

Forschungsschwerpunkte – Dr. Wolfgang Zeier

Für eine nachhaltige Energieversorgung und Effizienzsteigerung von Batterien werden Feststoffbatterien derzeit intensiv diskutiert. Hier werden im Vergleich zur konventionellen Lithium-Ionen-Batterie feste Ionenleiter anstatt von flüssigen organischen Elektrolyten eingesetzt. Dies soll zu einer erhöhten Sicherheit sowie im Falle von Elektroautos zu größeren Reichweiten führen. Jedoch ist das grundlegende Verständnis für die Ionenleitung in sehr schnellen Ionenleitern derzeit nicht ausreichend, um diese Materialien für eine Anwendung hinreichend zu verbessern.

Die Forschung meiner Gruppe vereint die Grundlagenforschung von Struktur-Eigenschafts-Zusammenhängen in anorganischen festen Ionenleitern mit anwendungsbezogenen Fragestellungen. Hierbei steht hauptsächlich das Verständnis der Einflüsse von chemischen Bindungen auf die Struktur und auf reaktive Strukturveränderungen sowie die sich daraus ergebenden Änderungen im ionischen Transport im Vordergrund. Mit dem Wissen über die Einflüsse der Struktur und Bindungsinteraktionen auf den Transport ist anschließend ein Design der Materialien möglich.

Im Folgenden wird ein Aspekt der Gruppe, die Untersuchung der Gitterdynamiken von Ionenleitern, kurz dargestellt. Während des Prozesses der Ionenleitfähigkeit im Festkörper muss ein Lithium-Ion von einem besetzten Gitterplatz auf einen benachbarten, freien Gitterplatz springen. Gelingt dieser Sprung, findet Ionenleitung statt. Während des Sprungprozesses muss das Gitter, welches das Ion umgibt, lokal verzerren, um Platz für den Sprung zu erzeugen. Dieser Prozess ist mit einer Aktivierungsbarriere verknüpft, da es Energie kostet, das Gitter und die damit verbundenen Bindungen zu verdrängen. Ideale Sprungprozesse mit kleinen Aktivierungsbarrieren werden durch bestimmte Materialien begünstigt, in denen sich die Koordinationszahl des springenden Ions nur minimal verändert.

Klassische Ansätze, um Ionenleitung in Festkörpern zu beeinflussen, beziehen sich immer auf die kristallografischen Diffusionswege und Ladungsträgerkonzentrationen in einem statischen, formal unbeweglichen Wirtsgitter. Typischerweise werden hierfür Substitutionen durchgeführt, um Diffusionswege zu verbreitern oder mehr Ladungsträger (das heißt Lithium-Ionen) einzubringen. Jedoch besagt seit Jahrzehnten die chemische Intuition, dass weichere, polarisierbare Gitter den Ionentransport beeinflussen sollten. In anderen Worten, die Stärke

der Wechselwirkung des sich bewegenden Ions mit dem Wirtsgitter beeinflusst, wie stark Ionen „kleben bleiben“ und die Wahrscheinlichkeit eines Sprunges verringern.

Gerade dieser Einfluss eines weichen, dynamischen und polarisierbaren Anionenteilgitters auf den Ionentransport wurde bisher immer nur vermutet, jedoch noch nie experimentell bestätigt. In unserer Forschung untersuchen wir derzeit den Einfluss der Gitterdynamik (ein Maß für die Weichheit des Gitters) auf die Ionenleitfähigkeit in Festkörpern. Im Rahmen dieser Arbeiten wird der Einfluss der Polarisierbarkeit des Anionenteilgitters variiert, ohne die Diffusionswege zu stören. Mithilfe von Strukturaufklärung und dem Messen sowie Modellieren von Transportprozessen konnte gezeigt werden, dass der Einfluss der Weichheit des Gitters auf den Ionentransport unterschätzt wurde. Wie sich zeigt, verringert ein weicheres Gitter in der Tat die Aktivierungsbarriere. Es wirkt sich jedoch gleichzeitig negativ auf den Vorfaktor der Ionenbeweglichkeit aus, da es die Sprungfrequenzen der Ionen und die Migrationsentropie verringert. In unseren Arbeiten konnte erstmals der gravierende Einfluss der Dynamik des Gitters auf die grundlegenden Transportprozesse in Ionenleitern gezeigt werden. Mit diesem Wissen können nun neue Routen gefunden werden, um mithilfe von Gitterdynamik neue Materialien zu erkunden und bekannte Materialien zu optimieren.