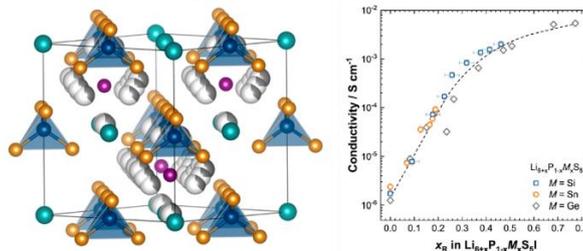
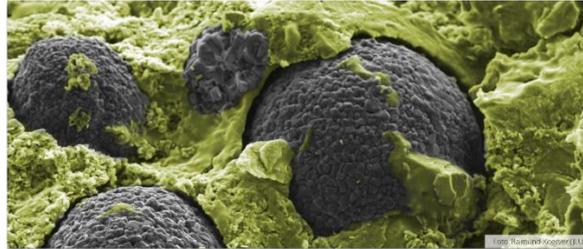


Kurzfassung des Rahmenplans

BMBF-Kompetenzcluster für Festkörperbatterien – FESTBATT

**2. Förderphase
(11/2021-10/2024)**



**Stoffliche und prozesstechnische Grundlagen
für die erfolgreiche Entwicklung von Festkörperbatterien**

- J. Janek (JLU Gießen)
- M. Winter (MEET, HI MS, Münster)
- O. Guillon (FZ Jülich)
- H. Ehrenberg (KIT)
- K. Albe (TU Darmstadt)
- A. Kwade (TU Braunschweig)

1. Ausgangspunkt und Mission

1.1. Ausgangspunkt

Ausgangspunkt für die erste Phase von „FESTBATT“ war der dringende Bedarf an hochwertigen Festelektrolyten (SE) und technischen Konzepten für die Verarbeitung von SE. Es ist bereits jetzt abzusehen, dass FESTBATT die wissenschaftlichen Grundlagen für eine breit angelegte Bewertung von SE und deren Synthese legt und die gesteckten Ziele erreicht werden. Die Synthese und Bereitstellung von hochwertigen SE sollte aber nur der erste Schritt einer ganzheitlichen Forschungsinitiative sein. Schon während der ersten Projektphase hat die Integration von SE in Vollzellen begonnen, um möglichst rasch die Funktion der SE im Zellverbund bewerten zu können. Die Arbeitsgruppen des Clusters gehören heute international mit zu den führenden Gruppen des Forschungsfelds, und diese hervorragende Basis soll weiter ausgebaut werden. Die **Fortsetzung des Clusters – mit einer Fortführung der Entwicklung verbesserter SE, aber auch mit einer verstärkten Ausrichtung auf Hybrid-Materialien, Zellkonzepte und die für deren Umsetzung nötigen Prozesstechniken, Charakterisierungsmethoden und theoretischen Modelle** – ist daher sinnvoll und für die Konkurrenzfähigkeit der deutschen Forschungs- und Entwicklungslandschaft im Bereich der elektrochemischen Energiespeicher wichtig.

1.2. Mission des Kompetenzclusters

Der Kompetenz-Cluster soll in seiner zweiten Phase neben der weiteren zielorientierten Entwicklung verbesserter SE vornehmlich verschiedene Zellkonzepte für Festkörperbatterien (SSB) und Prozessketten auf dem Weg zur Umsetzung dieser Konzepte bewerten. **Das vorrangige Ziel der zweiten Projektphase ist, eine hinreichende quantitative Basis für die rasche und kritische Bewertung von verschiedenen SSB-Konzepten und deren prozesstechnische Umsetzung durch Industrieunternehmen und anwendungsnahe Institute sicherzustellen – hierbei aber die weitere Verbesserung der SE-Konzepte nicht zu vernachlässigen.** Zu den Aufgaben des Kompetenz-Clusters gehören daher

- (a) die Identifizierung sinnvoller Zellkonzepte auf SE-Basis und deren Bewertung durch die Ermittlung reproduzierbarer und nachvollziehbarer Referenzdaten,
- (b) die weitere Verbesserung von SE im Hinblick auf sinnvolle Zellkonzepte,
- (c) die Entwicklung von Prozessketten zum Bau von Testzellen (Vollzellen) im Laborformat, und
- (d) die Bewertung dieser Prozessketten im Hinblick auf eine industrielle Hochskalierung.

In parallellaufenden Arbeitspaketen sollen die notwendigen und schon jetzt sehr erfolgreichen theoretischen und analytischen Arbeiten wie bisher zusammengefasst werden.

In der 2. Projektphase (3 Jahre) des Kompetenz-Clusters FESTBATT sollen die Forschungsthemen, ausgehend von der Herstellung geeigneter SE und der Hochskalierung von Synthesewegen (1. Projektphase), nun über die Entwicklung von Komponenten (Elektroden und Separatoren), Halbzellen (mit ggf. angepassten Elektrolyten für Anoden und Kathodenseite) bis hin zum Design und Bau von leistungsfähigen Vollzellen sowie deren Bewertung (2. Projektphase) reichen. Der vorliegende Rahmenplan stellt den Forschungsbedarf für die Fortsetzung von FESTBATT dar.

2. Motivation und Stand von Forschung und Technik

Festkörperbatterien (SSB) werden seit einigen Jahren international als mögliche Weiterentwicklung bzw. Alternative zur LIB-Technologie betrachtet. Die kritische und nachvollziehbare Bewertung auf der Basis von systematischen Zellstudien erfordert den **Einsatz geeigneter SE, was durch die laufende Projektphase sichergestellt wird**. Der Stand der Forschung an SSB im Sinne eines umfassenden Benchmarkings wurde als Ergebnis der Arbeit des BMBF-Projektes FELIZIA und des Clusters FESTBATT im Frühjahr 2020 publiziert (S. Randau *et al.*, Nature Energy 2020). Die Einteilung der SE in drei Stoffklassen ist weiterhin sinnvoll, allerdings gibt es zunehmend eine erkennbare Tendenz zur Untersuchung hybrider Stoffsysteme (Dispersionen aus zwei SE, z.B. Polymer/Oxid). Es müssen vermutlich mehrere SE gemeinsam in einer Zelle eingesetzt werden. Naturgemäß hat sich der Wissensstand zu den Eigenschaften von Elektroden und Vollzellen weiterentwickelt. Um die Fortführung der Arbeit an allen drei SE-Klassen zu begründen, sind nachfolgend die **wichtigsten Fakten zu den Materialeigenschaften** zusammengefasst (Angaben zu den Leitfähigkeiten beziehen sich auf Raumtemperatur), **wie sie in den Materialplattformen erarbeitet wurden**:

a) **Thiophosphate, Sulfide und Halogenide: Diese Gruppe von Stoffen umfasst die SE mit den heute höchsten Leitfähigkeiten (bei Raumtemperatur) bis in die Größenordnung von 10 mS/cm**. Nach jetzigem Stand der Forschung erlauben nur SE dieser Stoffklasse die Präparation von Kathodenkompositen mit Eigenschaften, die den Eigenschaften konventioneller Kathoden mit Flüssigelektrolyt-Füllung entsprechen bzw. diese übertreffen können (relevant für Traktionsbatterien). Aus diesem Grund verfolgen alle wesentlichen industriellen Akteure weltweit Zellkonzepte auf der Basis von Thiophosphat-Elektrolyten. Auf dem Weg zu SE mit höchsten Leitfähigkeiten wurden Materialien entwickelt, die auch Halogenid-Anionen (zumeist Chlorid-Anionen) enthalten (z. B. Argyrodite der Formel $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}$), die in ihren mechanischen Eigenschaften den reinen Thiophosphaten ähnlich sind. Die hohe Leitfähigkeit der Thiophosphate geht einher mit einigen Nachteilen, die durch mehr oder weniger aufwändige Materialkonzepte kompensiert werden müssen: a) Die Thiophosphate sind nicht reduktionsstabil, und die SEI-Bildung an der Lithiummetallanode muss je nach Material untersucht werden (Teilvorhaben JLU und Fortführung in der 2. Phase von FESTBATT geplant). b) Die Thiophosphate sind nicht oxidationsstabil, und die Bildung einer CEI (*cathode electrolyte interphase*) muss verhindert werden, da diese die Zellimpedanz stark erhöht. Aus diesem Grund spielen spezielle Beschichtungen (*coatings*) der Kathodenaktivmaterialien (CAM) eine wichtige Rolle für die Herstellung stabiler Kathodenkomposite (Teilvorhaben in EProFest und auch in der 2. Phase von FESTBATT geplant).

b) **Oxide und Phosphate**: Diese Stoffgruppe umfasst zum Teil sehr gut leitende SE, die in der Regel Leitfähigkeiten bis in den Bereich von 1 mS/cm zeigen können. **Im Vergleich zu anderen Elektrolytklassen zeigen Oxide und Phosphate die höchste elektrochemische Stabilität gegenüber CAM und ermöglichen Potentiale > 5V vs. Li⁺/Li**. Aufgrund der vorteilhaften Eigenschaftskombination verschiedener Oxid- und Phosphatelektrolyte können Zellkonzepte auf Basis abgestimmter Elektrolytlösungen für Anoden und Kathoden realisiert werden. Der Einsatz von Hochvolt-CAM und Lithiummetallanoden verspricht dabei auch durchaus hohe Energiedichten, die zusammen mit den guten Stabilitätseigenschaften den Einsatz in stationären Anwendungen erlauben könnten. Die erwiesene Stabilität einiger Oxide, zum Beispiel von

LLZO, bietet vermutlich die Grundlage für reversible und hochratenfähige Lithiummetallanoden. Die Herausforderungen, welche mittels anwendungsnahe Grundlagenforschung gelöst werden müssen, sind sicherlich die nötigen Hochtemperaturverfahren für Synthese und Prozessierung. Eine Materialdegradation an den Grenzflächen (Interdiffusion und ggf. auch Reaktion), welche zu einer hohen Grenzflächenimpedanz führt, muss verhindert werden. Allerdings hat die Materialplattform „Oxide“ bereits in der laufenden Projektphase gezeigt, dass solche ungewünschten Grenzflächen-Prozesse durch die Anwendung von geeigneten Schutzkonzepten oder alternativen Herstellungsrouten reduziert werden können, was in der Phase II weiterentwickelt werden soll. **Vorteilhaft für die Zellentwicklung und Skalierung sind die relativ einfache Synthese und die Prozessierung unter atmosphärischen Normalbedingungen.** Die Prozessierung von Oxid/Phosphat-basierten Batterien zeigt Analogien zur SOFC-Technologie, was die Hebung von Synergieeffekten ermöglichen kann. Zudem können Oxide/Phosphate eine wichtige Rolle als Kathodenmaterialbeschichtung (coatings) und als Anodenschutz- bzw. Separatorschicht (ggf. in Kombination mit einer Polymerzwischen-schicht) spielen.

c) Polymerelektrolyte: Feste Polymerelektrolyte stellen aufgrund ihrer mechanischen Eigenschaften, ihrer Verarbeitbarkeit und ihrer bewiesenen Anwendungsfähigkeit grundsätzlich eine natürliche Wahl für SSB dar. Die bisher für eine Raumtemperaturanwendung zu geringen Leitfähigkeiten bei Raumtemperatur (deutlich unter 1 mS/cm) und die bisher berichtete Oxidationsempfindlichkeit an oxidischen Kathoden sind eine Herausforderung. Aus prozesstechnischer Sicht wären Polymerelektrolyte vermutlich wegen der prozesstechnischen Nähe zu Binderansätzen in LIB-Technologien bevorzugt, zudem bieten sich Extrusionsverfahren zur Verarbeitung an. Die kommerzielle Nutzung von Polymer-SE-Zellen im Bereich von Batterien für den Taxiflottenbetrieb oder für Busse zeigt die Attraktivität des Ansatzes, wobei beachtet werden muss, dass der Betrieb dieser Batterien weiter bei erhöhter Temperatur stattfindet. Neue Polymer-basierte Batteriekonzepte, die auch bei Raumtemperatur betriebsbereit sind, werden z.B. bei Ionic Materials und Solid Energy verfolgt. Die stoffliche Basis ist bis heute nicht bekannt und liefert Motivation für die weitere Erforschung dieser Elektrolyte.

d) Komposit-Elektrolyte und Hybrid-Konzepte: Eine der wesentlichen Erkenntnisse aus FESTBATT ist es, dass aufgrund der Instabilität der SE gegenüber bestimmten Anoden- und Kathodenmaterialien eine Kombination von verschiedenen SE nötig sein wird, um eine gute Funktionalität der Vollzelle zu erreichen. Selbst der Einsatz eines kleinen Volumenanteils eines flüssigen Elektrolyten erscheint nicht ausgeschlossen, um Kontaktimpedanzen zu verringern. Dementsprechend gibt es in den letzten Jahren zunehmend Arbeiten zu a) heterogenen Mischungen (Kompositen) zweier Elektrolyte, z. B. (Gel)Polymer-Oxid- oder (Gel)Polymer-Thio-phosphat-Komposite, und b) zum Ladungstransferwiderstand an den Kontaktflächen zweier Elektrolyte. Beide Themen werden bereits in FESTBATT aufgegriffen und sollen der weiteren Arbeit von FESTBATT durch Einrichtung von Querschnittsprojekten (ggf. in einer eigenen Plattform) vertieft werden. Darüber hinaus stellt beispielsweise auch die Kombination eines anodenseitigen SE-Separators mit einem kathodenseitigen flüssigen Elektrolyten (siehe Solid Energy) ein mögliches Zellkonzept dar, was oft als „Zelle mit geschützter Lithiummetallanode“ bezeichnet wird. Die hierzu notwendigen Kompetenzen gehen über die im Rahmen der 1. Förderphase erworbenen Kenntnisse hinaus und bedürfen im Gesamtkontext der Realisierung

einer Batterie mit Lithiummetall als Anodenaktivmaterial gesonderter Beachtung. Das Konzept kann auch Bestandteil eines Teilprojekts sein, welches sich mit dieser Form der Hybridisierung beschäftigt.

Konzepte für kommerzielle Vollzellen wurden bereits von den Konzernen Toyota, Samsung, Toshiba u.a. vorgestellt und werden intensiv untersucht. Weitere Konzepte beruhen auf den Arbeiten kleinerer und junger Firmen in den USA, wie Solid Power und anderen. Die Firma QuantumScape hat jüngst demonstriert, dass SE-Separatoren gefertigt werden können, die Dendritenwachstum auch bei Stromdichten von bis zu 100 mA/cm^2 erfolgreich unterdrücken. Die Firmen HydroQuebec und Bolloré haben eine geheizte Lithiummetall-Polymer-Batterie entwickelt, die bereits seit mehreren Jahren in Bussen und PKW zum Einsatz kommt. Im Wesentlichen müssen Dünnschichtzellen (Mikrobatterien in Dünnschichttechnik mit Zelldicken im Bereich weniger μm) und Dickschichtzellen (konventionelle Zellen mit Zelldicken im Bereich von $100 \mu\text{m}$) unterschieden werden. Da Mikrobatterien nicht im Fokus von FESTBATT stehen, wird der Begriff „Festkörperbatterie(zelle)“ im weiteren Text synonym mit dem Konzept der Dickschichtzelle verwendet, die einer klassischen LIB ähnelt.

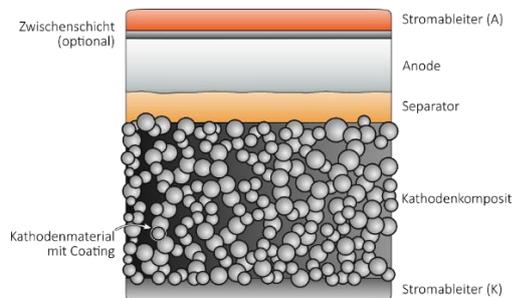


Abbildung 2: Schematische Darstellung einer SSB und der Komponenten, die in einer Prozessfolge aufgebaut werden müssen. Die Größenverhältnisse sind vereinfacht dargestellt. Angenommen ist hier ein Aufbau im Sinne einer „cathode-supported cell“, d.h. die relative Dicke Kathodenschicht stellt die Ausgangsbasis für den Zellaufbau dar. Der Zellaufbau erfolgt von unten nach oben.

2.1. Stand der Forschung und Technik im Detail – SSB-Zellen auf Basis von Sulfid-Elektrolyten

SSB auf der Basis von sulfidischen SE stellen heute in der Literatur die bisher leistungsfähigsten (veröffentlichten) Festkörpersysteme bei Raumtemperatur dar. Die ständige Weiterentwicklung von sulfidischen SE mit immer höheren ionischen Leitfähigkeiten (bis zu ca. 25 mS/cm) in Verbindung mit einer einfachen Prozessierung hat sehr erfolgreiche und fortgeschrittene Studien hervorgebracht. Das **enorme Potential von sulfidischen SSB** wird im Sinne eines „Benchmarking“ insbesondere anhand der exzellenten Ergebnisse von Toyota MC deutlich, die extreme Lade- und Entladeraten von bis zu 60 C bei Raumtemperatur demonstrierten. Die schnelle Entwicklung dieser Systeme spiegelt sich zudem in der Vielzahl der Optimierungsansätze wider, in denen beispielsweise durch Vergrößerung der Elektroden Dicke auf bis zu $600 \mu\text{m}$ oder auch Reduzierung des Elektrolytanteils in den Elektroden auf unter $20 \text{ Gewichtsprozent}$, und damit Erhöhung des Aktivmaterial-Anteils, versucht wird, die Leistung zu steigern.

Eine entscheidende Hürde für diese Systeme stellen Grenzflächenreaktionen dar, welche durch die Ausbildung von schlecht-leitfähigen Interphasen an den Elektrodenoberflächen zu einem graduellen Kapazitätsverlust führen, sowie die Instabilität einer möglichen Lithiummetallanode. Um praktikable Kapazitäten und Zyklen-Stabilität mit sulfidischen SE zu erzielen, bedarf es daher **Grenzflächenmodifizierungen**, die das schmale elektrochemische Fenster und die zugrundeliegende thermodynamische Instabilität kompensieren. Insbesondere die

Stabilität gegenüber der Lithiummetall-Anode ist kritisch. Ebenfalls wurden bezüglich der Prozessierung von SSB mit sulfidischen SE deutliche technische Fortschritte erzielt. Dabei steht bisher die Anfertigung von Elektrodenbögen durch lösemittelbasierte Prozesse im Vordergrund; dieser Prozess kann möglicherweise durch trockene Prozessierungsverfahren ergänzt oder abgelöst werden.

Durch die Entwicklungen der letzten Jahre wurden zwar die Leitfähigkeiten der Materialien sukzessive erhöht, die geringe Stabilität gegenüber Reduktion und Oxidation bleibt jedoch eine Herausforderung. Es besteht jedoch hinreichend Potential zur Verbesserung der Leitfähigkeiten und Stabilitäten, wie aus den Arbeiten in FESTBATT deutlich wird. Besonders der Einsatz von Flüssigsynthesen und Flüssigprozessierung ist anzustreben, um neben den klassischen Synthesewegen eine Hochskalierung und Imprägnierung zu ermöglichen. Hierzu muss aber der Einfluss der Lösemittel und des Syntheseprozesses auf die Strukturen, Morphologie und die Leitfähigkeiten systematisch untersucht werden.

2.2. Stand der Forschung und Technik im Detail – Oxide und Phosphate

Vorteilhaft für die Synthese und Prozessierung dieser sauerstoffhaltigen Materialien ist die Stabilität an Luft, welches eine kostengünstigere Fertigungsinfrastruktur ermöglichen könnte. Zellkonzepte auf Basis von Oxiden (wie Lithium-Lanthan-Zirkonat LLZO) und Phosphaten (wie Lithium-Aluminium-Titan-Phosphat, LATP) haben oft Analogien zu SOFC-Technologien, welche schon erfolgreich zur Großserienreife entwickelt wurden. Besonders der ähnliche Aufbau der Festoxid-Brennstoffzelle mit relativ dicken Elektroden und sehr dünnem Separator von nur 2-3 μm zeigt die Entwicklungspotentiale für oxid-keramische Zellen auf. Standardschritte der Fertigung sind die Pulversynthese, Formgebung und Sinterung. Für die Pulversynthese können je nach Prozess feste oder flüssige Präkursoren verwendet werden, die einen Kalzinierungsschritt erfahren. Dadurch werden die Kristallstruktur und Kristallgröße eingestellt, die sich ggf. vorteilhaft auf die Komponenten-*Performance* auswirken. Industrierelevante Syntheseverfahren bis in den kg-Maßstab wurden bereits in der laufenden Phase von FESTBATT demonstriert.

Keramische Pulver werden standardmäßig in Suspensionen verarbeitet und durch Beschichtungstechnik (Foliengießen, Siebdrucken, usw.) in einem Rolle-zu-Rolle-Prozess auf eine Polymerfolie aufgetragen. Nach dem Trocknen und der Entbinderung erfolgt die Verfestigung und Verdichtung durch Sintern. So gelingt es, dünne Separatoren (perspektivisch bis zu 3 μm) und dicke Mischkathoden einzeln oder als Verbund herzustellen. Aufgrund der hohen Stabilität oxidischer Materialien sind diese Herstellungsprozesse sogar Wasser-basiert möglich. Komplett anorganische SSB auf Oxid-Basis werden bereits seit geraumer Zeit erforscht, und erste Konzepte werden bereits industriell umgesetzt. Hierbei stellt das Kathodenkomposit aus Sicht der Prozessierung naturgemäß immer eine besondere Herausforderung dar.

Trotz der chemischen Stabilität von Oxiden der Granat-Familie gegenüber Lithium, müssen für hohe Ströme die chemo-mechanischen Effekte, welche zur Dendritenbildung führen, wirksam unterdrückt werden. Konzepte wie Oberflächenbehandlung, Zwischenschichten und Polymer-keramische Hybride werden verfolgt, um die nötigen Laderaten zu erreichen.

Die Grenzflächen zwischen Elektroden und Elektrolyten spielen eine wichtige Rolle für die Leistung von SSB-Zellen. Polymerelektrolyte wie Poly(ethylen)oxid und Thiophosphate

können hohen Potentialen nicht widerstehen und benötigen daher eine Schutzschicht zwischen dem aktiven CAM und dem Elektrolyten. Li-ionenleitende Oxid-Filme mit wenigen Nanometern Dicke wurden erfolgreich eingesetzt und sind daher vermutlich unerlässlich für die Funktion von SSB. Zusammenfassend zeigen Oxide vielfältige Einsatzmöglichkeiten in SSB, mit steigendem Grad der Hybridisierung: in vollkeramischen Zellen, ggf. mit Li-Metall-Anode, als Separatoren für Hybridzellen in Kombination mit Polymeren/Thiophosphat-Elektrolyten, Additive in Polymerelektrolyten und nicht zuletzt als dünne Schutzschichten zwischen CAM und allen SE.

2.3. Stand der Forschung und Technik im Detail – Polymere

Organische **Polymerelektrolyte** gelten als vielversprechende Kandidaten für Batteriesysteme mit hoher Energiedichte. Aus der Sicht der praktischen Anwendung sollten Polymerelektrolyte für Li-Polymer-Batterien ionische Leitfähigkeiten von $>10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$ bei Umgebungstemperatur (für ausreichende Entladeströme, „fast charging“ benötigt höhere Leitfähigkeiten), hohe Li^+ -Überführungszahlen (> 0.9), gute mechanische Festigkeit ($> 6 \text{ GPa}$; theoretisch abgeleitetes Kriterium für Dendritensicherheit), ein elektrochemisches Stabilitätsfenster von $> 4,2 \text{ V vs. Li}^+/\text{Li}$ (im Falle unbeschichteter CAM; sonst genügt auch engeres Fenster), ausgezeichnete chemische und thermische Stabilität und vorteilhafte Kompatibilität mit Elektrodenmaterialien besitzen und zudem mittels kostengünstiger Syntheseverfahren verfügbar sein. Auch die Anteile an strategisch kritischen Rohstoffen sind in typischen Polymerelektrolyten begrenzt. Jedoch ist es schwierig, für ein ausgewähltes Polymersystem sämtliche oben aufgeführten und mitunter konkurrierenden Anforderungen zu erfüllen, zumal die vergleichsweise niedrige Ionenleitfähigkeit (10^{-5} - $10^{-7} \text{ S cm}^{-1}$ bei 25°C) und ausbaufähige Langzeit-Stabilität vieler Polymerelektrolyte industrielle Anwendungsmöglichkeiten bisher einschränken. Nichtsdestotrotz wurden reine Elektrofahrzeuge auf Basis fester Lithium-Polymer-Batterien von Bolloré bereits 2011 auf den Markt gebracht. Darüber hinaus können Polymerelektrolyte **passive Separatoren** ersetzen und **Funktionsschichten auf Elektroden** bilden.

Trotz intensiver Forschung ergibt die Auswertung aktueller Veröffentlichungen zu Festpolymerelektrolyten derzeit keine signifikanten Verbesserungen der wichtigsten Eigenschaften im Vergleich zu Polyethylenoxid (PEO) in Kombination mit LiTFSI, zumal dann, wenn neben der Leitfähigkeit auch der Grenzflächentransfer sowie Bildung von Konzentrationsgradienten berücksichtigt werden. Eine besondere Bedeutung zur Gestaltung neuartiger Polymerelektrolyte haben kovalent **fixierte Anionen** oder **Immobilisierung der Anionen durch Akzeptoren**, wodurch hohe Überführungszahlen erreicht werden können. Während die Stabilität gegenüber Li-Metallanoden in den meisten Systemen durch SEI-Bildung gewährleistet wird, existiert derzeit kein allgemeines Konzept einer Kathodenschutzschicht (CEI).

Die bisherigen Arbeiten im Rahmen von FESTBATT haben sich auf **verschiedene Polymerklassen** konzentriert, die mitunter niedermolekulare Komponenten enthalten, um den Ladungstransport zu unterstützen und soweit möglich als **Einzelionenleiter** fungieren. Besonderes Augenmerk gilt der Leitfähigkeit (s. oben) und der elektrochemischen Stabilität, welche stabile Zyklierung der Polymerelektrolyte in Lithium-Metall-Vollzellen mit NMC622-Kathoden ermöglichen soll (Stand der Technik meist LiFePO_4 als positive Elektrode). Aufgrund der bereits

erzielten Ergebnisse werden im weiteren Verlauf von FESTBATT beachtliche Fortschritte in Richtung industrieller Anwendung ausgewählter Polymersysteme erwartet, sei es als Elektrolyt oder Funktionsschicht. Unter Berücksichtigung individueller Anforderungen werden Fortschritte hinsichtlich der Erhöhung der nutzbaren Grenzstromdichten (z.B. durch Design der Grenzflächen), der Leitfähigkeiten, und auch Verfügbarkeit der Materialien erwartet.

3. Wissenschaftlich-technische Ziele

3.1. Ableitung der Ziele der 2. Projektphase aus der laufenden Projektarbeit

In der 2. Projektphase sollen sowohl bekannte als auch ggf. neue Konzepte für SSB-Vollzellen verfolgt werden. Eine wesentliche Herausforderung besteht hier in der Fertigung einer möglichst dünnen und stabilen SE-Schicht (bzw. einer Mehrlagenschicht), die als Separator beide Halbzellen ohne Performanceeinbußen an den jeweiligen Einzelelektroden in einer Vollzelle vereint. **Bereits früh wurde in der laufenden Projektarbeit – auch in Diskussion mit dem Managementkreis – deutlich, dass die Idee der Selektion eines besten SE nicht zielführend ist.** Vielmehr haben die verschiedenen SE-Klassen (Sulfide/Thiophosphate, Oxide/Phosphate, Polymere) jeweils eigene und ganz spezifische Vor- und Nachteile, und die Entwicklung von „hybriden“ Elektrolyten als zweiphasige (heterogene) Mischungen erscheint deshalb als mögliche Option für verbesserte SE (s. Konzept der Verbundwerkstoffe im Bereich der Konstruktionsmaterialien). Als Beispiel sei hier die Kombination eines sehr gut leitfähigen, aber oxidationsempfindlichen Katholyten (Thiophosphat) mit einer weniger gut leitfähigen, aber stabilen und dünnen Kathodenbeschichtung (Oxid) genannt. Es wurde zudem deutlich, dass der Einsatz von SE in SSB verschiedene Funktionen mit verschiedenen Materialanforderungen erreichen kann:

- (a) **Katholyt:** Der Aufbau des (dicken) Kathodenkomposits (ggf. auch des Anodenkomposits) erfordert **SE mit sehr hoher Leitfähigkeit (>10 mS/cm für hohe C-Raten, realistische Tortuosität angenommen) und Reduktions- und Oxidationsstabilität.** Diesen Anspruch der sehr hohen Leitfähigkeit (für Anwendungen bei Raumtemperatur) erfüllen gegenwärtig (im Rahmen gesicherter und überprüfter Kenntnisse) nur Sulfid-/Thiophosphat-SE und Gel-Polymerelektrolyte. Die mangelnde Oxidationsstabilität dieser SE muss durch schützende Beschichtungen der CAM aufgefangen werden („protective coatings“), die derzeit vorzugsweise speziell gestaltete Oxide sind (Synergie mit der Oxidplattform). Die chemomechanische Belastung des Kathodenkomposits könnte durch oxidationsstabile Polymere reduziert werden (Synergie mit der Polymer-Plattform). Bei höheren Anwendungstemperaturen können Polymer- und Oxidelektrolyte attraktive Lösungen erlauben. Für oxid- und sulfid-basierte Zellen stellen gestapelte Mehrlagenkonzepte eine attraktive Architektur dar.
- (b) **Separator:** Separatorschichten müssen möglichst dünn (idealerweise <10 µm, je nach Zellkonzept sind auch dickere Separatoren einsetzbar) ausgeführt werden und sollten in Kontakt mit Anode und Kathodenkomposit sowohl stabil sein als auch nur geringe Ladungstransferwiderstände zeigen. Die Leitfähigkeit ist im Falle hinreichend dünner Separatoren nicht kritisch (0,1 – 1 mS/cm), so dass hier alle Materialklassen und insbesondere dendritenfeste Oxidelektrolyte oder hybride SE (z.B. polymer-gebundene Thiophosphate oder Oxide) zum Einsatz kommen können. **Entscheidend für den erfolgreichen Einsatz ist hier vor allem die Prozessierbarkeit des Materials** in Form dünner

und deckender Schichten, die im Idealfall auch dendritensicher sind. Daneben spielen natürlich die Kompatibilität der Separatorschicht mit den Nachbarschichten und niedrige Ladungstransferwiderstände an den Phasenübergängen eine weitere wichtige Rolle.

- (c) **Kathodenkomposit und -beschichtung:** Die für den Aufbau des Kathodenkomposits nötigen Elektrolyte (insbesondere Thiophosphate, aber in der Regel auch Polymere) müssen oft durch eine sehr dünne Beschichtung auf dem CAM vor Oxidation geschützt werden. Eine entsprechend stabile Oxid-/Phosphatschicht, möglicherweise auch eine dünne Halogenidschicht, kann dies gewährleisten. Noch besser wäre eine oxidationsstabile Polymerbeschichtung, die zusätzlich chemo-mechanische Effekte aufnehmen könnte. Ein stabiles Kathodenkomposit mit niedriger Impedanz ist eine der zentralen Herausforderungen in der Entwicklung von SSB.
- (d) **Anodenbeschichtung:** Viele SE, die sich hervorragend als Separatormaterial eignen würden, sind instabil gegen Reduktion. Allerdings sind selbst reduktionsstabile SE (z. B. LLZO) bisher nicht ausreichend dendritensicher bei Kombination mit einer Metallanode. Eine reduktionsstabile und dendritensichere Zwischenschicht (z. B. aus einem Polymer), die die chemo-mechanischen Effekte aufnimmt, könnte hier Abhilfe schaffen. Dies gilt insbesondere für Anodenkonzepte, in denen auf ein Lithiummetallreservoir verzichtet wird („anoden-freie“ Zellen).

Zweifelloos ist mit Blick auf diese komplexen Materialanforderungen geboten, auch weiterhin alle Materialklassen in der 2. Phase von FESTBATT zu untersuchen – allerdings stärker auf die möglichen Einsatzfelder fokussiert:

Sulfide/Thiophosphate: Diese SE-Klasse bietet höchste Leitfähigkeiten und ist daher für den Aufbau eines hochratenfähigen Kathodenkomposits besonders attraktiv. Sie kann auch als Separatormaterial genutzt werden, hier kann dann ggf. ein Schutz gegen Reduktion durch die Anode nötig werden.

Oxide/Phosphate: Diese SE-Klasse bietet höchste Oxidationsstabilität und ist daher als Material für Kathodenkomposite für Anwendungen bei erhöhter Temperatur bzw. für CAM-Beschichtungen besonders attraktiv. Sie kann auch in Separatoren eingesetzt werden, wobei ggf. ein Schutz gegen Reduktion durch die Anode nötig wird. Vollkeramische Batteriekonzepte könnten für den Betrieb unter harschen Bedingungen und eine überwiegende Zellfertigung an Luft interessant werden.

Polymere: Diese SE-Klasse bietet optimale mechanische Eigenschaften. Die jetzt erreichten Leitfähigkeiten qualifizieren Polymere in erste Linie als Separatormaterialien und als schützende Beschichtungsmaterialien, aber auch als Katholyt für Zellen, in denen hohe Laderaten nicht im Mittelpunkt stehen oder die beheizt werden können. Gel-Polymerselektrolyte, die durch den Einbau eines flüssigen Lösungsmittels höhere Leitfähigkeiten erreichen, können auch als Katholyt eingesetzt werden. Ein Einsatz als „Bindermaterial“ für den Aufbau von hochleitenden Hybridelektrolyten in Kathodenkompositen hat ebenfalls großes Potential.

Der Bedarf nach allen drei Materialklassen rechtfertigt es, die Materialplattformen im Kern als Strukturelemente des Clusters beizubehalten, sie aber nunmehr klar auf die Zellkonzepte

von SSB auszurichten. Es ist ebenso sinnvoll, die beiden erfolgreich arbeitenden Methodenplattformen als Strukturelemente des Clusters weiterzuführen.

3.2. Ziele der 2. Projektphase von FESTBATT

Das zentrale Ziel von FESTBATT ist es, die material- und zellbasierte Prozess- und Know-how-Kette für die spätere Technologieführerschaft im Bereich der SSB aufzubauen (Forschungsziele). Hierbei gilt es zu berücksichtigen, dass asiatische und amerikanische Akteure bereits einen technisch-wissenschaftlichen Vorsprung erarbeitet haben, den es einzuholen gilt.

Die Teilziele der ersten Projektphase umfassen u.a. die folgenden Aspekte:

- Entwicklung und Optimierung von aussichtsreichen SE,
- Die rasche Bereitstellung von Referenzmaterialien in Labormengen (> 0,1 kg),
- Die Bereitstellung ausreichender analytischer Kompetenz,
- Die Verknüpfung von theoretisch arbeitenden Gruppen mit experimentellen Gruppen,
- Die Identifizierung und Förderung von Einrichtungen (Firmen, Institute), die ggf. in Zusammenarbeit mit den spezialisierten wissenschaftlichen Arbeitsgruppen skalierbare Synthesen in die Praxis umsetzen können.

Damit verfolgt FESTBATT in der laufenden Projektphase sowohl wichtige Forschungsziele (Kompetenz- und Wissensaufbau) als auch Entwicklungsziele (skalierbare Synthesen), die durch messbare Meilensteine definiert sind. Die Teilziele der zweiten Projektphase umfassen nun:

a) die **Weiterentwicklung von SE** aus der ersten Phase von FESTBATT für den Einsatz in Vollzellen. Der Bedarf nach Weiterentwicklung ist für die verschiedenen SE-Klassen unterschiedlich. Während Oxid-SE vor allem mit Blick auf die Verarbeitbarkeit mit Elektrodenmaterialien optimiert werden müssen, müssen Thiophosphat-Elektrolyte bzgl. ihrer Stabilität, Elektrodenkompatibilität und Toxizität verbessert werden. Polymer-Elektrolyte müssen weiter bzgl. ihrer Leitfähigkeit und Elektrodenkompatibilität verbessert werden. Aspekte des Recyclings sollten bereits in den Blick genommen und ggf. in Zusammenarbeit mit dem entsprechenden BMBF-Cluster bearbeitet werden. Antragsskizzen müssen klare Angaben dazu enthalten, welchen Nutzen die geplanten Untersuchungen für Vollzellkonzepte haben werden und in welcher Funktion die entwickelten SE eingesetzt werden sollen.

b) die **Entwicklung von Verfahren zur Präparation von SE-Separatorschichten** und Anodenaktivmaterial-Kompositschichten mit möglichst niedriger Lade- und Entladeüberspannung, hoher Coulomb-Effizienz und Zyklenlebensdauer. Die Entwicklung von Verfahren zur Präparation dünner und dichter Separatorschichten spielt eine wichtige Rolle. Es müssen eine geringe Separatorimpedanz und geringe Ladungstransferimpedanzen zu den angrenzenden Elektroden sichergestellt werden. Im Falle von Anodenschichten gelten gleiche Anforderungen wie für Kathoden. Die Verfahren zur Herstellung sollen skalierbar sein und sowohl hinreichend dicke als auch großflächige Elektroden gewährleisten.

c) die **Entwicklung von Verfahren zur Präparation von SE/CAM-Kompositelektroden** mit möglichst niedriger Lade- und Entladeüberspannung, hoher Coulomb-Effizienz und Zyklenlebensdauer. Die Verfahren sollen skalierbar sein und die Herstellung sowohl von hinrei-

chend dicken (ca. 100 μm) als auch großflächigen Elektroden sicherstellen. Im Kompetenzcluster ProZell erarbeitetes Wissen könnte als Basis für die Erarbeitung der Verfahren genutzt werden. Da absehbar ist, dass CAM für die Nutzung in SSB modifiziert werden müssen (Beschichtungen, Morphologie, Mikrostruktur, s. Punkt d), wird die Zusammenarbeit mit dem Cluster ExcellBattMat und Materialherstellern eine wichtige Rolle spielen. Die Untersuchung der Stabilität der Kathodenkomposite mittels Langzeitimpedanzmessungen und analytischen Methoden wird für die Beurteilung von Prozessierungsrouten wichtig sein.

d) Es ist anhand aktueller Arbeiten erkennbar, dass an **CAM für SSB** andere Anforderungen gestellt werden als im Falle von LIB. Mögliche Reaktionen mit SE, mechanischer Kontaktverlust und der schädliche Einfluss von Rissen in NCM-Materialien mit hohem Nickelgehalt sind nur einige der Effekte. Die Entwicklung speziell angepasster CAM oder die gezielte Modifikation kommerzieller CAM spielt hier eine wichtige Rolle. Arbeiten hierzu müssen sich an den Erfordernissen eines definierten SSB-Zellkonzepts orientieren und können z. B. auf eine spezielle Mikrostruktur, Morphologie und Beschichtung ausgerichtet sein. Clusterübergreifende Arbeiten im Sinne der Schaffung von Synergien sind durchaus erwünscht.

e) die **Entwicklung von Verfahren zum Aufbau einer Lithiummetallanode mit hoher Ratenfähigkeit und Dendritenfestigkeit** (Beschränkung auf wenige Ah). Dieser Projektteil hat eine enge Verbindung zur ersten Projektphase, in der die Stabilität von SE gegenüber Lithiummetall eine wichtige Rolle spielt. Darüber hinaus gibt es wertvolle Verbindungen zu anderen Projekten (z. B. ProLiFest), und es kann weitere Verknüpfungen zu neuen industriegeführten Projekten im Rahmen der Bekanntmachung „Batterie2020 Transfer“ geben. Alternative Anodenmaterialien (z. B. Graphit, Silizium, LTO) sind bereits in c) adressiert.

f) die **Entwicklung von Zellkonzepten und von skalierbaren Verfahren für die Herstellung von entsprechenden Vollzellen** (vergleichbare Laborzellen im Pouch-Zellformat, maximal 25-50 cm^2 , ausreichende Anzahl von Testzellen sollte mit vertretbarem Aufwand zu testen sein) auf der Basis verschiedener SE, wozu prozesstechnische Erfahrung nötig sein wird. Die unterschiedlichen Eigenschaften der drei SE-Klassen und von Hybride können zu sehr verschiedenen Fertigungswegen führen. Es sei darauf hingewiesen, dass Vollzellen mit Lithiumanode identisch sind mit den üblichen Halbzellen. **Die Leistungsdaten der Vollzellen im Sinne von Meilensteinen der Teilprojekte sollen sich am internationalen Stand der Forschung orientieren und bei konkreter Antragstellung Angaben zu den erreichbaren Energiedichten, Leistungsdichten und der Zahl stabiler Zyklen enthalten.** Antragskizzen und Anträge müssen nachvollziehbare quantitative Angaben zu sinnvollen Referenzzellen enthalten. Als allgemeine Referenz sollten Leistungsdaten einer LIB-Zelle verwendet werden. Als Referenzdaten für SSB können die im Jahr 2020 publizierten und geprüften Daten in

„Benchmarking of Benchmarking the performance of all-solid-state lithium batteries“
(S. Randau et al., Nat. Ener. 5 (2020) 259)

verwendet werden, ergänzt durch die Leistungsdaten der „Samsung-Zelle“ aus

„High-Energy Long-Cycling All-Solid-State Lithium Metal Batteries Enabled by Silver–Carbon Composite Anodes“ (Y. G. Lee et al., Nat. Ener. 5 (2020) 299). Hier sind auch Daten für eine LIB-Zelle (state-of-the-art) als Referenz enthalten.

Wenn konkurrenzfähige Energie- und Leistungsdichten nicht verfolgt werden, dann müssen sinnvolle alternative „KPI“ (key performance indicators) von SSB (z. B. besondere Temperatureinsatzgebiete, besonders lange Zyklenlebensdauer, besonders günstige techno-ökonomische Bewertung, etc.) als messbare Ziele angegeben werden.

Referenzdaten sollten für (einlagige) Einzelzellen flächenbezogen angegeben werden. Je nach SE-Klasse können ggf. über Einzelzellen hinaus auch Konzepte für Mehrfachzellen (Stapel) verfolgt werden.

g) Der **Verfahrens- und Prozessentwicklung für den Zellbau** kommt in der zweiten Phase von FESTBATT eine besondere Rolle zu. Bei der Verfahrensentwicklung sollen möglichst verschiedene Prozessierungs- und Produktionswege verfolgt und verglichen werden (z. B. Schlicker-basierte Verfahren („slurries“), trockenes Prozessieren (Extrusion), etc.). Hierzu müssen weitere prozess- und produktions-orientierte Projektpartner aufgenommen werden. Die Material-orientierte Arbeit hingegen muss stärker am Bedarf der Zellentwicklung ausgerichtet sein. Die Prozessentwicklung muss klar mit der Materialentwicklung verknüpft sein, um isolierte Entwicklungen zu vermeiden. Es gilt, Material- und Prozessforscher*innen bzw. -entwickler*innen eng miteinander zu verknüpfen. Bei der Prozessentwicklung ist auf eine insgesamt geschlossene Kette von Einzelprozessen hin zur Vollzelle zu achten.

h) Die **Entwicklung von Formierungsprozeduren** für Vollzellen der verschiedenen SE-Klassen kann grundsätzlich andere Prozeduren umfassen als im Falle von LIB. Hier soll das Ziel verfolgt werden, einen Zusammenhang zwischen Formierung und späterer Zellperformance zu erarbeiten (angestrebt werden kurze Formierzeiten und hohe Zyklenstabilitäten).

i) In **systematischen Zelltests** sollen Vollzellen unter verschiedenen Bedingungen (Ratenabhängigkeit mit dem Ziel hoher Raten, Druck und Temperatur) getestet werden. Der Untersuchung des Einflusses des Drucks einerseits kommt eine wichtige Rolle zu, da die Chemomechanik der Elektroden die Zellmechanik und -stabilität beeinflusst. Der Untersuchung des Einflusses der Temperatur andererseits kommt ebenfalls eine wichtige Rolle zu, da Transport-, Ladungstransfer- und Degradationsprozesse stark temperaturabhängig sein können. Im Mittelpunkt sollen Messungen und wo möglich auch vereinheitlichte Messprotokolle stehen, die aussagekräftige Vergleiche mit definierten Referenzzellen erlauben.

j) die **Sicherstellung von Qualitäts- und Datenstandards** in der Charakterisierung von Halb- und Vollzellen.

k) **Sicherheitsrelevante Messungen (z. B. Kalorimetrie), Tests und thermodynamische Berechnungen** erfolgversprechender Anode/Elektrolyt/Kathode-Kombinationen (Vollzellen) und Stabilitätsuntersuchungen von SE in realistischen Umgebungsbedingungen. Hier sollten frühzeitig Abstimmungen mit dem Industriebeirat erfolgen.

Damit wird es auch in der zweiten Projektphase wichtige Forschungsziele im Sinne des Kompetenz- und Wissensaufbaus geben (z. B. grundlegende Kenntnisse über Stabilitätsfragen), es sollen aber auch wiederum Entwicklungen verfolgt werden, um die wirtschaftliche Verwertung zu ermöglichen. **Während in der laufenden Phase skalierbare Syntheserouten die zentralen Entwicklungsziele sind, stehen in der 2. Phase skalierbare Zellkonzepte und deren Pro-**

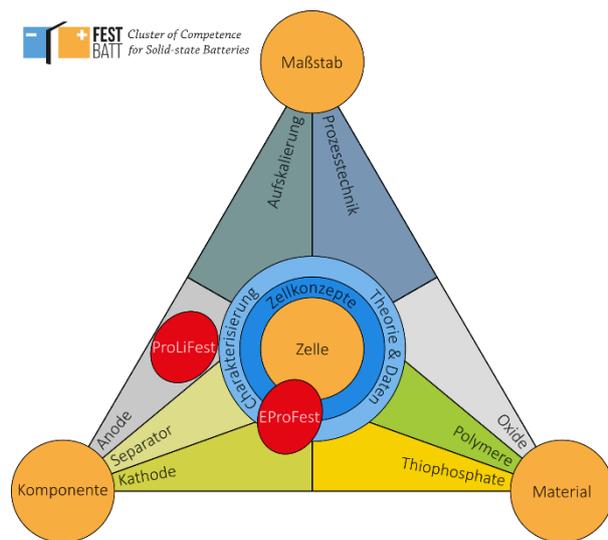
zessschritte im Mittelpunkt. Diese Entwicklungsziele werden durch quantitative Meilensteine, die sich am jeweiligen Stand der Forschung der verschiedenen Material-/Zellkonzepte orientieren, in den Projekten/Vorhaben der 2. Phase definiert.

4. Forschungsansatz, Projektphasen und methodische Kompetenzen

Der Kompetenz-Cluster erfordert die enge Zusammenarbeit von Expert*innen für Festkörper- und Elektrochemie, inkl. Zelldesign und Bau, Grenz- und Oberflächenchemie, theoretische Methoden der Materialsimulation und der Verfahrenstechnik fester Stoffe. In der ersten Phase konzentriert sich die Arbeit auf die Synthese, Hochskalierung und physikalisch-chemische Charakterisierung von SE. In der zweiten Phase steht neben der Weiterentwicklung besonders geeigneter SE und der Verarbeitung der SE zu Elektrodenkompositen vor allem der Bau von Halb- und Vollzellen und die systematische Untersuchung von SSB-Zellen hinreichender Größe (Pouch-Format bis 25-50 cm², je nach Entwicklungsstand der verschiedenen SE) im Zentrum, weshalb der Anteil der Arbeit im Bereich der Prozessierung und Verarbeitung von SE zunehmen wird.

Eine Kompetenzanalyse der verfügbaren Expert*innen in Deutschland belegt, dass der Großteil der deutschen Expert*innen im Cluster bereits jetzt mitwirkt, dass aber insbesondere **im Bereich der Prozessierung ein Ausbau des Clusters** nötig ist.

Abbildung 4: Innere Struktur von FESTBATT in der 2. Phase. Das zentrale Ziel ist die Zelle, die ohne ein entsprechendes Zellkonzept nicht realisiert werden kann. Um realistische und relevante Zellkonzepte zu untersuchen, müssen sowohl die Materialien, also auch die Komponenten und der Maßstab entsprechend gewählt werden. Die Methodenplattformen werden als ein weiteres zentrales Element weitergeführt. Mögliche Projektkonsortien werden beispielhaft durch die bereits bestehenden Projekte ProLiFest und EProFest in Form von roten Flächen dargestellt.



Die geplante **Struktur des Kompetenz-Clusters in seiner 2. Phase** ist in der Abbildung 4 schematisch dargestellt. Die sehr erfolgreiche Binnenstruktur in der Form von fünf Plattformen, davon drei Materialplattformen und zwei Methodenplattformen, soll mit Blick auf die Zielstellung der Untersuchung von Vollzellen weiterentwickelt werden. Da die verschiedenen SE-Klassen verschiedene Verarbeitungsbedingungen und Laborausstattungen erfordern, ist es sinnvoll, die **Materialplattformen in konzentrierter Form als Zellplattformen** weiterzuführen. Die **Methodenplattformen** werden ihrerseits zu Querschnittsplattformen mit zentraler Bedeutung weiterentwickelt, aber konzeptionell nicht verändert. Die Aufgaben auf dem **Weg vom Material zur Vollzelle** werden in den Zell- und Methodenplattformen in einer Dreiecksstruktur abgebildet (s. Abbildung 4). Die Plattformen sollen mit ihren Teilprojekten/-vorhaben die Kette vom Material über Zellkomponenten und deren Prozessierung in relevanten Maßstäben

bis zur Vollzelle abbilden, wobei übergreifende Projekte denkbar sind. Wichtige Konzepte, die plattformübergreifend von Bedeutung sind, sollen in Zukunft in entsprechenden Querschnittsprojekten bzw. -plattformen bearbeitet werden. **Hierzu gehören insbesondere Hybridkonzepte, in denen SE-Kombination untersucht werden, und Zellkonzepte, für die ebenfalls ein materialklassenübergreifendes Projekt gestaltet werden soll.** So wird die Wechselwirkung der verschiedenen Material- und Charakterisierungsansätze, sowie der Modellbildung und Datenanalyse bestmöglich erreicht. Dem Bedarf nach ingenieurwissenschaftlicher **Kompetenz im Bereich der Prozesstechnik für den Zellbau und dessen Skalierung** soll durch eigene prozesstechnische Projekte begegnet werden.

Die **drei Zellplattformen haben die Aufgabe, alle vorbereitenden und unterstützenden Arbeiten für den Bau von Vollzellen zu leisten. Die beiden Methodenplattformen im Bereich der Material- und Zellcharakterisierung und der Theorie/Datenverarbeitung unterstützen die drei Zellplattformen im Sinne von Querschnittsaufgaben kontinuierlich und sichern die Vergleichbarkeit von Messprotokollen.**

Die **Methodenplattform „Charakterisierung“** soll wie bisher die, für die Entwicklung von SE und SSB notwendigen spezifischen analytischen Methoden zusammenfassen. Die Ziele der Teilvorhaben müssen mit den Zielen und Aufgaben in den Zellplattformen abgestimmt sein und wichtige Fragestellungen der Optimierung der Zellkomponenten, sowie hybrider Material- und Zellkonzepte adressieren. Zu den essentiellen **Methoden** gehören die tiefgehende elektrische Charakterisierung mittels (a) Impedanzspektroskopie und Messungen der partiellen Leitfähigkeiten, die Kopplung von Lade-/Entladeschritten mit mechanischen Effekten (b) Röntgen- und Neutronendiffraktion, NMR, (c) Elektronenmikroskopie (FIB-REM, (S)TEM), und (d) Grenzflächenanalytik mittels Röntgen-Photoelektronenspektroskopie (XPS) und Flugzeit-Sekundärionenmassenspektrometrie (ToF-SIMS). Da einige dieser Methoden tiefgehende Vorarbeiten und Erfahrungen verlangen, ist Kontinuität erwünscht. Zentrale **Fragestellungen** sind u.a. die strukturelle Charakterisierung der SE und die Verknüpfung von Strukturinformationen mit den elektrochemischen Eigenschaften, die Alterung von Zellkomponenten, die Bildung von Reaktionsschichten zwischen SE und Aktivmaterial und die Chemo-Mechanik.

Von zentraler Bedeutung ist die **Methodenplattform „Theorie und Daten“**, in der u.a. Referenzdaten für alle Partner aufbereitet und archiviert werden, in der aber auch weitergehende Konzepte der Modellierung und der Datenauswertung („Data Science“) mittels KI verfolgt werden sollen. Die Ziele der Teilvorhaben müssen mit den Zielen und Aufgaben der Zellplattformen abgestimmt sein und wichtige Fragestellungen der Optimierung der Zellkomponenten, sowie hybrider Material- und Zellkonzepte adressieren. Besonders wichtige Methoden sind a) die atomar aufgelösten Berechnungen von SE-Grenzflächen mittels DFT, b) die mesoskopisch aufgelösten Berechnungen von kompletten Elektroden und Halbzellen mittels mathematischer Modelle, und c) Berechnungen der Kontaktmechanik von SE. Wichtige Aspekte sind Elektrodenkontakte, insbesondere im Bereich der Lithiummetallanode, die chemo-mechanischen Effekte und die Optimierung von Kathodenkompositen.

Querschnittsprojekte sollen Materialklassen-übergreifend wichtige Themen aufgreifen: In **Querschnittsprojekten „Kompositelektrolyte“** (ggf. auch als eigene Plattform) sollen Kombinationen der verschiedenen SE untersucht werden. Es ist ein etabliertes Konzept,

optimierte Materialien durch „Kompositierung“ zu gestalten (z. B. Faserverbundwerkstoffe). Die Kombination von elastischen Polymerelektrolyten mit inelastischen keramischen Elektrolyten könnte zu leistungsfähigen und dendritensicheren Separatoren führen, und der Einsatz von Keramik-Polymer-Kompositelektrolyten könnte auch die Chemomechanik in der Kathode verbessern. In **Querschnittsprojekten „Zellkonzepte“** (ggf. auch als eigene Plattform), die an das Vorprojekt „EProFest“ anschließen, sollen ebenfalls Materialklassen-übergreifend sinnvolle Zellkonzepte gestaltet, evaluiert und referenziert werden. Diese konzeptionellen Querschnittsprojekte bilden gleichzeitig die Schnittstelle zu Projekten, die sich mit der Skalierung der Prozesse zur Produktion von Vollzellen beschäftigen werden. Hinsichtlich der Verfahren zur Herstellung der Kathoden, Separatoren und Anoden soll eng mit dem Kompetenzcluster „ProZell“ kooperiert werden. Hierzu soll eine gemeinsame Wissensaustausch-Plattform geschaffen werden. Zudem sollen die Ergebnisse des Projektes „EProFest“ direkt in die Zellplattformen einfließen und das prozesstechnische Wissen stärken.

5. Organisatorischer Aufbau von „FESTBATT“ in der 2. Projektphase

5.1. Innere Struktur des Clusters

Die in der ersten Projektphase erfolgreiche Organisation soll aus Gründen der Effizienz und Kontinuität fortgeführt werden. In **drei Zellplattformen**, die die drei Materialplattformen ablösen, werden in der zweiten Projektphase die wesentlichen Grundlagen für den Einsatz der drei SE-Typen in Halb- und Vollzellen erarbeitet. Die Verarbeitung der drei Stoffklassen ist grundsätzlich verschieden, und der Aufbau von Halb- und Vollzellen erfordert verschiedene Arbeitsschritte und technisches Know-how. **Die Entwicklung neuer und verbesserter SE ist weiterzuführen, um der dynamischen Entwicklung Rechnung zu tragen.** Diese Arbeiten sollten aber zunehmend auf die nötigen Funktionalitäten in Vollzellen ausgerichtet sein. Die wachsende Bedeutung hybrider Elektrolytkonzepte soll durch ein plattformübergreifendes Projekt abgebildet werden.

Die Arbeit in den Materialplattformen wird wiederum durch **zwei weitere Methodenplattformen „Charakterisierung“ und „Theorie und Daten“** ergänzt, in denen Querschnittsaufgaben bearbeitet werden. Zu diesen Aufgaben gehört zum einen **die theoretische Beschreibung von SE, Kompositen und SSB.** Die **analytische und messtechnische Kompetenz wird in der Charakterisierungs-Plattform zusammengeführt.**

Der Bedeutung von Vollzellen in der 2. Phase von FESTBATT soll durch weitere plattform-übergreifende Projekte (ggf. in einer eigenen Plattform) begegnet werden, die sich auf die **Gestaltung, die Evaluierung und Referenzierung von Vollzellen** im Sinne eines Benchmarkings konzentrieren.

Prozesstechnisch orientierte Projekte sichern die Brücke von der Material- und Komponenten-orientierten Forschung der Plattformen in die industrielle Praxis und in die Forschungsfertigung Batteriezelle (FFB).

Als Institutsverbund hat der Cluster das wichtige Ziel, Industrieprojekte zu unterstützen, in denen die wirtschaftliche Verwertung im Mittelpunkt steht. Erfolgreiche Ansätze, die in FESTBATT entwickelt werden, sollen frühzeitig in Projekten mit Industrieunternehmen weiterverfolgt werden, und Ergebnisse sollen in die Industrie transferiert werden. Daher wird ein

großer Wert auf die Zusammenarbeit mit BMBF-Projekten unter Industriebeteiligung und der FFB gelegt, in denen die für die Zellfertigung nötige Prozesstechnik gefördert und zusammengefasst wird. **Durch gemeinsame Workshops soll früh die Zusammenarbeit gefördert werden.** Mögliche prozessorientierte Projekte für SSB innerhalb der FFB sollen ebenso frühzeitig identifiziert werden.

6. Ergebnisverwertung

Der koordinierte und breit angelegte Forschungsansatz von FESTBATT sichert vor dem Hintergrund einer sehr dynamischen Entwicklung den international sichtbaren wissenschaftlichen Erfolg. Die in FESTBATT zusammengeführten Arbeitsgruppen gehören bereits jetzt zu den international mit führenden Teams, und FESTBATT steht auf Augenhöhe mit entsprechenden Verbundprojekten in Japan, China und Großbritannien. Die begonnenen Arbeiten in allen Plattformen haben daher aus Sicht des Koordinators auch weiterhin sehr gute wissenschaftliche Erfolgsaussichten. Die in der Zukunft vorgesehene weitere Verknüpfung von materialwissenschaftlicher Forschung mit prozesstechnischer Forschung wird diese wissenschaftlichen Erfolge in Richtung zukunftssträchtiger Technologien weiterführen und weitertreiben, so dass die Kette von Wissenschaft zu Technologie sichergestellt wird.

Bereits jetzt ist erkennbar, dass **die enge Kooperation von chemische, physikalisch und materialwissenschaftlich ausgerichteten Arbeitsgruppen mit ingenieurwissenschaftlich arbeitenden Gruppen ein wichtiger Erfolgsfaktor** ist. Hierdurch werden einerseits Grundlagen zielgerichtet erarbeitet, andererseits wird die prozesstechnische Arbeit durch hochwertige Materialien und bestmögliche Analytik gestärkt.

Der Ansatz von FESTBATT, SE- und SSB-Konzepte in großer Breite zu verfolgen, sichert ein Höchstmaß an wirtschaftlicher Verwertung. Bereits jetzt ist erkennbar, dass Polymer-basierte Zellkonzepte erfolgreich für den Einsatz in Elektrobussen (wo geheizte Zellen aufgrund der sehr regelmäßigen und kontinuierlichen Nutzung ökonomisch sinnvoll sind) entwickelt werden. Thiophosphat-basierte Zellkonzepte mit Lithiummetallanode werden weltweit für den Einsatz in Pkw entwickelt, und Oxid-basierte Zellkonzepte könnten z. B. bei besonderen Anforderungen an die Langzeitstabilität zum Einsatz kommen. Daneben können SE als Einzelkomponenten (Separatoren, Zwischenschichten, Beschichtungen, etc.) Bedeutung erlangen und Anteil an der Weiterentwicklung elektrochemischer Speicherkonzepte haben. Es sei darauf hingewiesen, dass SE auf dem Gebiet der Brennstoffzellen (Polymer- und Festoxid-BZ; PEM-FC, SOFC) alle ursprünglichen Zellkonzepte mit flüssigen Elektrolyten (Alkali- und Phosphorsäure-BZ) verdrängt haben.

SSB werden international von zahlreichen kleinen und großen Industrieunternehmen entwickelt, und der Kompetenzaufbau durch FESTBATT sichert das nötige Fachwissen deutscher Unternehmen.

Der vorwettbewerbliche Charakter von FESTBATT und die transparente, auch auf Öffentlichkeit ausgerichtete Arbeit des Kompetenzclusters (z. B. Industrietag(e), digitale Laboreinblicke für den Managementkreis) sichern den Anschluss an weitere wissenschaftlich-technische Vorhaben. Erste Früchte in Richtung wirtschaftlicher Anschlüsse sind bereits jetzt, nach zwei Jahren erfolgreicher Projektarbeit, erkennbar.