

**IC-MPPE**  
**Integrated Computational**  
**Materials Process and Product**  
**Engineering.**

Programm: COMET – Competence Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET- K2 Zentrum, FFG und FFG Mobilität der Zukunft

Projekt: ASSESS & OpMoSi, 04/2022-01/2026, multi-firm



Siliziumbasierte Anoden in Li-Ionen Batterien können helfen die Reichweite von Elektro-Fahrzeugen wesentlich zu steigern. Bild: MCL

## WIE KANN MAN DIE ENERGIEDICHTE VON LI-IONEN BATTERIEN SIGNIFIKANT ERHÖHEN?

4D BILDGEBENDE TOMOGRAPHIE VON LI-IONEN ZELLEN DECKT LITHIERUNGSVERHALTEN VON SILIZIUM AUF - ERKENNTNISSE ERMÖGLICHEN VERBESSERTE BATTERIEN HINSICHTLICH REICHWEITE, LEBENSDAUER, ...

Die zunehmende Elektrifizierung benötigt Lithium (Li)-Ionen-Batterien (LiB) mit höherer Energiedichte, besserer Zyklenstabilität und längerer Lebensdauer. Um hier Verbesserungen zu erreichen spielt das Material in der Elektrode eine wichtige Rolle. Herkömmliche Graphit Anoden gepaart mit hoch-energiegedichte Kathoden bringen nicht die notwendige Leistung. Neue Materialkonzepte für die Anode mit einer wesentlich höheren spezifischen theoretischen Kapazität sind gefragt. Silizium (Si) als Material birgt hier enormes Potenzial für LIBs. Derzeitige Zellen zeigen aber bei Verwendung von hoher Si Konzentration Probleme mit der Langzeitstabilität. Ein Problem ist die starke Volumenausdehnung des Si bei der Aufnahme der Li-Ionen. Trotz verbessertem

elektrochemischem Verständnis sind die Auswirkungen von mechanischen Mechanismen im Zusammenhang mit dem Laden und Entladen der Elektrode sowie der einzelnen Si-Partikeln wenig erforscht. Insbesondere ein Verständnis von elektrochemischen gepaart mit mechanischen Mechanismen würde hier Potential für wesentliche Verbesserungen hinsichtlich Zyklenstabilität und Lebensdauer bringen. Nach bisherigem Verständnis, ist man davon ausgegangen, dass Si über eine sogenannte zweiphasige Coreshell Mechanismus lithiert. Dabei wird der äußere Teil des Si quasi in eine Li-Si Verbindung umgewandelt, wobei der Innere Teil des Partikels als Si erhalten bleibt. Diese Erkenntnisse stammen hauptsächlich aus in-situ durchgeführten

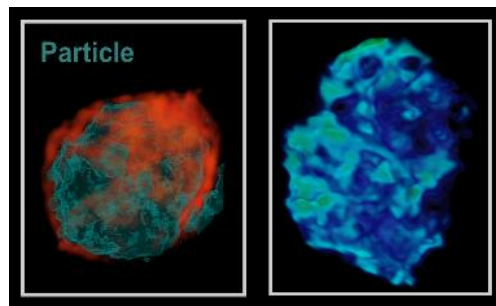
## SUCCESS STORY

Transmissions-Elektronenmikroskopie Experimenten. Problematisch dabei ist, dass diese Untersuchungen an idealisierten Zell-Systemen durchgeführt wurden, die eine typische Anoden-Mikrostruktur mit einer Vielzahl von Si-Partikeln eingebettet in eine Poröser Matrix mit Binder Domänen etc. nicht ausweisen. Eine andere Möglichkeit möglichst nichtinvasiv zeitlich Lithierungs Vorgänge zu beobachten bietet die in situ Synchrotron Tomographie, quasi in „4D“. Bisherige Untersuchungen dazu zeigen aber große Schwächen hinsichtlich Auflösung und Kontrast. Daher konnte bisher nur die Zelle und die Elektrode während der Lithierung zufriedenstellend studiert werden. Ein Abbilden auf Partikelebene war bis dato nicht möglich.

### Auswirkungen und Perspektiven

Die veröffentlichte Arbeit beleuchtet das Zusammenspiel mechanischer und chemischer Mechanismen beim Lithieren des Si, von der Elektrode bis hin zum einzelnen Partikel mittels hochauflösender 4D Synchrotron Tomographie. Dabei wird gezeigt das das ursprüngliche Coreshell-artige Bild zur Lithierung für nicht-idealisierte Elektroden nur die halbe Wahrheit ist. Eine Vielzahl der Si-Partikel lithiert eher nicht in diesem Sinne, sondern zeigt ein eher komplexes Lithierungs Verhalten, wo

auch das Innere des Partikels miteinbezogen wird. Die 4D multi-skaligen Untersuchungen zeigen, dass die Stabilität der Elektrode bzw. die Lebensdauer nicht nur durch Volumenexpansion des Si, wie bisher angenommen, sondern auch signifikant durch lokale Spannungskonzentrationen sowie der Mikrostruktur beeinflusst wird. Damit können für die Zukunft wesentliche Erkenntnisse hinsichtlich Verbesserung der Zyklenstabilität und Lebensdauer abgeleitet werden. Die durchgeführte Arbeit ist bahnbrechend im Bereich Batterieforschung. Diese wurde vom Journal EES Batteries als ein Leuchtturm der Forschung identifiziert und als HOT Paper 2026 erkoren.



Links umschließt die Lithierung (rot) das Silizium-Partikel (cyan) gleichmäßig, während das komplexe Muster rechts (blau) die Alterung der Batterie beschleunigt.



M. Häusler et al. Bridging particle-scale lithiation mechanisms and macroscopic performance in high-energy density Si anodes via time-resolved full 3D visualisation. EES Batteries (2026).

### Projektkoordination (Story)

Dr. Roland Brunner  
 Group Leader Material and Damage Analytics  
 Materials Center Leoben Forschung GmbH  
 T +43 (0) 3842 45922-620  
 roland.brunner@mcl.at

### IC-MPPE / COMET-Zentrum

**Materials Center Leoben Forschung GmbH**  
 Vordernberger Straße 12  
 8700 Leoben  
 T +43 (0) 3842 45922-0  
[mclburo@mcl.at](mailto:mclburo@mcl.at)  
[www.mcl.at](http://www.mcl.at)

### Projektpartner

- Varta Innovation GmbH, Österreich
- Materials Center Leoben Forschung GmbH, Österreich
- AVL List GmbH, Österreich
- Virtual Vehicle Research GmbH, Österreich

Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMIMI, BMWET und die Bundesländer Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt ([www.ffg.at/comet](http://www.ffg.at/comet)).