Systemtechnik elektrischer Energiespeicher beschäftigt sich mit dem optimalen Design und der Auslegung von Batteriespeichern von der Zelle aufwärts. Wesentliche Kenngrößen wie Leistungs- und Energiedichte sowie Systemeigenschaften wie Sicherheit und Zuverlässigkeit entstehen erst im Zusammenspiel der Teilsysteme Zelle, mechanischer Aufbau, Thermomanagement, Elektronik und Software. Durch den integrativen Charakter stellt der Lehrstuhl im BayBatt die Brücke von den Komponenten zur Anwendung des Batteriesystems dar.

Simulation und Auslegung

Die Entwicklung und Parametrierung von thermischen und elektrischen Modellen ist einerseits Grundlage für die Potentialabschätzungen von Komponenteninnovationen auf Material- und Zellebene, zum anderen aber auch ein wichtiges Werkzeug für die optimale Systemauslegung. Beide Anwendungen sind im Fokus des Lehrstuhls, wobei der Betrachtungshorizont explizit die notwendige Peripherie eines Batteriesystems (Stromsensor, Schütze, etc.) miteinschließt, sowie Verfahren zur Parameteridentifikation an bestehenden Systemen.

Diagnose und Impedanzspektroskopie

Die Anwendung von Diagnose-Algorithmen in einem kommerziellen System und Alltagsbedingungen erfordert eine Anpassung von auf Zellebene etablierten Labormethoden. Diese auf Systemebene zu überführen, zu validieren und den Systemnutzen darzustellen oder in umgekehrter Weise Anforderungen an Sensorik und Datenerfassung zur Erreichung einer Diagnosequalität abzuleiten, ist ein weiteres Fokusthema. Ein Verfahren, welches besonders vielversprechend für einen Einsatz in der Anwendung erscheint, ist die Impedanzspektroskopie. Der Fokus liegt dabei auf der Systemebene und der Berücksichtigung der Randbedingungen für den Betrieb in der Anwendung.

Modellbasiertes Systems Engineering

Durch den Einsatz von Modellen können Wirkketten und Sensitivitäten sichtbar gemacht werden. Ebenso wird die Nachverfolgbarkeit von Anforderungen in der Systemspezifikation gewährleistet und Auswirkungen einer Anpassung der Architektur lassen sich direkt angeben. Daher ist das modellbasierte Systems Engineering hilfreich, um Komponentenanforderungen abzuleiten und umgekehrt Systemverbesserungen durch Komponenteninnovationen quantifizieren zu können und somit einen wesentlichen Beitrag für die Zusammenarbeit im BayBatt zu leisten.

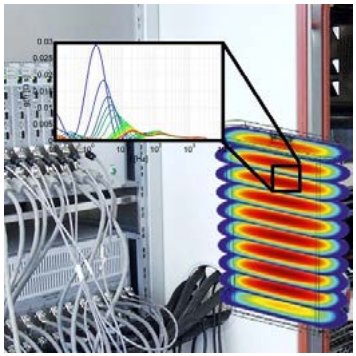


Illustration zur Kopplung thermischer und elektrischer Eigenschaften sowie notwendiger Messtechnik: Verteilungsfunktion der Relaxationszeiten über einer Simulation der Temperaturverteilung vor einem Zellprüfstand.

Bayerisches Zentrum für Batterietechnik (BayBatt)

Batteriekompetenz – made in Bayreuth

Die zentrale Bedeutung von Batteriesystemen für die Energiespeicherung und -nutzung der Zukunft ist mit einem enormen Qualifizierungsbedarf verbunden. Es braucht hochqualifizierte Absolventinnen und Absolventen, die die Entwicklung nachhaltiger, sicherer und vernetzter Batterietechnologien aktiv mitgestalten.

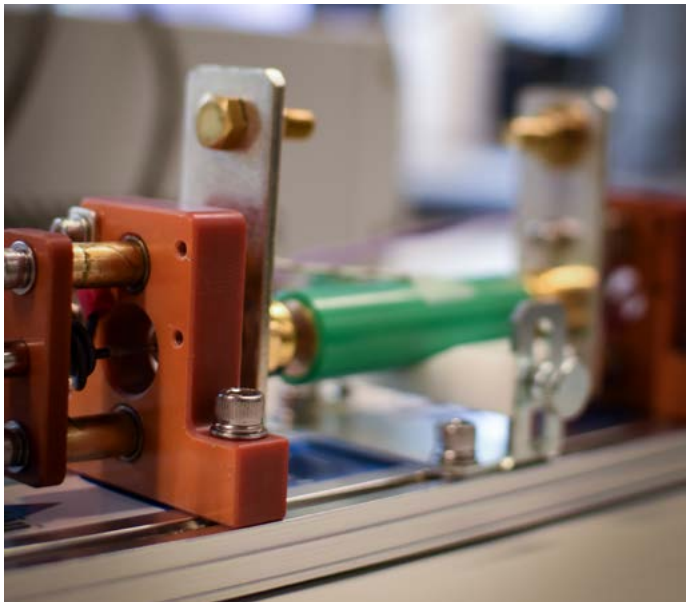
Das BayBatt hat deshalb zwei dezidiert batteriebezogene Masterstudiengänge auf den Weg gebracht – eine Neuheit in der deutschen Universitätslandschaft. Mit dem englischsprachigen Studiengang *Battery Materials and Technology (M.Sc.)* und dem deutschsprachigen Studiengang *Batterietechnik (M.Sc.)* werden interdisziplinär arbeitende Expertinnen und Experten ausgebildet, die die gesamte Wertschöpfungskette von Energiespeichern im Blick haben.

Die neuartigen Masterstudiengänge wenden sich an Absolventinnen und Absolventen sowohl aus den Naturwissenschaften, als auch aus den Ingenieurwissenschaften. Gefragt sind exzellente Bewerberinnen und Bewerber aus dem In- und Ausland, die an der Energiewende mitarbeiten wollen, um den Fachkräftebedarf zu decken.

Mit dem Graduiertenkolleg verfolgt das BayBatt eine interdisziplinär aufgestellte Promovierendenausbildung rund um das spezifische Thema Batterie. Die Doktorandinnen und Doktoranden können die einzigartigen Möglichkeiten in Forschung, Ausbildung und Vernetzung des Zentrums nutzen und erhöhen ihrerseits die (internationale) Sichtbarkeit und das wissenschaftliche Renommee des Standorts.

Allen über das Bayerische Zentrum für Batterietechnik finanzierten Promovierenden des Graduiertenkollegs wird ein Arbeitsplatz im Gebäude des Zentrums eingerichtet, sodass sie von Beginn an Teil des interdisziplinären, internationalen Teams sind.

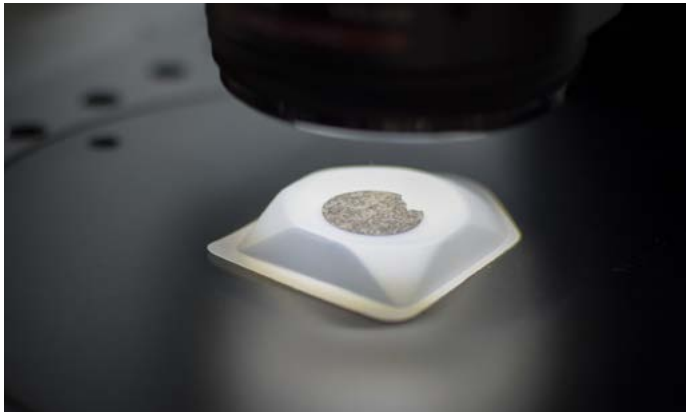
Als dritte Säule im Ausbildungskonzept wird das BayBatt in Zukunft zudem einschlägig vorgebildete akademische Fachkräfte über Weiterbildungsangebote für den Bereich der Batterietechnik qualifizieren.

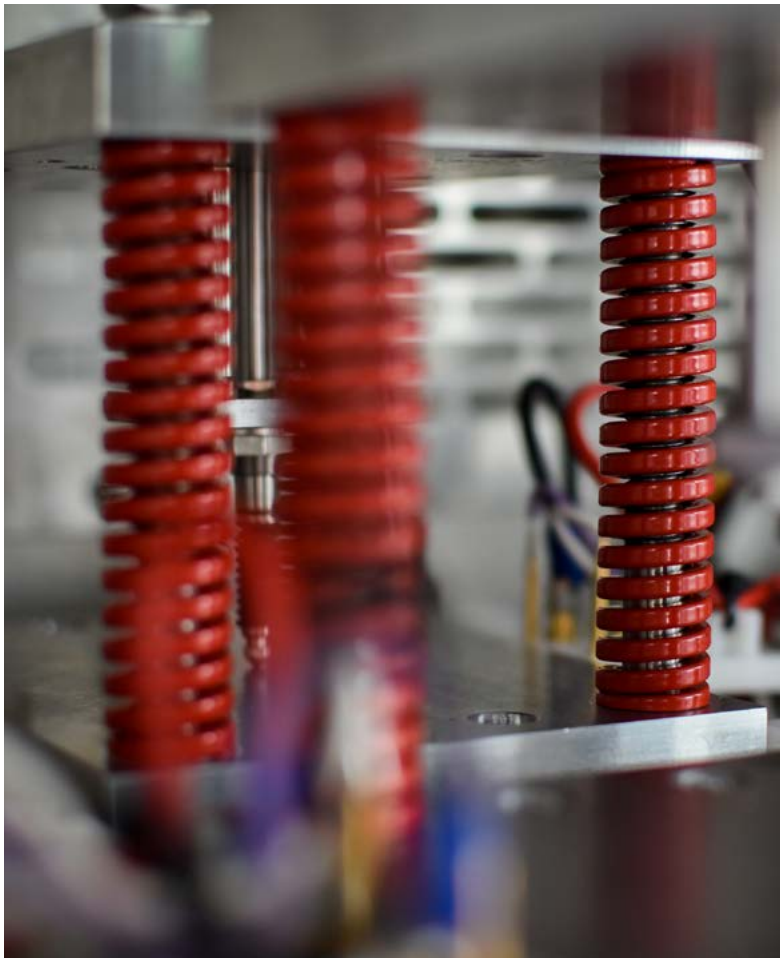


Bayerisches Zentrum für Batterietechnik (BayBatt)

Erster Ansprechpartner für die bayerische Industrie

Bayern verfügt über eine ausgezeichnete Industriestruktur mit international konkurrenzfähiger Produktion, Projektierung und Dienstleistung, mit Spitzenpositionen in der industriellen Forschung und Entwicklung. Das gilt für die chemische Industrie, für Komponentenhersteller, Zulieferer und Original Equipment Manufacturer (OEMs, dt.: Erstausrüster) der Automobil- und Energieindustrie sowie für Netzbetreiber. Das BayBatt will in der Batterietechnik erster Ansprechpartner der bayerischen Industrie sein, durch fachliche Beratung, durch Begleitung von F&E-Projekten und durch Forschungsdienstleistungen. Wir streben einen bidirektionalen Transfer und regen Austausch von Ideen und Konzepten, Knowhow und Mitarbeitenden zwischen unserem Forschungszentrum und den relevanten Playern der bayerischen Batteriewirtschaft an.





BayBatt
Bayerisches Zentrum für Batterietechnik

UNIVERSITÄT BAYREUTH

Universität Bayreuth
Universitätsstraße 30
95447 Bayreuth

Telefon: +49 (0)921 55-0
E-Mail: info@uni-bayreuth.de
Web: www.uni-bayreuth.de

Kontakt

Bayerisches Zentrum für Batterietechnik
Weiherstraße 26
95448 Bayreuth

Telefon: +49 (0)921 55-49 07
E-Mail: baybatt@uni-bayreuth.de
Web: www.baybatt.uni-bayreuth.de