

## SOLIMEC

Enhancing the mechanical stability of interfaces in solid-state Li-ion batteries for energy-intensive applications

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Mobilität der Zukunft, Mobilität der Zukunft, MdZ M-EraNet Ausschreibung 2021	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.05.2022	<b>Projektende</b>	31.10.2025
<b>Zeitraum</b>	2022 - 2025	<b>Projektlaufzeit</b>	42 Monate
<b>Keywords</b>	solid state batteries; mechanical stability; interfaces; mechanical stress		

### Projektbeschreibung

Festkörper-Li-Ionen-Akkus (SSLB) haben das Potenzial eine neue Generation kommerzieller Technologien mit Energie- und Leistungsdichteanforderungen anzutreiben. Durch Verwendung metallischer Li-Anoden können wir erwarten, die gespeicherte Energie ohne Gewichts- oder Volumszunahme zu erhöhen. SSLBs erreichen schnelle Li Leitung mittels fester Elektrolyte, deren Ionenleitfähigkeiten zu flüssigen Elektrolyten vergleichbar sind.

Trotz dieser aussichtsreichen Eigenschaften, schränken entscheidende Herausforderungen den praktischen Einsatz von SSLBs ein. Die mechanische, chemische und thermodynamische Instabilität der Grenzflächen (GF) ist eine davon. Hochtemperaturesintern von SSLBs führt in der Regel zum GF-Verfall durch induzierte GF-Reaktionen, Interdiffusion, Segregation Li-arter Phasen und/oder GF-Rekonstruktion. Es gibt einige Teillösungen zur Stabilisierung der GF in Dünnschicht-basierten SSLBs, etwa (1) energieintensive Abscheideverfahren (z.B: Pulsed Laser Deposition, PLD), welche konformale GF mit guter Haftung erzeugen können, ohne hohe Temperaturen zu erfordern; und (2) die Einführung inorganischer Li-permeabler Zwischenschichten, die Interdiffusion blockieren. Diese Lösungen bieten Materialkontinuität, kristalline Kohärenz, und GF-Steifigkeiten, die für niedrige Leistungen ausreichen. Jedoch treten für hochleistungs-SSLBs ernsthafte Probleme auf, da dort die schnelle Leitung großer Mengen an Li-Ionen Eigenspannungen erzeugt, was infolge unterschiedlicher chemischen Ausdehnungskoeffizienten (AK) der Bestandteile zu mechanischer Ermüdung führt. Fünf europäische Forschungsgruppen (UAM, MUL, SAS, NTNU und CSIC), Experten für SSLBs, Dünnschicht-, Spannungs- und Oberflächenforschung, vereinen hier ihre Kräfte mit einem großen Industrieunternehmen (AVL), um Lösungen zu entwickeln, die SSLBs brauchbar für energieintensive Anwendungen machen. Das soll mittels einer Kombination technischer Verfahren, sowie gezielt ausgelegter Kompositkathoden geschehen. Diese Kathoden sollen durch Mischung kathodischer Oxide mit gegensätzlichen AK hergestellt werden, mittels verschiedener Mischgeometrien aus der Kombination von Mechanofusion, keramischer Technologien und PLD. Das Ziel der Verfahren ist die Erzeugung mechanisch stabiler GF zwischen Kompositkathode und Festelektrolyt, durch Steuerung der Rauigkeit, Textur und des Spannungsprofils auf der Startoberfläche. Die GF-Eigenschaften sollen mittels fortschrittlicher Analyseverfahren untersucht werden. Gefüge- und Spannungsveränderungen über den Querschnitt der Akku-Lamine während elektrochemischer Prozesse sollen mittels in-situ operando SAXS und WAXS untersucht werden. Finite-Elemente Analyse soll sowohl zur Systemoptimierung, sowie zur Eigenschaftsvorhersage fürs Experimentdesign eingesetzt werden. Der Industriepartner wird unsere Lösungen anhand ihrer

industriellen Verwertbarkeit anleiten und als Ansprechpartner für die europäische Industrie auftreten. Das Projekt wird Grundlagen- und angewandtes Wissen liefern, mit praktischen Konsequenzen für große Industriezweige (TRL 1-3), sowie Bewertungen bestehender Lösungen (TRL 3-4) und Machbarkeitsnachweise innovativer Lösungen (TRL 3-4). Dieses Projekt will die EU zur Spitze in Forschung und Entwicklung der Li-Ionen Akkus der nächsten Generation hinbewegen, geeignet für Hochenergie- und -leistungsanwendungen, entsprechend der europäischen Strategie zur Dekarbonisierung.

## **Abstract**

Solid-State Li batteries (SSLB) have the potential to power a new generation of commercial technology with high energy density and power requirements. By using Li metal anodes, we can expect to increase stored energy without adding weight and volume. SSLBs achieve fast Li conduction with solid electrolytes that have ion mobilities comparable to liquid electrolytes.

Despite these promising features, some key challenges still limit the practical uses of SSLBs. One is the mechanical, chemical, and thermodynamic instability of the interfaces. High-temperature sintering of SSLBs results usually in degradation of the interfaces by inducing interfacial reactions, interdiffusion, segregations of Li-poor phases and/or interface reconstructions. Some partial solutions exist to stabilize the interfaces of thin-film based SSLBs, such as: (1) energetic deposition techniques (such as Pulsed Laser Deposition, PLD) can create conformal interfaces with good adhesion without the need for high temperatures; and (2) the insertion of inorganic bonding layers that are Li-permeable while blocking interdiffusion. These solutions provide material continuity, crystalline coherence, and interface stiffness good enough for low-power devices. However, serious problems arise for high-power SSLBs, where fast conduction of large amounts of Li-ions generates intrinsic stress, resulting in mechanical fatigue due to the different chemical expansion coefficients of the components.

Five European research groups (UAM, MUL, SAS, NTNU and CSIC), experts in SSLBs, thin-film, stress, and surface science, are joining forces with a large industrial company (AVL) to develop solutions that make SSLBs viable for energy-intensive applications. These solutions will be found by combining a wide range of interface engineering procedures with ad hoc designed composite cathodes. The composite cathodes will be prepared from blends of cathodic oxides having opposite expansion coefficients. We will prepare different blending geometries by combining mechanofusion, ceramic procedures, and PLD. The engineering will be aimed to create a mechanically stable interface between the composite cathode and the solid electrolyte, by controlling the roughness, texture, and stress profile on the starting surface. The properties of the interfaces will be investigated by several advanced characterization techniques. The characterization of morphological, structural, and mechanical changes across the battery laminates during electrochemical processes will be studied by in-situ operando SAXS and WAXS. Finite Element Analysis will be performed both to optimize the prepared systems and to furnish predicted properties to inform experimental designs. The industrial partner will guide our solutions based on industrial viability and will act as advisor and interlocutor with the European industry. The project will generate fundamental and applied knowledge with practical implications for major industries (TRL 1-3), assessment of previous technological solutions (TRL 3-4), and proofs of concept for innovative solutions (TRL 3-4). This project intends to push the EU to the forefront of research and development on next-generation Li-ion batteries, suitable for energy-intensive and high-power applications, in line with the European decarbonisation strategy.

## **Projektkoordinator**

- Montanuniversität Leoben

## Projektpartner

- AVL List GmbH