CEMPER

Correlative Chemical, Electrical, and Mechanical Properties of operational Energy-Related materials

Programm / Ausschreibung	F&E Infrastruktur, F&E Infrastrukturförderung 4. Ausschreibung 2022/01	**Status**	laufend
Projektstart	01.10.2023	**Projektende**	30.09.2026
Zeitraum	2023 - 2026	**Projektlaufzeit**	36 Monate
Keywords	Energy materials; Interface chemistry; chemo-mechanical properties; cryogenic-characterization		

Projektbeschreibung

Leistung, Effizienz und/oder Lebensdauer von Materialien zur Energiespeicherung und -umwandlung sowie von ressourceneffizienten Strukturmaterialien hängen von einer Vielzahl physikalischer und chemischer Parameter ab, deren gegenseitige Wechselwirkung jedoch noch unerforscht sind. Um etwa die mechanisch-chemischen Inkompatibilitäten von Grenzflächen in Li-basierten Batterien experimentell zu bewerten, muss die Chemie von Grenzflächen auf atomarer Ebene untersucht werden. Dies geschieht im komplexen Zusammenspiel mit variablen Versuchsbedingungen und unterschiedliche Längenskalen müssen berücksichtigt werden. Diese Anforderungen erfordern den Einsatz einzigartiger in-situ- und in-operando-Prüfmethoden, die sowohl auf der Nanometer- als auch Mikrometer-Skala eingesetzt werden, bei gleichzeitiger Kontrolle der extremen Umweltbedingungen. Idealerweise handelt es sich dabei um fortschrittliche Multiskalen-Elektronenmikroskopie und Atomsonden-Tomographie (APT). Untersuchungen in diesem Maßstab sind nach wie vor limitiert, da Standardtechniken diese empfindlichen Grenzflächen in der Regel zerstören. Zwar haben führende internationale Universitäten vor kurzem gezeigt, dass die Kryo-Mikroskopie es ermöglicht, diese Beschränkung zu umgehen, doch eine echte Multiskalen-Untersuchung, die eine Korrelation zwischen Mikrostruktur, Chemie, elektrischen und nanomechanischen Eigenschaften in einsatzfähigen Energiesystemen ermöglicht, bleibt bis dato eine Vision.

Durch die Kombination von hochentwickelten einsatznahen Mikroskopietechniken mit innovativen Test- und Analysemethoden, die am Erich Schmid Institut für Materialwissenschaften entwickelt werden, und der einzigen APT in Österreich an der Montanuniversität Leoben, kann das korrelative Umwelt- und Funktionsverhalten von Energiesystemen, flexibler Elektronik, Magneten und energieeffizienten Strukturmaterialien grundlegend untersucht werden. Dies kann aber nur mittels geeigneter Kryo-Transfertechnologien gelingen. Geplant ist daher die Anschaffung eines kryogenen FIB-Arbeitsplatzes mit chemischen (Sekundärionen-Massenspektroskopie - SIMS, energiedispersiver Spektroskopie - EDS), mikrostrukturellen (Elektronenrückstreubeugung - EBSD), mechanischen und elektrischen Sonden sowie das dazugehörige kryogene Transfersystem zur Anbindung an andere hochauflösende Einrichtungen (Transmissionselektronenmikroskopie - TEM, und APT). Diese außergewöhnliche Kombination aus kryogener struktureller und chemischer Materialanalyse, gepaart mit lokaler Modifikation und mechanischer Prüfung, ermöglicht eine einzigartige in-operando-Analyse zahlreicher physikalischer und chemischer Parameter mit einer bisher nicht gekannten Genauigkeit, welche für Energiematerialien von

entscheidender Bedeutung ist.

Diese Infrastruktur wäre die erste ihrer Art in Österreich und ist für die in-situ oder in-operando Erforschung funktioneller Multimaterial-Hybridsysteme (Batterien, flexible Elektronik, Brennstoffzellen) und struktureller Materialien auf der Nano- und Mikroskala unerlässlich. So wird es beispielsweise möglich sein, die thermo-elektro-chemo-mechanischen Prozesse innerhalb einzelner Elektroden und Separatoren sowie die Grenzflächen zwischen den Komponenten während des Betriebs (Lithiierung, H-Einbau) auf Mikro- und Nanoskala zu untersuchen.

Die neue Arbeitsstation würde ein einzigartiges Zentrum für fortgeschrittene in-situ, in-operando Multi-Parameter Studien darstellen. Zusätzlich wird die Kombination von Kryo-FIB mit SIMS und einem Kryo-Transfersystem es ermöglichen, die APT vollständig für die korrelative hochauflösende Mikroskopie von Energiematerialien und Grenzflächen zu nutzen. Es wird erwartet, dass die Verknüpfung dieser einzigartigen Kombination von Instrumenten durch Vakuum- und Kryo-Transfersysteme und des vorhandenen Fachwissens in Leoben nicht nur ein weltweit führendes Zentrum für Energiematerialien in Österreich etabliert, sondern auch dazu beiträgt langlebigere und effizientere Energiespeichersysteme zu entwickeln.

Abstract

Performance, efficiency and/or lifetime of energy storage and conversion materials, as well as any resource efficient structural materials, depend on a variety of physical and chemical parameters, but their mutual interplay and influence remain unexplored. For example, to experimentally assess mechano-chemical interfacial incompatibilities within Li-based batteries, the atomistic chemistry of interfaces or grain boundaries must be considered in concert with a complex multi-parameter set of varying experimental conditions and involved length scales. This requires the use of unique in-situ and in-operando testing methods that must simultaneously operate at the nano- and microscales and are best studied using advanced multi-scale electron microscopy and atom probe tomography (APT) methods with extreme environmental control. Investigations at this scale remain limited because standard techniques typically destroy these delicate interfaces. While it was recently demonstrated by leading international universities that cryo-microscopy allows to circumvent this limitation, a true multiscale investigation enabling to correlate microstructure, chemistry, electrical and nanomechanical properties in operational energy systems remains a vision.

By combining sophisticated environmentally controlled microscopy techniques with innovative testing and analytical methods being developed at the Erich Schmid Institute of Materials Science with the only APT in Austria at the Montanuniversität Leoben via adequate cryo-transfer technologies, the correlated environmental and functional behavior of energy systems, flexible electronics, magnets, and energy efficient structural materials can be thoroughly studied. The planned acquisition is a cryogenic environmental focused ion beam (FIB) workstation with chemical (secondary ion mass spectroscopy – SIMS, energy dispersive spectroscopy – EDS), microstructural (electron backscatter diffraction – EBSD), mechanical and electrical probes, as well as the related cryogenic transfer system for connecting to other high resolution facilities (transmission electron microscopy – TEM, and APT). Such an exceptional combination of cryogenic structural and chemical material analysis, paired with local modification and mechanical stimulus, uniquely enables in-operando analysis of multiple physical and chemical parameters critical for energy materials with unseen fidelity.

This infrastructure would be the first of its kind in Austria and is essential to explore functional multi-material hybrid systems

(batteries, flexible electronics, hydrogen power cells) and structural materials in-situ or in-operando at the nano- and microscales. For example, it will enable to study the thermo-electro-chemo-mechanical processes within individual electrodes and separators as well as the interfaces between components during operation (lithiation, H incorporation) at micro- and nanoscales.

The new workstation would allow for a unique center for advanced multi-parameter in-situ, in-operando, and chemical characterization. Additionally, the combination of cryo-FIB with SIMS and a cryo-transfer system will allow the APT, to be fully incorporated for correlative high resolution microscopy of energy materials and interfaces. It is expected that linking the unique combination of instrumentation and expertise in Leoben through vacuum and cryo-transfer systems would not only establish a world-leading center for energy materials in Austria, but also help to develop more durable and efficient energy storage systems.

Projektpartner

- Österreichische Akademie der Wissenschaften Erich Schmid Institut für Materialwissenschaft (ESI)