

## OCULUS

Operando Techniques for Conversion Reaction Engineering in High-Energy Lithium Sulfur Solid state batteries

|                                 |                                                                                                             |                        |            |
|---------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|------------|
| <b>Programm / Ausschreibung</b> | MW 24/26, Transnationales, Mobilitätswende, M-ERA.NET Call 2024                                             | <b>Status</b>          | laufend    |
| <b>Projektstart</b>             | 01.07.2025                                                                                                  | <b>Projektende</b>     | 30.06.2028 |
| <b>Zeitraum</b>                 | 2025 - 2028                                                                                                 | <b>Projektlaufzeit</b> | 36 Monate  |
| <b>Keywords</b>                 | solid-state sulfur batteries; lightweight composite electrodes; operando scattering; operando spectroscopy; |                        |            |

### Projektbeschreibung

Das Projekt OCULUS adressiert das Thema 1 „Sustainable advanced materials for energy“ des M-ERA.NET 2024-Calls. Ziel es ist, die wichtigsten Leistungsindikatoren für Festkörper- und „Beyond-Li-Ion / Gen 4&5“-Batterien zu erfüllen und zur Entwicklung von erschwinglichen, nachhaltigen und umweltfreundlichen Energiespeichern beizutragen.

Lithium-Schwefel-Batterien (LSB) gelten als eines der vielversprechendsten „beyond-Li-ion“ Konzepte, da sie nachhaltige Materialien mit einer der höchsten theoretischen gravimetrischen Energiedichten kombinieren. Hauptprobleme bei LSBs mit Flüssig-Elektrolyten sind die schlechte Zyklenlebensdauer durch gelöste Polysulfidspezies und die begrenzte praktische Energiedichte aufgrund großer Mengen flüssigen Elektrolyts. Festkörper-Li-S-Batterien (LS-SSBs) mit festem sulfidischem Elektrolyt umgehen diese leistungsbegrenzenden Prozesse grundlegend. Dadurch kann besonders viel Energie pro Gewicht gespeichert werden, wichtig für die elektrische Luftfahrt und elektrische LKW.

Die LS-SSB-Technologie ist derzeit auf TRL 2-3 und könnte durch neue, umweltfreundliche, lösungsmittelfreie Verarbeitungsmethoden skaliert werden, doch es bestehen weiterhin kritische Herausforderungen. Auf der Kathodenseite ist der Zusammenhang zwischen Mikro-/Nanostruktur und Schwefel/Sulfid-Umwandlungsmechanismus noch nicht ausreichend erforscht. Auf der Anodenseite verursacht das Kriechen des metallischen, duktilen Lithiums entlang der Korngrenzen und Poren der festen Elektrolyt-Separatorfolie vorzeitigen Zelltod.

Ziel des Projekts OCULUS ist die Entwicklung eines reversibel zyklisierbaren, skalierbaren Hochenergie-All-Solid-State-Lithium-Schwefel-Zellkonzepts ohne Indiumüberschuss in der Anode (TRL 4). Dies soll durch fortschrittliche Kathoden- und Anoden-Materialien und nachhaltiger Prozessierung sowie einer Materialentwicklung geleitet durch grundlegende Erkenntnisse aus Operando Messungen, erreicht werden. Die spezifischen Innovationsziele sind:

1. Ein nano- und mikrostrukturierter Kathoden-Komposit zur Maximierung der Aktivmaterialausnutzung durch Verwendung skalierbarer Graphensuspensionen (TRL 4).
2. Ein Leichtbau Lithium-/Kohlenstofffaser-/Graphen-Komposit, der Lithium Dendriten und den vorzeitigen Zelltod verhindert (TRL 3-4).
3. Ein funktionsfähiger, skalierbarer, Cell-Stack mit geringem Gewicht, bestehend aus metallischer Lithiumanode, Festkörper-Separatorschicht und Schwefel/Kohlenstoff/Argyrodit-Kathode (TRL 4)
4. Entwicklung von Operando-Methoden: Ziel ist es, die zugrunde liegenden Mechanismen und leistungsbegrenzenden

Prozesse zu identifizieren und Strategien zur Verbesserung der Batterieperformance abzuleiten. Zu diesem Zweck werden neue Operando-Setups für Feststoff-Schwefelbatterien entwickelt (TRL2-3).

Das OCULUS-Konsortium, bestehend aus Partnern aus Slowenien, Österreich und Deutschland, ist ideal aufgestellt, um diese Ziele durch Materialinnovationen (SX, TUD, IWS), fortschrittliche Operando-Charakterisierung (PLUS, NIC) sowie umweltfreundliche Beschichtungs-/Dispersionstechniken (IWS, SX) zu erreichen. Es umfasst international anerkannte Experten mit einem umfangreichen Patentportfolio und langjähriger Erfahrung in Transferprojekten, SX als Industriepartner (KMU) und einen Industriebeirat entlang der gesamten Wertschöpfungskette. OCULUS wird die Konsortiumsmitglieder als wettbewerbsfähige Innovatoren mit technologischer Führungsrolle in Europa etablieren.

## Abstract

The OCULUS project addresses Topic 1 'Sustainable advanced materials for energy' of the M-ERA.NET 2024 call. Its goal is to meet key performance indicators for solid-state and 'Beyond-Li-Ion / Gen 4&5' batteries and contribute to the development of affordable, sustainable, and clean energy storage solutions.

Lithium-sulfur batteries (LSB) are considered one of the most promising 'beyond-Li-ion' concepts as they combine sustainable materials with some of the highest theoretical gravimetric energy densities. Major issues with liquid electrolyte LSBs include poor cycle life due to dissolved polysulfide species and limited practical energy density due to large amounts of liquid electrolyte. Solid-state Li-S batteries (LS-SSBs) with solid sulfide electrolytes fundamentally avoid these performance-limiting processes. This allows for storing significantly more energy per weight, which is crucial for applications such as electric aviation and electric trucks.

The LS-SSB technology is currently at a TRL of 2-3 and can potentially be scaled up through new, environmentally friendly, solvent-free processing methods, yet critical challenges remain. On the cathode side, the relationship between the micro/nanostructure and the sulfur/sulfide conversion mechanism is not yet sufficiently understood. On the anode side, the creeping of metallic, ductile lithium along the grain boundaries and pores of the solid electrolyte separator foil leads to premature cell death.

The project OCULUS aims to develop a reversibly cyclable, scalable high-energy all-solid-state lithium-sulfur cell concept without indium excess in the anode (TRL 4). Advanced materials sustainably processed both for cathode and anode will be the key to maximizing the electrochemical performance. The material design will be guided by operando scattering, operando spectroscopy, and cryo electron microscopy. The specific innovation objectives of OCULUS are:

1. A nano- and microstructured cathode composite maximizing active material utilization by using a proprietary, scalable graphene suspensions (TRL 4).
2. A lightweight lithium/carbon fiber/graphene composite preventing lithium creeping and dendrites that can be implemented into a cell stack (TRL 3-4).
3. A working scalable, lightweight cell stack comprising a metallic lithium anode, separator layer, and sulfur/carbon/argyrodite cathode (TRL 4)
4. Development of operando methods: The goal is to identify the underlying mechanisms and performance-limiting processes and to derive strategies for improving battery performance. For this purpose, new operando setups for solid-state sulfur batteries are being developed (TRL 2-3).

The OCULUS consortium, with partners from Slovenia, Austria, and Germany is perfectly aligned to achieve these ambitious goals through materials innovation (SX, TUD, IWS), advanced operando characterization (PLUS, NIC), as well as clean coating/dispersion process development (IWS, SX). The involved consortium is ideal for tackling the scientific challenges and exploiting a route towards commercialization: It includes internationally recognized experts with a large existing patent

portfolio and longstanding experience in transfer projects, SX as an industrial (SME) partner, and an industrial advisory board along the value chain. OCULUS will respond to key challenges of future energy-storage devices, establishing the consortium members as competitive innovation drivers with technological leadership made in Europe.

### **Projektpartner**

- Universität Salzburg Fachbereich Chemie und Physik der Materialien