

## StressLIC

Addressing the stress-related functional limitations of thin-film Li-ion components for energy-intensive applications

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Produktion der Zukunft, Produktion der Zukunft, 26. AS PdZ transnationale Projekte 2018	<b>Status</b>	abgeschlossen
<b>Projektstart</b>	01.03.2019	<b>Projektende</b>	28.02.2023
<b>Zeitraum</b>	2019 - 2023	<b>Projektlaufzeit</b>	48 Monate
<b>Keywords</b>	Lithium Battery, Stress, Multilayer, Safety		

### Projektbeschreibung

In den vergangenen Jahrzehnten hat sich die spezifische Kapazität von Lithium-Ionen-Batterien (LIBs) stetig um etwa 10%/Jahr gesteigert. Damit LIBs fossile Brennstoffe in der Automobilindustrie ersetzen können, ist eine Entwicklung von weiteren 500% erforderlich. Weil die Herstellung von LIBs mit größerem Volumen ist für die Elektrifizierung von Automobilen und weiteren energie-intensiven Anwendungen nicht möglich und zielführend ist, steht eine Revolution bezüglich der Kapazität und der Leistung von LIBs an. Einen großen Einfluss auf die Funktionsspezifikationen haben die elektrochemischen, intrinsischen und geometrischen Spannungen. Um zukünftig effizientere LIB für leistungsintensive Anwendungen herstellen zu können, müssen diese Effekte beschrieben werden. Dies ist die Basis für die Entwicklung von innovative Lösungen zur Steigerung der funktionalen Grenzen.

Das Ziel dieses kollaborativen Projektes ist (i) die Charakterisierung von elektrochemischen Reaktionen und der Eigenspannungsverteilung über den Querschnitt von LIB Komponenten, (ii) die Modellierung der Eigenschaften über den Querschnitt mittels neuartigen numerischen Näherungsverfahren und in weiterer Folge (iii) die Entwicklung von innovativen Batteriestrukturen, mit einer erhöhten Speicherfähigkeit und Sicherheit. Zusätzlich werden neuartige Verfahren zur in-operando Untersuchung von LIB entwickelt.

Im Unterschied zu bisherigen Forschungstätigkeiten, in welcher makroskopische Eigenspannungen bestimmt wurden, werden im Rahmen dieses Projekts erstmalig eigenspannungsbestimmende Mechanismen im Nanometer-Regime untersucht. Somit liegt das Auflösungsvermögen der geplanten Versuche weit über jene der in der Industrie und Universitäten verwendeten Standarduntersuchungsmethoden. Eine Reihe der im Projekt verwendeten hochauflösenden Messmethoden wurde erst kürzlich von Antragstellern entwickelt. Folglich wird die Spannungsentwicklung in Lithium Elektroden sowohl im statischen Fall als auch während des Lade- und Entladungszyklus sowie während mechanischen Belastungen bestimmt. Die Experimente werden an Modellstrukturen und an industriellen Mehrlagensystemen unter Laborbedingungen durchgeführt. Dadurch sollen Mikrostrukturentwicklung und die Spannungsänderungen ex-situ und in-operando gemessen und mit den funktionalen Eigenschaften korreliert werden.

Drei anerkannte europäische Forschungsgruppen, jeweils führend im Bereich „Nanostrukturierung und Spannungscharakterisierung im Nanometerbereich“, arbeiten in diesem Projektantrag eng zusammen um die eigenspannungsverursachten Limits von LIB Komponenten zu untersuchen. Dieses Konsortium inkludiert mit Sandia National

Lab auch einen US-amerikanischen Partner, welcher als Experte für die Produktion von Lithium-Ionen Elektroden mehrlagige Modellstrukturen als Probenmaterial zur Verfügung stellen wird. Zusätzlich gehört AVL Graz, als ein anerkannter Industriepartner im Bereich Charakterisierung, Modellierung und Optimierung von LIB dem Projektkonsortium an. AVL wird das Projekt sowohl beratend sowie als Gesprächspartner mit der europäischen Industrie unterstützen. Es wird angestrebt, dass das derzeitige TRL vom jetzigen TRL1 gegen Ende des Projektes zu TRL4 weiterentwickelt wird.

## **Abstract**

The stored energy density (specific capacity) of lithium-ion batteries (LIBs) has increased slowly over the past decade, at a rate of approximately 10%/year. In contrast, a 500% gain is needed for LIBs to replace fossil fuels in the automotive industry. Building higher-volume LIBs is not possible for electric cars and other energy-intensive applications due to cost and weight; a revolution in battery capacity and power is needed. The LIBs components are subject to electrochemical stress, intrinsic stress and geometric stress. These phenomena cause the electrochemical reaction to be self-limited. In short, stress effects reduce the amount of drainable charge and the stored energy density. In order to produce a new generation of efficient and economical batteries suitable for energy-intensive devices, it is necessary to investigate these stress-related phenomena in detail and propose innovative engineering solutions that overcome current functional limitations.

The aims of this collaborative project are (i) to characterize cross-sectional stress, microstructure and electrochemical processes in LIBs components, (ii) to model their cross-sectional behavior using novel numerical approaches, and, over the long term, (iii) to develop design strategies for battery multilayered structures with increased storage capacity and improved safety. Additionally, novel experimental methods for the in-operando characterization of LIBs will be developed.

Unlike previous research concerned with measuring the macroscopic stress in batteries by mechanical tests, a novel feature of this project is to carry our experiments sensitive to the spatial scale of the features and processes involved in generating intrinsic, geometric and electrochemical stress. This scale (nanometer) is well below the resolution of all standard characterization techniques for thin films used in academia and industry. A series of nanoscale technologies recently developed by the proposers will be used to investigate the stress phenomena within Li-electrodes and separators in the static state, during charging and discharging cycles, and during tensile and bending tests. The experiments will be performed on model and industrial battery multilayered systems, under lab conditions and at European synchrotron facilities. The motivation is to characterize ex-situ and in-operando microstructural and stress changes, and correlate them with the batteries' functional properties.

Three pioneering EU research groups, each one a leader in the field of "nanostructuring and stress characterization at nanoscale", are joining forces in this proposal to investigate and understand the stress-related limitations of LIBs components. The consortium also includes a US partner at Sandia National Lab, who is expert in the preparation of Li-ion film electrodes and will provide model multilayered systems. Additionally, AVL Graz, a recognized industrial partner working in the field of multiscale characterization, modeling, safety, and optimization of LIBs, will join the consortium. AVL Graz will be our adviser and interlocutor with the European industry. The actual TRL is considered as TRL1 and will reach TRL4 at the end of the project.

## **Projektkoordinator**

- Montanuniversität Leoben

## **Projektpartner**

- AVL List GmbH