MCL

Computergestütztes Materialdesign für die Energiesysteme der Zukunft

Marco Deluca

Key Scientist Sensor Solutions

Materials Center Leoben Forschung GmbH

12.05.2023

Energy Materials Team
Materials Center Leoben
Forschung GmbH

Horizon 2020

GA N. 817190

GA N. 951774

Projects P29563-N36 and I4581-N

Der Wissenschaftsfonds.

COMET IC-MPPE Projects MCacceL, ASSESS

Kompetenzzentrum für das Computergestütztes Engineering von Materialien, Prozesse und Produkte

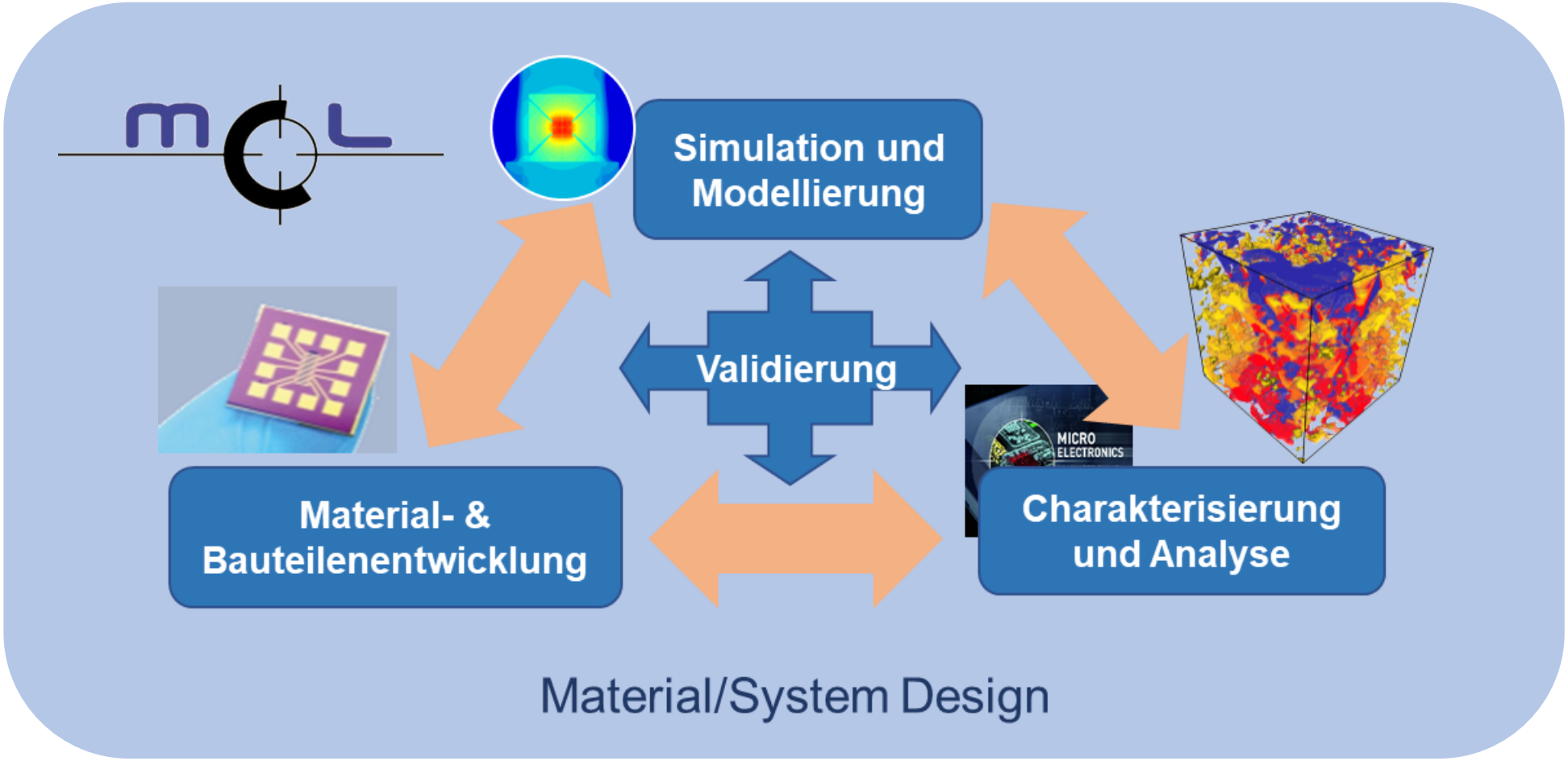
COMET K2 Center IC-MPPE

Materials Center Leoben Forschung GmbH
Roseggerstrasse 12, A-8700 Leoben, www.mcl.at

- **24** …Jahre an der Spitze der Materialforschung
- **15** …Millionen € jährliches Projektvolumen
- **>250** …geförderte Projekte seit der Gründung
- **170** …Mitarbeiter:innen

Das MCL

Materials Center Leoben Forschung GmbH

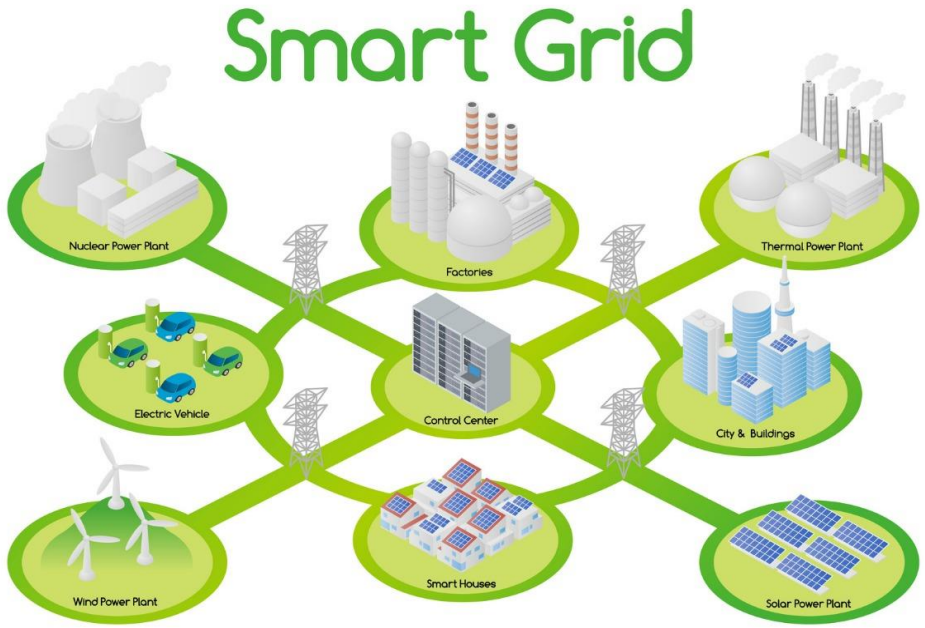


IoT Sensorsysteme

Energiematerialien

Opto- und Leistungselektronik

Metalle und Maschinenbau



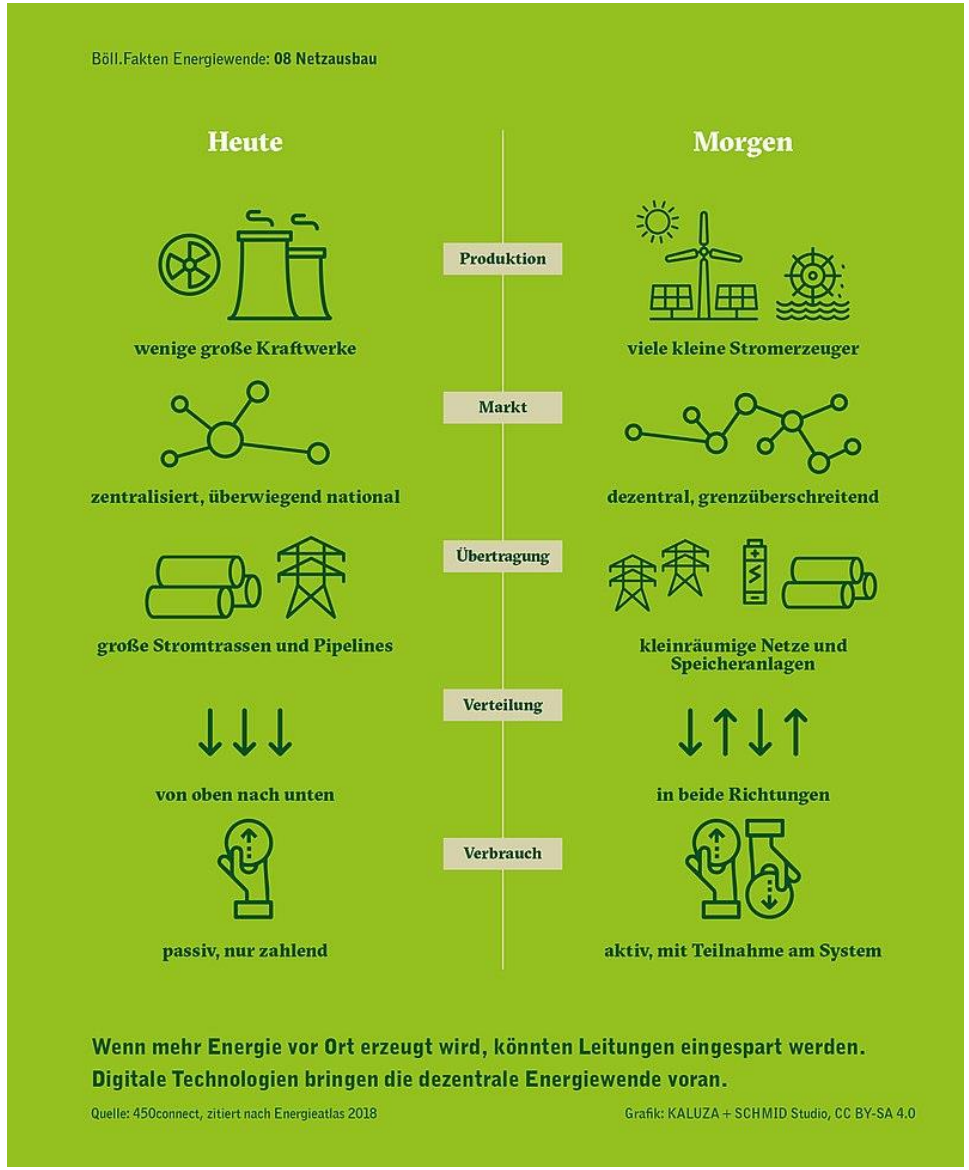
Quelle: Smart Cities World

Herausforderungen:

- Energie wird nicht erzeugt dort wo sie gerade gebraucht wird
- Phasen mit Energieüberschuss (mehr Produktion als Verbrauch)
- Energieerzeugung ist zu träge um Verbrauchsspitzen abzudecken

Schlüssel:

- Verteilte kleine Kraftwerke
- Agile Energiespeichersysteme, die schnell reagieren können (-> Kondensatoren)

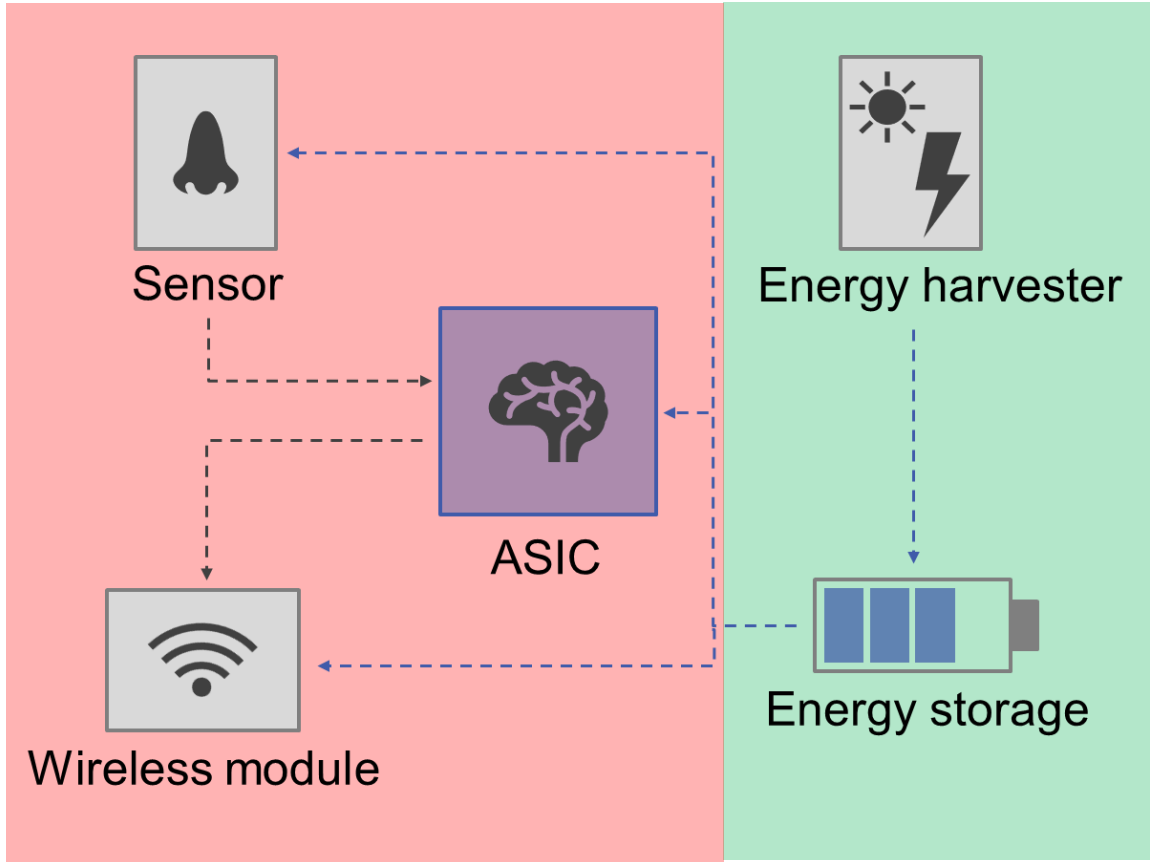


Energiesysteme der Zukunft

Beispiel 2: Drahtlose Sensorknoten für das Internet der Dinge (IoT)

www.foxes-project.eu

An eco-friendly way to power wireless IoT devices



Herausforderungen:

- Energie ist nicht immer verfügbar
- Energieerzeugung und –verbrauch kann sich schnell ändern
- Verteilte Netzwerke

Schlüssel:

- Energiespeichersysteme, die langfristig Energie speichern können (-> Batterien) und schnell reagieren können (-> Kondensatoren)

Energiesysteme optimieren

Zusammenspielende Parameter und Größen

Energieverbrauch

Sensor

- Anzahl der Messungen pro Stunde
- Verbrauchsänderung mit Messmodus

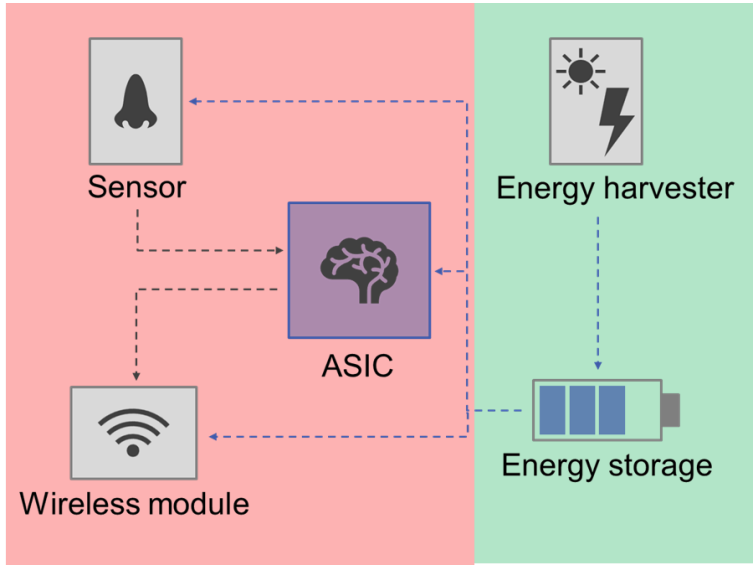
Mikroprozessor

- Verbrauchsänderung mit Rechenmodus
- Verbrauch während Sleep-Modus

RF-Modul

- Einfluss der Funkstrecke auf den Energieverbrauch
- Anzahl der Signalübertragungen pro Stunde

Beispiel: *Drahtlose Sensorknoten*



Energiegewinn

Solarzelle

- Leistung bestrahlungsabhängig
- Zellgröße und -effizienz
- Wie lang und wie viel Energie wird gewonnen?

Batterie

- Effizienz Temperaturabhängig
- Maximale/minimale Leistung
- Lade/Entladezeiten
- Wie lang Energie/Leistung verfügbar?

Kondensatoren

- Maximale/minimale Leistung
- Lade/Entladezeiten

Materialdesign für moderne Energiesysteme

Anforderungen an Materialsysteme

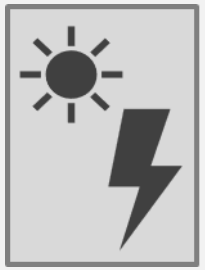
Sensor

- Leistungsverbrauch senken
- Effizienz steigern

Batterie

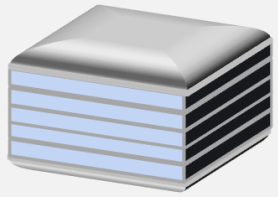
- Lade/Entladezeiten verkürzen
- Effizienz steigern in breitem T-Bereich
- Stromdichte erhöhen
- Stabilität verbessern

Solarzelle



- Effizienz steigern
- Bandbreite erweitern

Kondensator

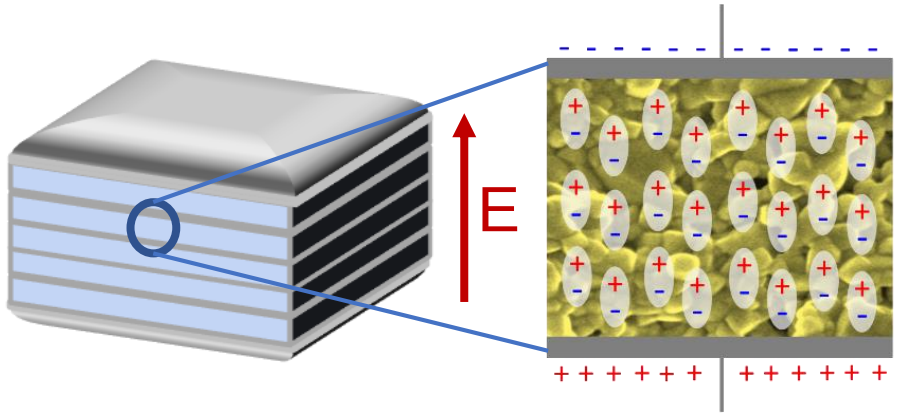


- Energiedichte erhöhen
- Miniaturisieren
- Zyklische und T-Stabilität erhöhen

Wie können wir geeignete Materialien / Bauteile zu den Anforderungen designen?

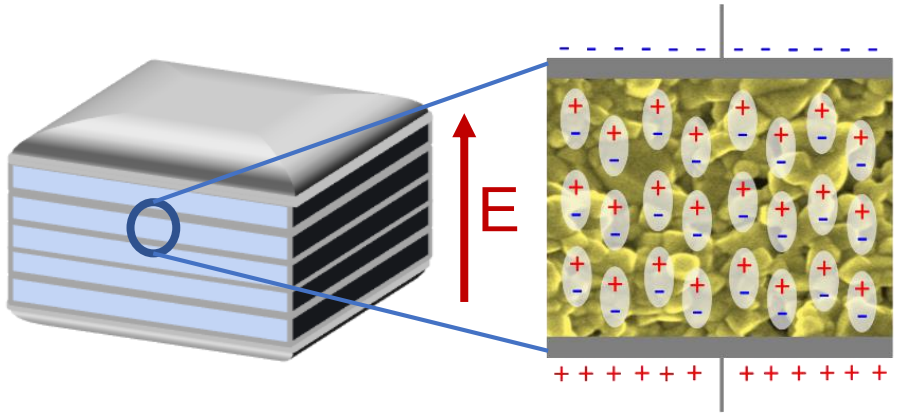
Kondensatoren als Energiespeicher

Elektrostatisches Energiespeichern

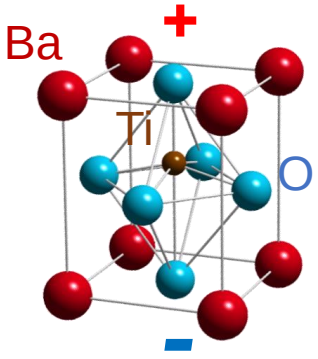


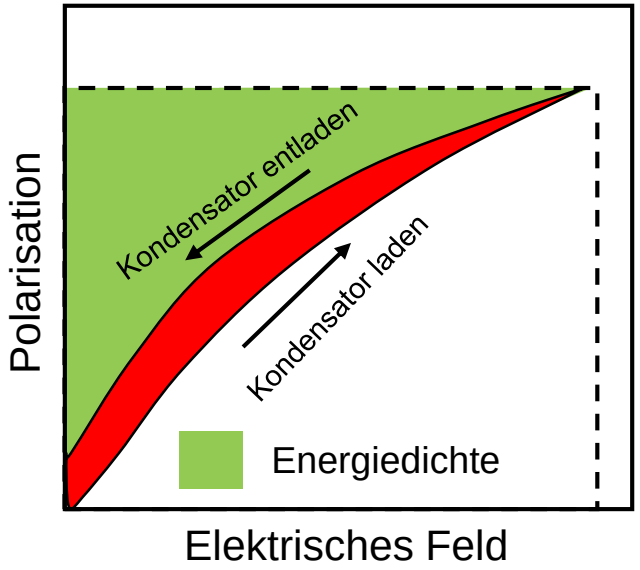
Kondensatoren als Energiespeicher

Elektrostatisches Energiespeichern



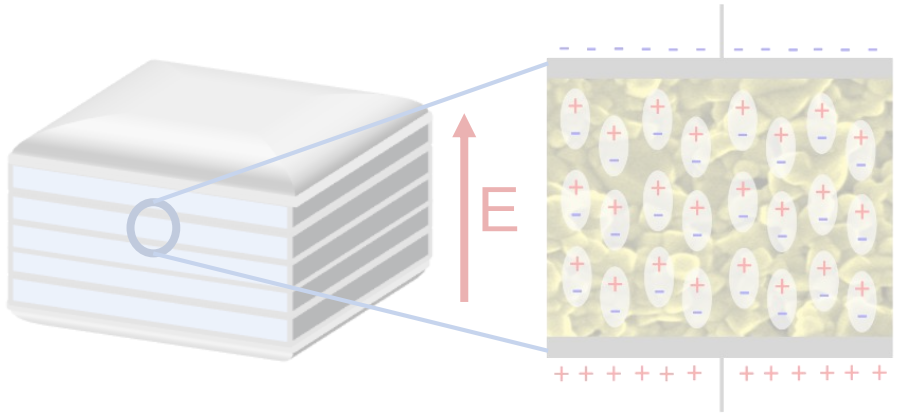
Perowskit ($BaTiO_3$) als Energiespeicher



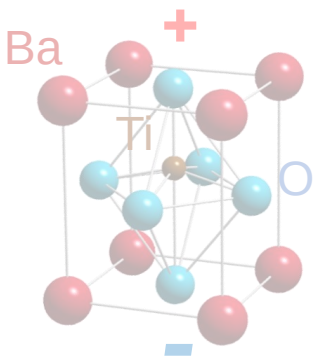


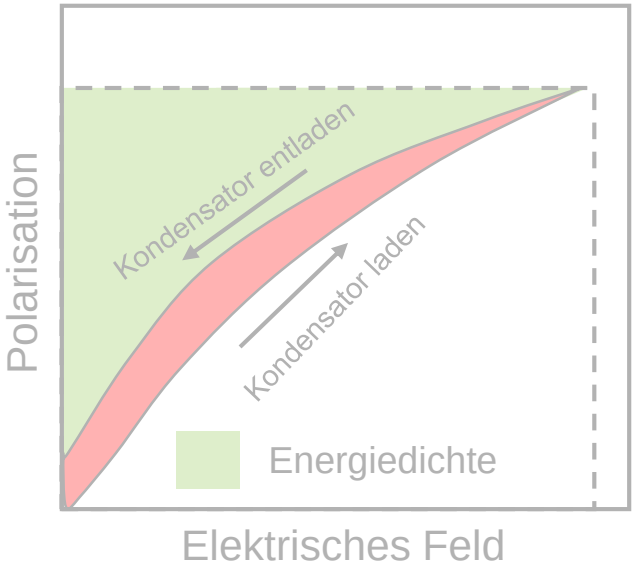
Kondensatoren als Energiespeicher

Elektrostatisches Energiespeichern

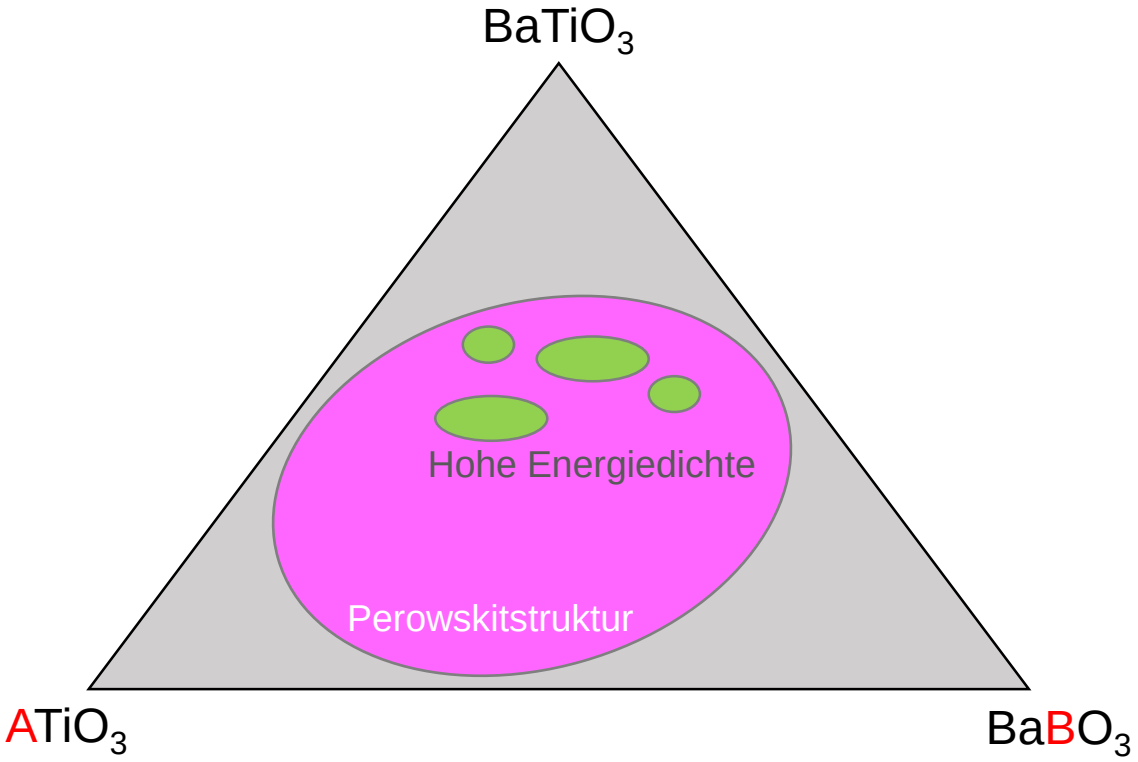


Perowskit ($BaTiO_3$) als Energiespeicher





Durch chemische Substitution die Energiedichte erhöhen



A – über 30 Elemente

B – über 30 Elemente

Über 100.000 Materialkombinationen!!

Gewünschte Eigenschaften identifizieren

Suchraum definieren & managen

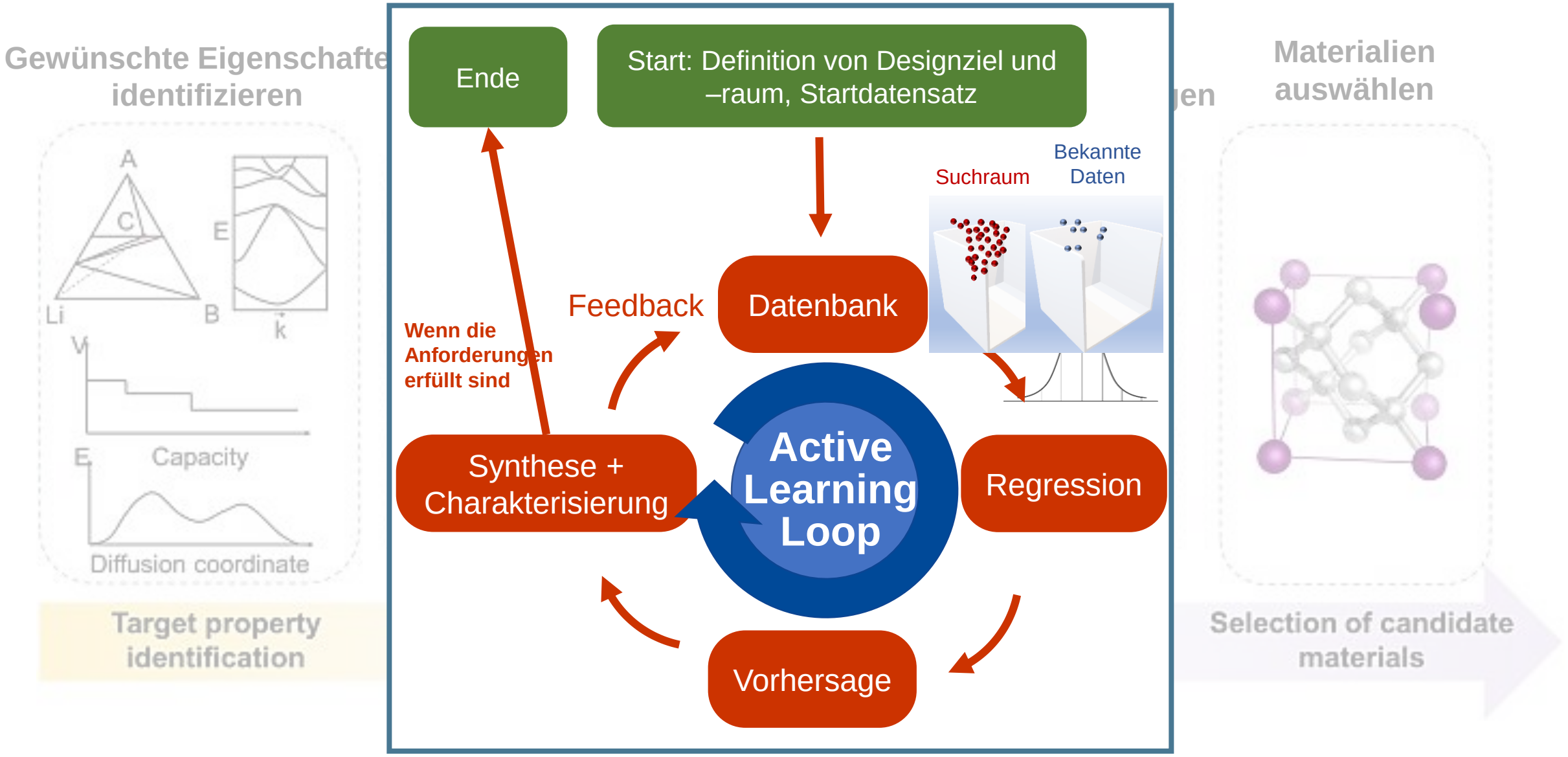
Eigenschaften durch Berechnungen vorhersagen

Materialien auswählen

https://doi.org/10.1016/j.matre.2021.100047

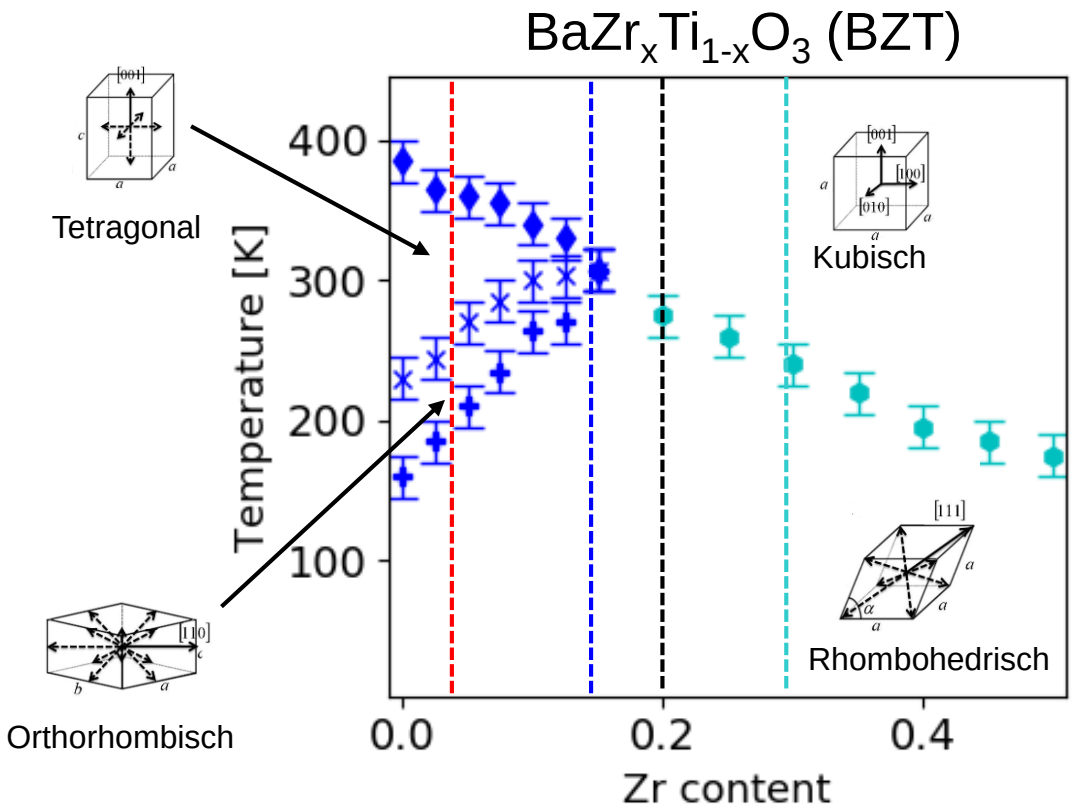
Computergestütztes Materialdesign

„Active Learning Loop“

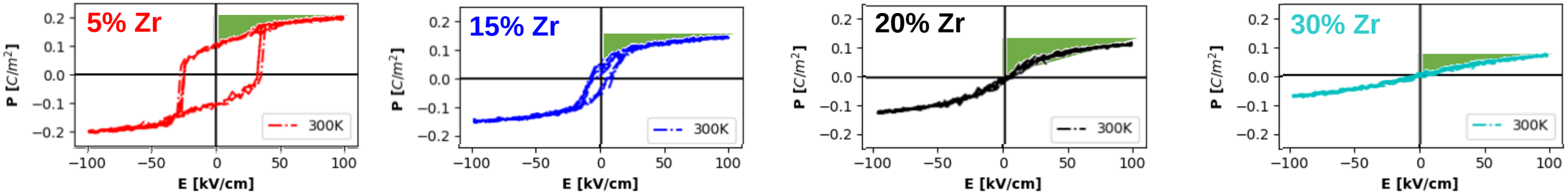


Beispiel Molekulardynamik

Modelliertes Phasendiagramm für $BaZr_xTi_{1-x}O_3$



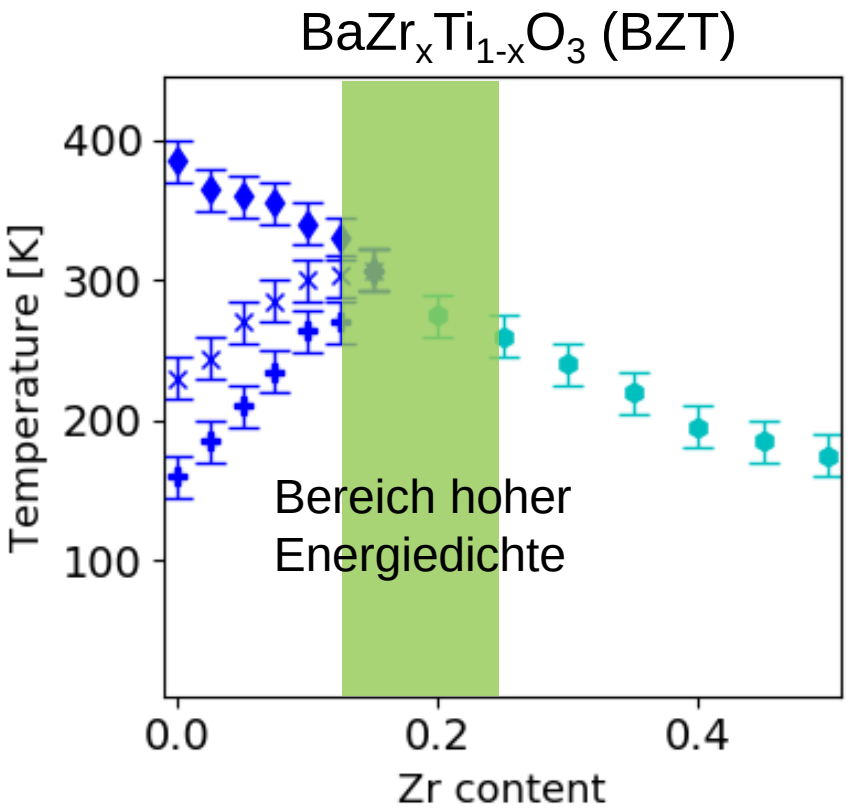
= Energiedichte



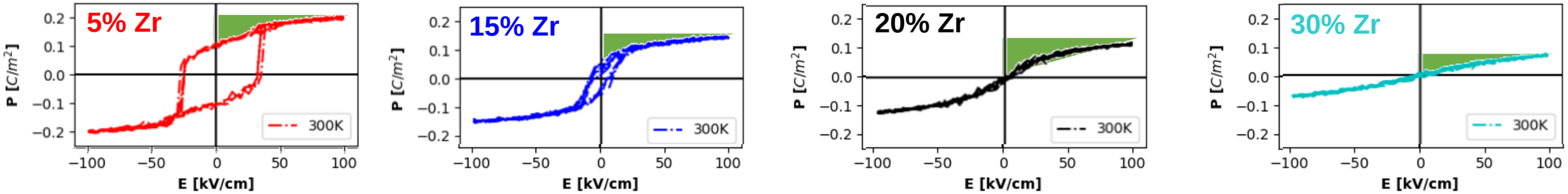
F. Mayer et al., PRB 106, 224109 (2022)

Beispiel Molekulardynamik

Modelliertes Phasendiagramm für $BaZr_xTi_{1-x}O_3$



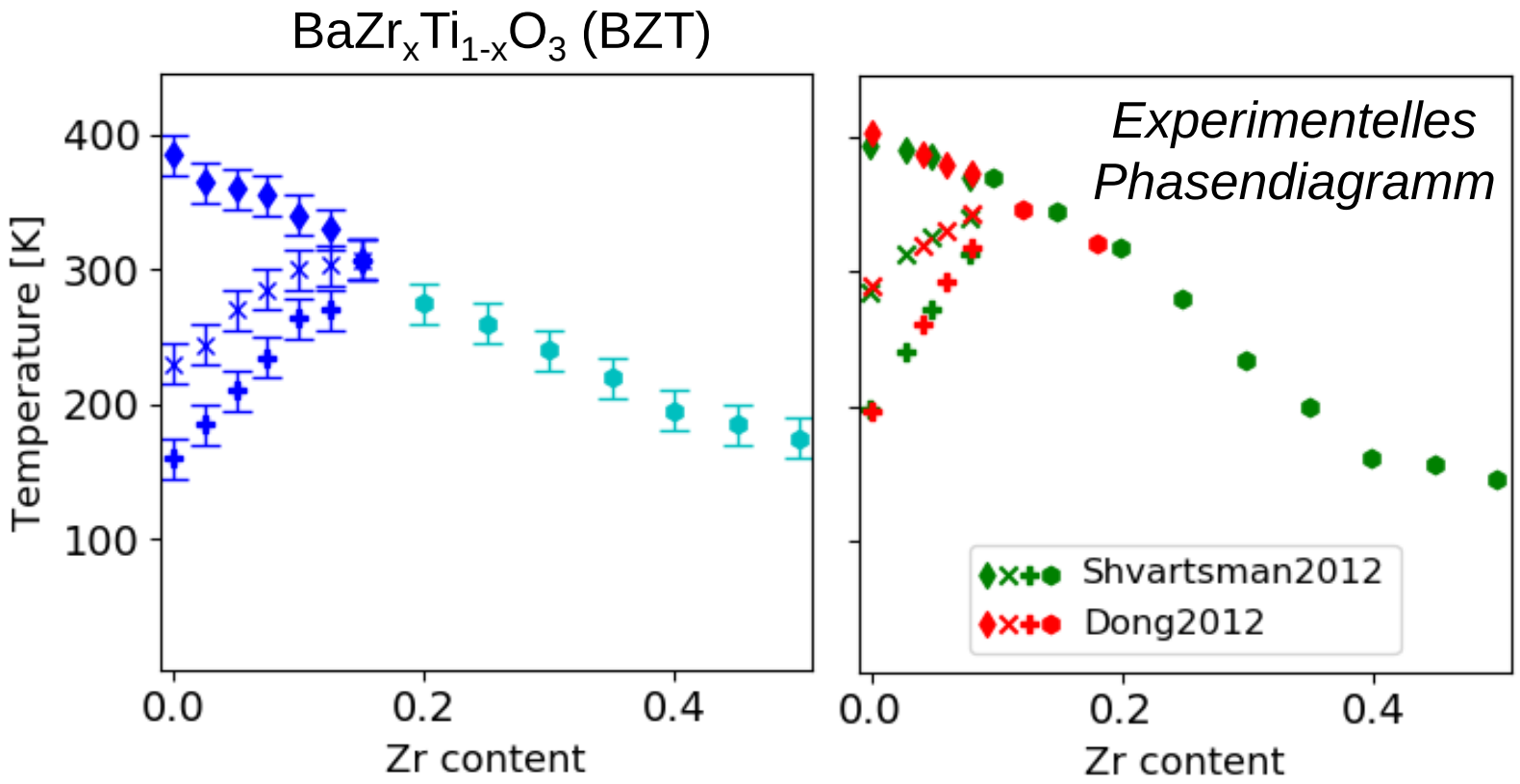
= Energiedichte

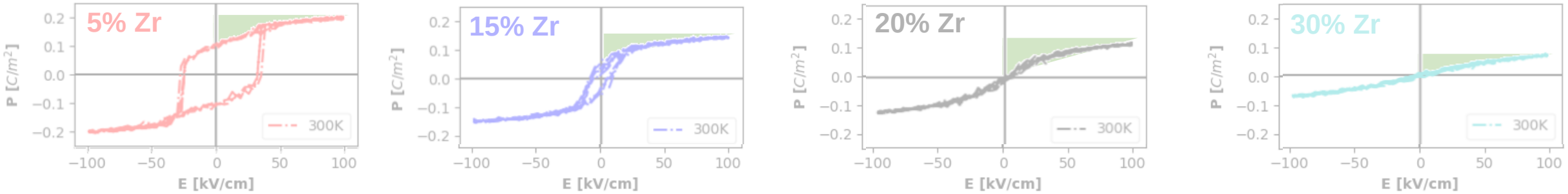


F. Mayer et al., PRB 106, 224109 (2022)

Beispiel Molekulardynamik

Modelliertes Phasendiagramm für $BaZr_xTi_{1-x}O_3$





F. Mayer et al., PRB 106, 224109 (2022)

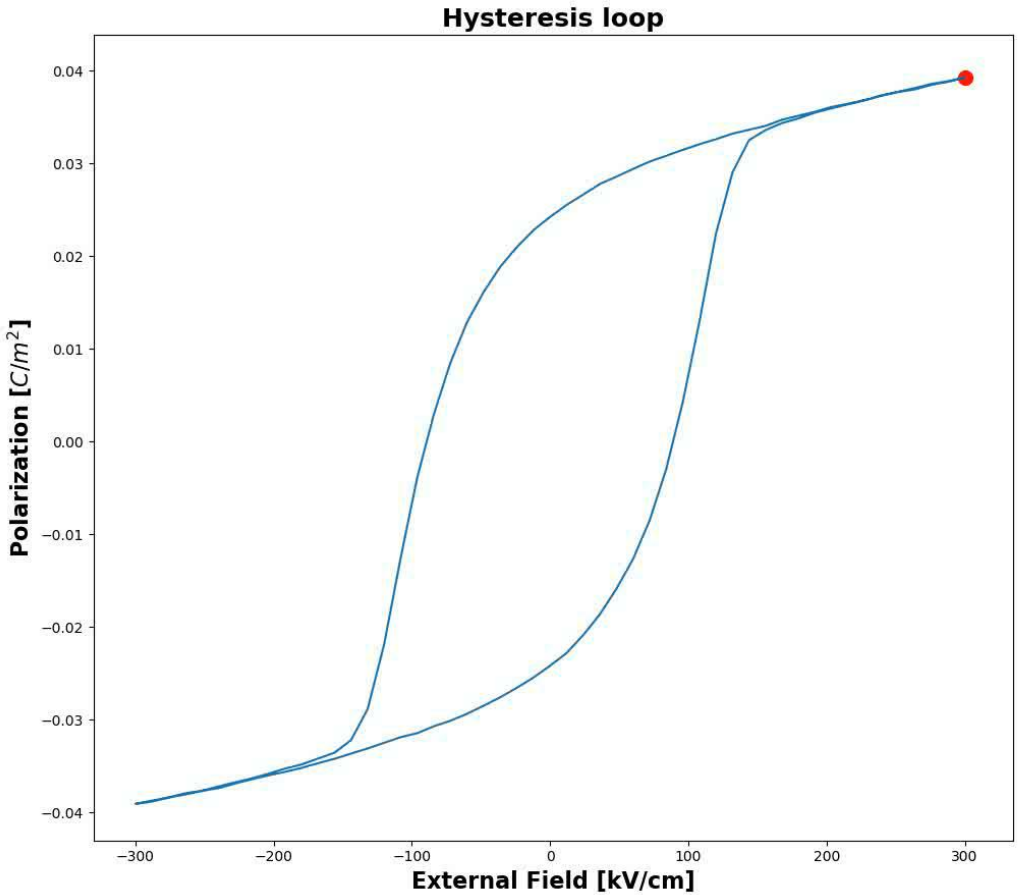
Beispiel Molekulardynamik

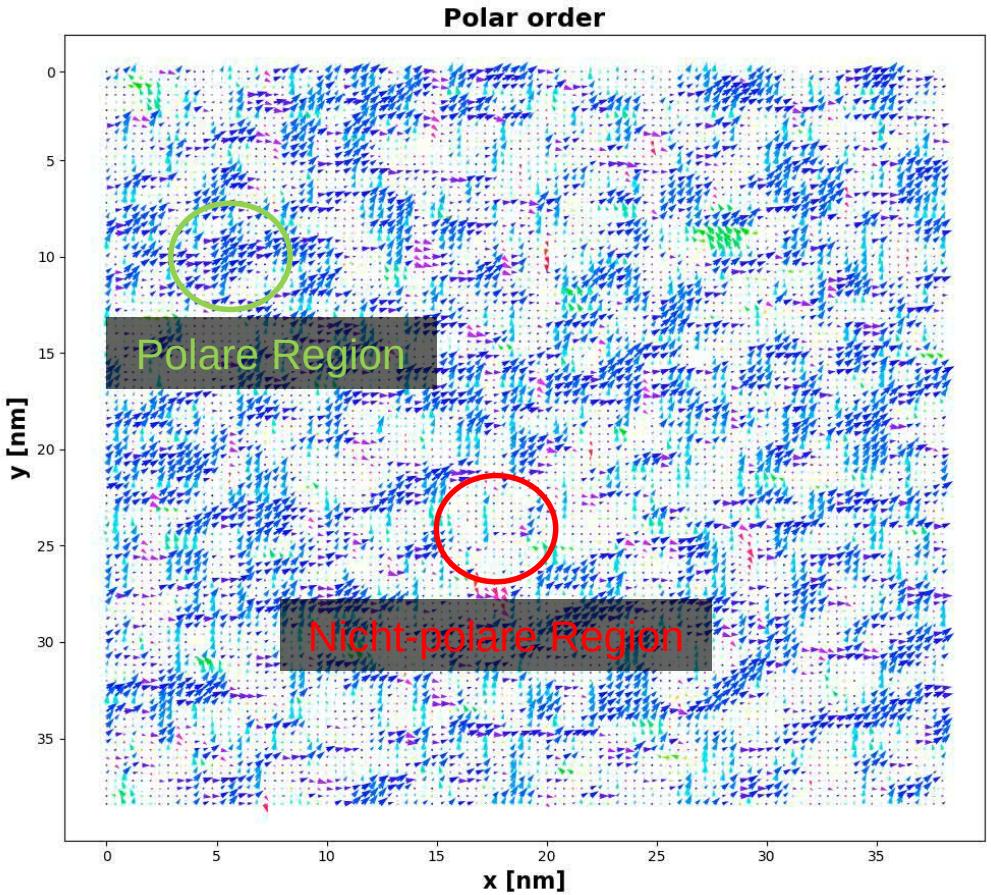
Polare Strukturen auf atomarer Ebene

Hysteresekurven und polare Ordnung

30% Zr substituiertes $BaTiO_3$ bei 50 K

96x96x96 Superzelle

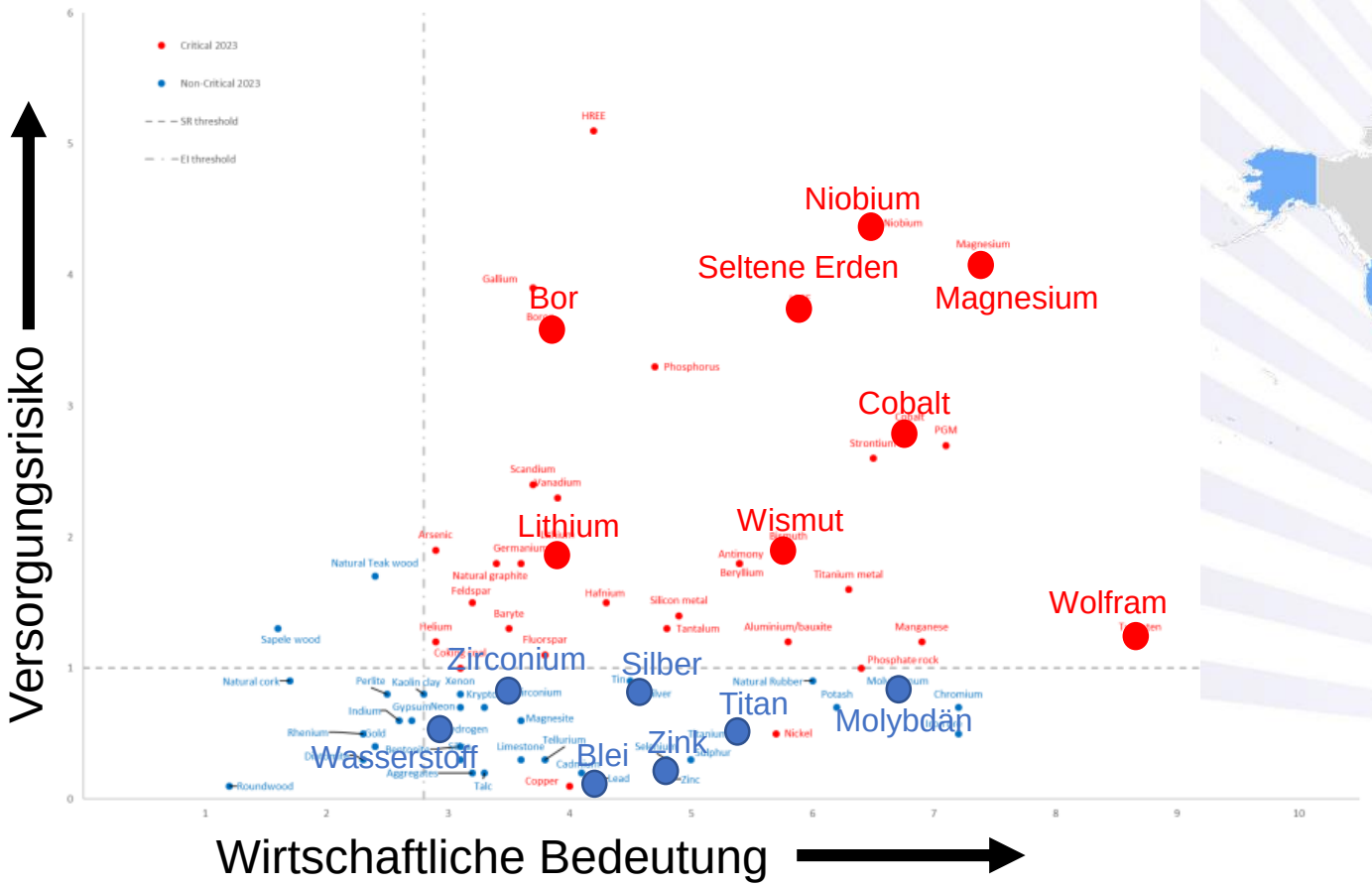


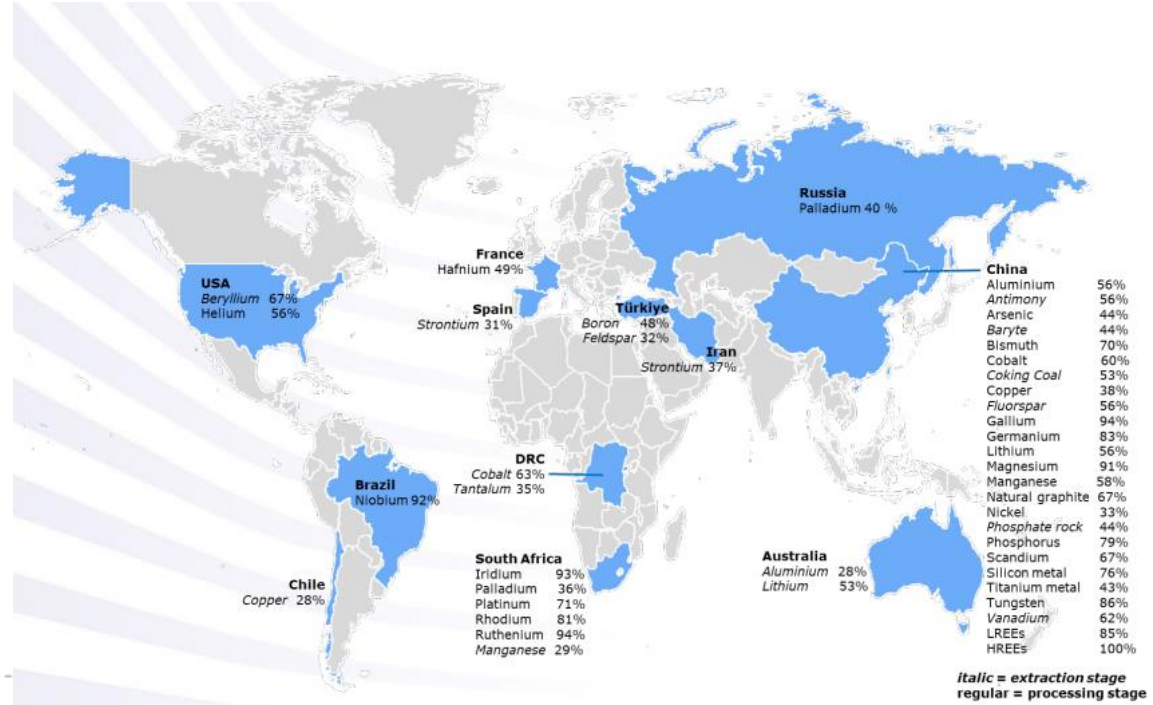


Die Pfeile stellen die Projektion der Dipolmomente auf die x-y Ebene dar und die Farben deren Winkel

Weitere Anwendungsszenarien

Ersatz von kritischen Rohstoffen



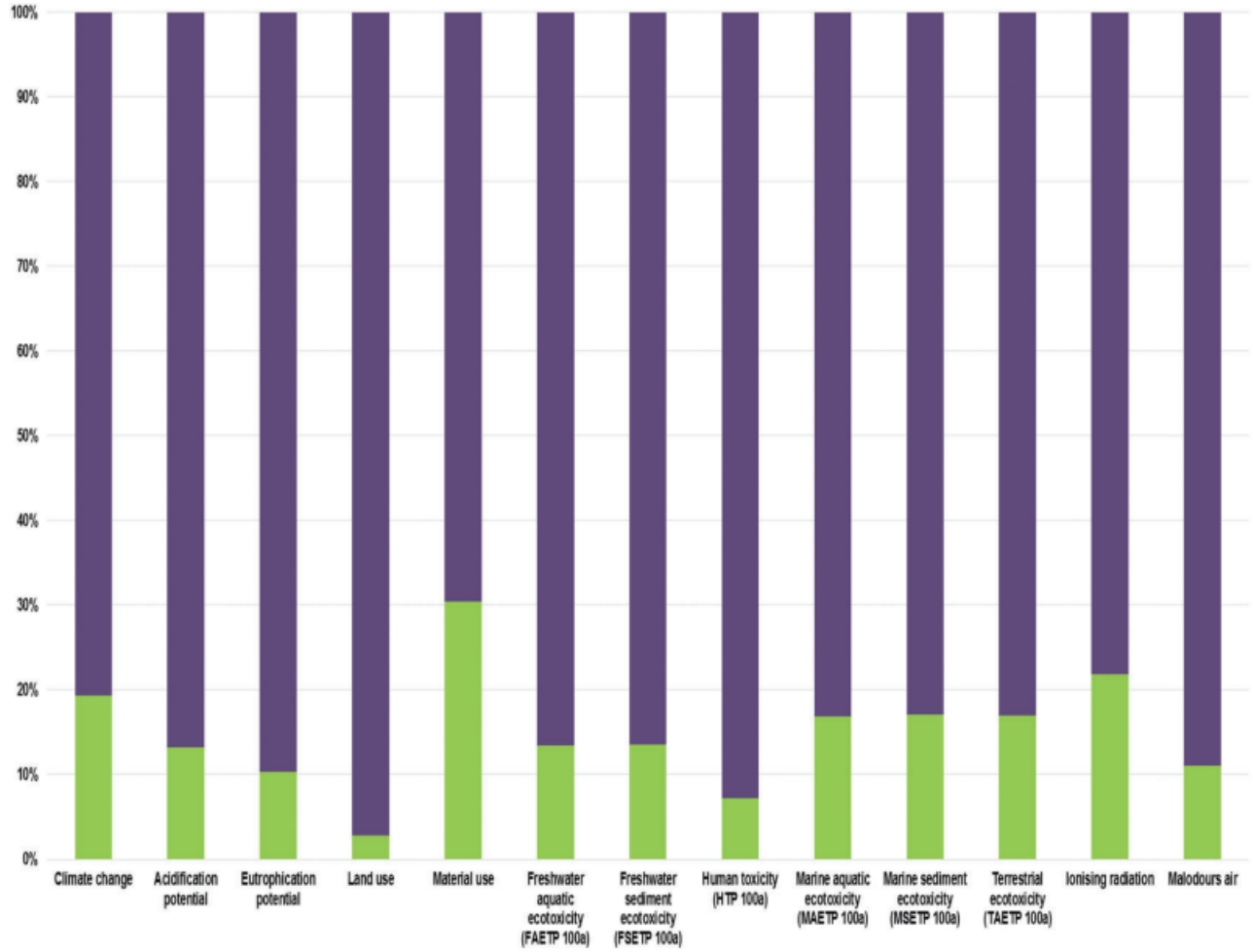


Zielsetzung: „Rote“ Rohstoffen durch „blaue“ Rohstoffe ersetzen, ohne die Materialeigenschaften zu verändern

EU Critical Raw Materials Assessment Report (2023)

Weitere Anwendungsszenarien

Ersatz von kritischen/toxischen Rohstoffen (Life Cycle Analysis)



LCA von Piezokeramiken

- $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$ (PZT)
- $K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$ (KNN)

Zielsetzung: Gleichgewicht zwischen Ersatz von „kritischen“ und „toxischen“ Rohstoffen gewährleisten

T. Ibn-Mohammed et al., Energy Environ. Sci. 9, 3495 (2016)

Ultimatives Ziel

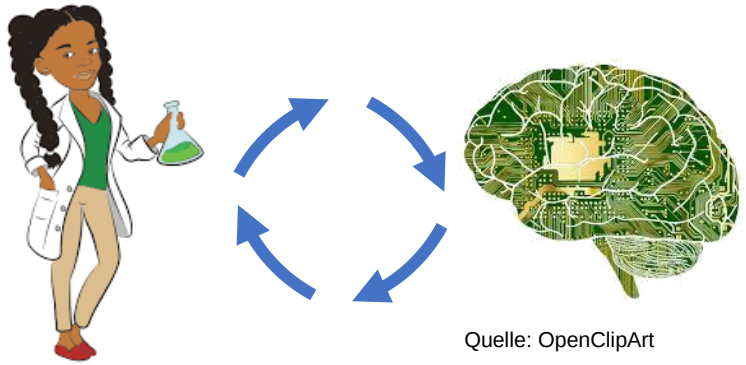
Computergestützte Materialentwicklung verbessert das Leben aller Menschen

Nachhaltige Rohstoffe

Nachhaltige Prozessbedingungen

Optimale Materialeigenschaften

Anwendungsbereiche und Spezifikationen



Quelle: OpenClipArt

Beschleunigte Materialformulierung in einem breiten Suchraum

Beschleunigte Prozessoptimierung für Materialien und Bauteile

Erhöhte Effizienz von Industrieprozessen und Senkung der Emissionen

Beschleunigte und gezielte Wiederverwendung und Rückgewinnung

Danksagung

Chemistry and interface tailored lead-free relaxor thin films for energy storage capacitors

www.erc-citres.eu

European Research Council
Established by the European Commission

This project has received funding from the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation program (grant agreement No. 817190).

FOXES

www.foxes-project.eu

An eco-friendly way to power wireless IoT devices

Horizon 2020

FOXES is a project funded by the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Programme, under grant agreement Nr. 951774.

FWF

P29563-N36
I4581-N

Der Wissenschaftsfonds.

Bundesministerium
Klimaschutz, Umwelt,
Energie, Mobilität,
Innovation und Technologie

Bundesministerium
Arbeit und Wirtschaft

FFG
Promoting Innovation.

Tirol
STANDORTAGENTUR TIROL

Das Land Steiermark
Wirtschaft, Tourismus, Wissenschaft und Forschung

SFG
NEUES DENKEN. NEUES FÖRDERN.

Partner of UAR INNOVATION NETWORK

ober österreich

The authors gratefully acknowledge the financial support under the scope of the COMET program within the K2 Center "Integrated Computational Material, Process and Product Engineering (IC-MPPE)" (Project 886385). This program is supported by the Austrian Federal Ministries for Climate Action, Environment, Energy, Mobility, Innovation and Technology (BMK) and for Labour and Economy (BMAW), represented by the Austrian research funding association (FFG), and the federal states of Styria, Upper Austria and Tyrol.

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit!

Energy Materials Team
@Sensor Solutions Group

Horizon 2020

Der Wissenschaftsfonds.

Computational Materials
Science Group

Leoben, Schwammerlturm bei Nacht

©Freisinger