



Realisierung und Analyse der strahlbasierten direkten Mischagglomeration in der Gasphase zur Bildung von Heteroagglomeraten mit neuen Eigenschaften – Phase 2

Das übergeordnete Ziel der geplanten Arbeiten besteht darin, zur Entwicklung neuer Produkte auf Basis von in der Gasphase gebildeten Heteroagglomeraten / Heteroaggregaten beizutragen, die neue Eigenschaften aufweisen. Um dieses Ziel zu erreichen, müssen gasphasenbasierte Prozesse etabliert werden, die eine kontrollierte Bildung der Agglomerate / Aggregate in ausreichender Menge und Qualität ermöglichen. Ein strahlbasierter Hetero- Agglomerationsprozess wurde in diesem Zuge von den Gruppen Kruggel-Emden (Technische Universität Berlin) und Schmidt (Bergischen Universität Wuppertal) im Rahmen der ersten Förderphase des SPP 2289 entwickelt und untersucht.

Der Prozess umfasst drei Schritte. Im ersten Schritt werden die zu mischenden Primärpartikel in einen Trägergasstrom aufgegeben und dispergiert. In einem zweiten Schritt interagieren die Trägergasströme mit den unterschiedlichen Primärpartikeln miteinander, es kommt zu Kontakt, der die Bildung von Hetero-Agglomeraten ermöglicht. In einem dritten Schritt werden die gebildeten Produkte kontrolliert aus der Agglomerationszone entfernt.

In der zweiten Förderphase wird dieses Verfahren weiterentwickelt und der Zusammenhang zwischen Prozessparametern, Agglomeratstruktur und Eigenschaften / Materialfunktionen herausgearbeitet. Dabei wird auf Festkörperbatteriematerialien als ein Beispiel für eine bestimmte Art von Hetero-Agglomeraten fokussiert. Die hierbei relevanten Kathodenmaterialien bestehen aus drei Stoffen, was nicht nur den Gasphasenprozess hin zu einem Mehrkomponentensystem erweitert, sondern auch zusätzliche Anforderungen an die Dispergierung und Mischung stellt. Ziel ist es dann, die Prozessparameter des beschriebenen Prozesses und der drei Teilprozesse im Hinblick auf die Qualität und Funktionalität der gebildeten Materialien zu untersuchen. Hierzu werden diese auf ihre elektrochemischen Eigenschaften hin untersucht und die Struktur der enthaltenen Hetero-Agglomerate beurteilt, um sie mit den zuvor genannten Eigenschaften in Beziehung zu setzen. Dabei wird eine Prozessintensivierung angestrebt, indem durch gezielte triboelektrische Aufladung der Primärpartikelsysteme und Erzeugung eines elektrischen Feldes eine elektrostatische Trennung unerwünschter Homo-Agglomerate realisiert wird.

Der gasphasenbasierte Heteroagglomerationsprozess wird parallel zu experimentellen Untersuchungen mithilfe eines DEM/CFD-Ansatzes zur Modellierung der Agglomeration in inhomogener, isotroper Turbulenz nachgebildet und analysiert, während auch die Prozessintensivierung basierend auf Aufladung und elektrostatischer Trennung modelliert wird. Darüber hinaus wird die Analyse der elektrochemischen Eigenschaften der hergestellten Hetero-Agglomerate auch simulativ anhand eines voxelbasierten 3DMikrostrukturmodells abgebildet, um Prozessparameter in den Simulationen mit den zugehörigen Materialfunktionen und der Agglomeratstruktur zu verknüpfen und damit auch den Vergleich Experiment und Simulation zu erlauben.