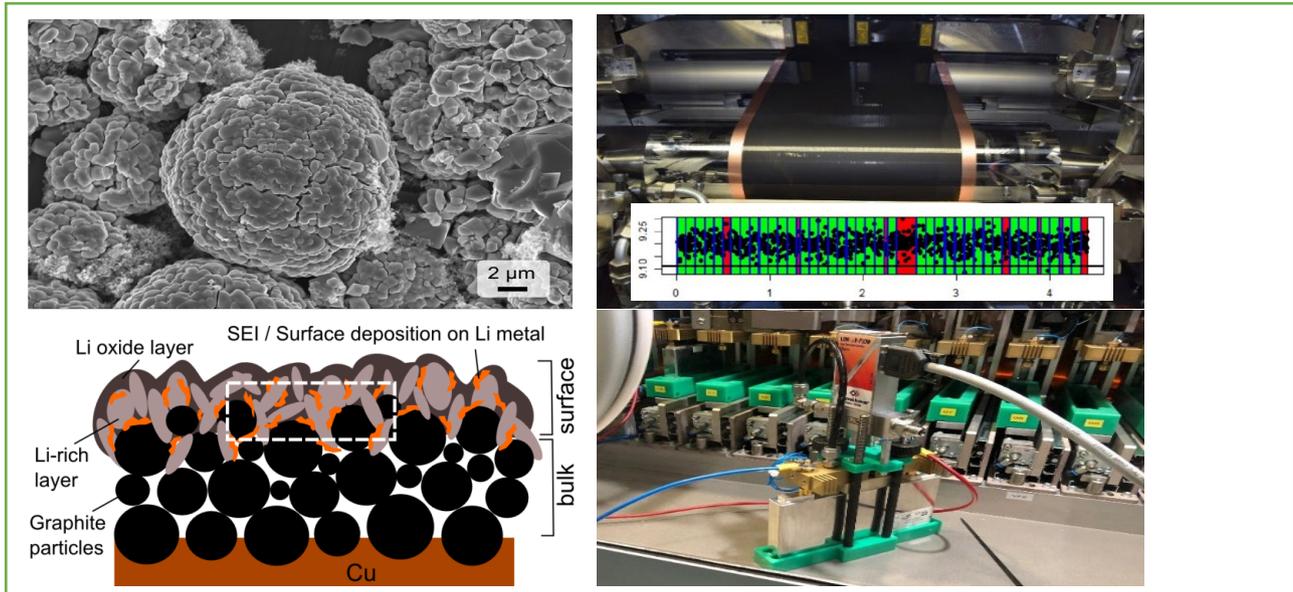


# Rahmenplan zum Kompetenzcluster

Analytik / Qualitätssicherung: Bereitstellung fertigungsbegleitender und fertigungsintegrierter Analyseverfahren für eine nachhaltige und kostengünstige Batteriezellfertigung in Deutschland  
„AQua”



### **Clusterkoordinator 1 (Sprecherin)**

Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung, Baden-Württemberg (ZSW)  
Akkumulatoren Materialforschung  
Dr. Margret Wohlfahrt-Mehrens  
Helmholtzstrasse 8, 89081 Ulm  
0731 9530-612  
margret.wohlfahrt-mehrens@zsw-bw.de

### **Clusterkoordinator 2**

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Institut für Angewandte Materialien (IAM-ESS)  
Prof. Dr. rer. nat Helmut Ehrenberg  
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1  
D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen  
0721 608-47915  
helmut.ehrenberg@kit.edu

### **Clusterkoordinator 3**

Technische Universität München (TUM)  
Department of Chemistry  
Prof. Dr. Hubert A. Gasteiger  
Chair of Technical Electrochemistry  
Lichtenbergstrasse 4, 85748 Garching, Germany  
089 289-13628  
hubert.gasteiger@tum.de

## **1. Mission & Ziele**

**Die Mission des Clusters** ist die Erarbeitung eines **umfassenden prozessübergreifenden Verständnisses** von **Eigenschafts-Struktur-Beziehungen** zwischen **Materialien, Fertigungsschritten und elektrochemischen Kenndaten**.

Der wirtschaftliche Erfolg einer Batteriezellfertigung in Deutschland erfordert sowohl eine nachhaltige und kostengünstige Produktion hochwertiger Zellen als auch die ständige Weiterentwicklung von Lithium-Ionen-Batterien in Hinblick auf verbesserte Performance bei gleichzeitiger Gewährleistung langer Lebensdauer und hoher Sicherheit. Die Komplexität der Prozesse in einer Batterie erfordert die Entwicklung und den Einsatz multipler, komplementärer Analysemethoden und effizienter, standardisierter Charakterisierungsworkflows für die Identifizierung von Eigenschafts-Strukturbeziehungen und die Qualitätssicherung bei der Zellfertigung. Es gibt derzeit keine einzelne Einrichtung, weder in der Industrie noch in der Forschung, die über alle notwendigen Techniken verfügt, um die komplexen Fragestellungen alleine beantworten zu können.

Hier setzt der geplante Analytikcluster an, der komplementäre Methoden und Kompetenzen zur Analyse und Qualitätssicherung bündeln, weiterentwickeln und evaluieren wird, um komplexe Zusammenhänge aufzuklären und damit zu einer schnelleren und effizienteren Batterieentwicklung beizutragen.

Gesamtziel ist die Erarbeitung einer lückenlosen Matrix von Qualitätssicherungsmaßnahmen entlang der gesamten Wertschöpfungskette von den Ausgangsmaterialien über die Elektroden- und Zellfertigung bis hin zur Gesamtzelle, um einen schnelleren Transfer von Forschungsergebnissen auf Materialebene in

kommerzielle Zellen zu ermöglichen und gleichzeitig durch Prozessoptimierung in der Fertigung bei garantierten Leistungskennwerten Kosten zu reduzieren.

Die folgenden Ziele werden adressiert:

- Übersicht und Bewertung bestehender Analyse- und Charakterisierungsverfahren für Batteriematerialien, Zellanalysen und in der Elektroden- und Zellfertigung eingesetzter Qualitätssicherungsmethoden und Identifizierung bestehender Lücken und Problemstellungen,
- Aufbau einer Analytik- und Qualitätssicherungsplattform entlang der gesamten Wertschöpfungskette von den Materialien über die Elektroden- und Zellfertigung bis hin zur Gesamtzelle,
- Lösung komplexer Fragestellungen aus Forschung und Industrie mit Hilfe komplementär aufeinander abgestimmter Methoden und Kompetenzen,
- Entwicklung neuer adaptierter Methoden für Analytik und Qualitätssicherung,
- Ermittlung von Analysedaten und Qualität,
- Implementierung von in-line Kontrollen in Fertigungsprozesse zur Erhöhung der Qualität und Reduktion der Kosten,
- Methodenabgleich für Materialcharakterisierung, post-mortem-Analyse und Qualitätsgates in der Fertigung zur besseren Vergleichbarkeit von Ergebnissen und als Inputdaten für Modellierungen und Simulationen,
- Ermittlung von Sollwerten, Toleranzen und Messbedingungen für Elektroden- und Zellausbauprozesse.

Um die gesteckten Ziele erreichen zu können, sind drei in der folgenden Grafik dargestellte Plattformen und Themenschwerpunkte im Kompetenzcluster geplant.

Plattform 1: Materialcharakterisierung - und analytik	Plattform 2: Zellanalytik	Plattform 3: FMEA und in-line Fertigungskontrollen
<p>Leitung: Hubert Gasteiger</p> <p><u>AP 1.1:</u> AM Grenzflächenanalyse via TEM, XPS, TOF-SIMS &amp; FIB-SEM</p> <p><u>AP 1.2:</u> AM Alterung via <i>operando</i> XAS/XES</p> <p><u>AP 1.3:</u> OCV-Hysterese &amp; Alterung via Dilatometrie und Kalorimetrie</p> <p><u>AP 1.4:</u> Analytische Methoden zur Bestimmung der Elektrolytzersetzung</p>	<p>Leitung: Margret Wohlfahrt-Mehrens</p> <p><u>AP 2.1:</u> post-mortem Analysen, Alterung Elektrodendesign</p> <p><u>AP 2.2:</u> Analyse Lithiumplating</p> <p><u>AP 2.3:</u> Zellsensorik</p> <p><u>AP 2.4:</u> Analytische Methoden zur Abschätzung der Sicherheit</p>	<p>Leitung: Helmut Ehrenberg</p> <p><u>AP 3.1:</u> FMEA Prozesse</p> <p><u>AP 3.2:</u> Inline Qualitätskontrolle</p>
<p><b>Begleitmaßnahme:</b> Technologiestudie Benchmarkanalyse, Qualitätssicherungsmethoden, Standardisierung, Datenerfassung –und Auswertung</p>		

Abbildung 1: Struktur des Clusters.

Die Themenschwerpunkte umfassen:

- eine umfassende Materialcharakterisierung mittels komplexer Analysemethoden, wobei ein besonderer Fokus auf der Grenzflächenanalyse, der Identifizierung von Alterungseffekten und asymmetrischer Lade/Entladereaktionen liegt.

- eine umfassende Entwicklung eines Analyseworkflows von Zellen zur Bestimmung von Alterungszustand und Sicherheit und deren Änderung in Abhängigkeit von der Lebensdauer
- FMEA entlang des gesamten Herstellprozesses vom Pulver zur Zelle und Entwicklung geeigneter in-line Qualitätskontrollen und -maßnahmen

### 1.1. Ausführliche Beschreibung des Lösungsansatzes

Trotz 30 Jahre intensiver Forschungs- und Entwicklungsarbeiten an Lithium-Ionenbatterien gibt es immer noch eine Reihe offener Fragen und weitere Optimierungspotenziale. Auf Grund der hohen Komplexität der physikalisch-chemischen Prozesse in einer Batterie, erfordert die zielgerichtete Weiterentwicklung eine möglichst umfassende Kenntnis und Kontrolle der Veränderungen und Wechselwirkungen aller Komponenten in der Zelle. Weitere technologische Fortschritte können nur mit Hilfe einer möglichst umfassenden Charakterisierung und daraus abgeleitetem besseren Verständnis grundlegender Prozesse zeitnah erreicht werden. Eine leistungsfähige Analytik kann dabei wesentlich zu einer schnelleren Optimierung von Batterien für komplexe Anforderungsprofile (spezifische Energie, Zyklenlebensdauer, Leistung, Schnelladefähigkeit, Sicherheit und Kosten) beitragen.

Die in der Fachliteratur publizierten Daten zu Qualitätskriterien von Materialien und Zellkomponenten sind häufig widersprüchlich und nur schwer miteinander zu vergleichen, da es bisher weder eine einheitliche Datenbasis für Materialien und Zellen noch standardisierte Arbeitsabläufe für Probenvorbereitung, Analyseverfahren und Auswerteroutinen gibt. Dies gilt im besonderen Maße für die Charakterisierung von Zwischenprodukten und Prozessen in der Elektroden- und Zellfertigung.

Ausgangspunkt für die im Cluster geplanten Arbeiten ist eine Benchmarkanalyse verfügbarer Zellen, bestehender Fertigungsverfahren für verschiedene Zelldesigns und eine Erhebung und Bewertung in der Fertigung eingesetzter Qualitätssicherungsmethoden. Hierzu soll im Rahmen der Begleitmaßnahme eine Technologiestudie angefertigt werden, in der neben dem Stand der Technik auch Bedarfe von Materiallieferanten, Anlagenbauern, Zellherstellern und der anderen Forschungscluster im BMBF Dachkonzept Forschungsfabrik Batterie an Analytik und Qualitätssicherungsmethoden ermittelt werden sollen. Diese Studie soll auch bereits vorhandene Standards und Spezifikationen erfassen und Vorschläge für die Wahl der Referenzmaterialien, standardisierte Probenvorbereitung und Datenabgleich der Ergebnisse verschiedener Analysemethoden und deren Konsistenz erarbeiten.

Im Rahmen dieser Begleitmaßnahme sollen auch die Grundlagen für eine gemeinsame Datenbasis und –ablage geschaffen werden. So sollen einheitliche Forschungs- und entsprechende Metadatenformate festgelegt und zentral abgelegt werden. Mit einer solchen einheitlichen Datenspeicherung können interinstitutionelle Hürden genommen, theoretische und experimentelle Daten verglichen sowie reproduzierbare Arbeitsflüsse zur Datenanalyse angeboten werden. Das Verknüpfen mit persistenten Identifikatoren ermöglicht es anderen Forschern zudem, sowohl diese Daten als auch die dazu gehörigen Arbeitsflüsse in ihrer Arbeit zu referenzieren. Zur Ermöglichung von Forschungsdatenmanagement und Data Science wird am Institut für Angewandte Materialien des Karlsruher Instituts für Technologie die Karlsruher Dateninfrastruktur für die Materialwissenschaften (Kadi4Mat) entwickelt, welche im Rahmen mehrerer Forschungsvorhaben vorangetrieben wird, darunter der Kompetenzcluster „FestBatt“, in dem vom Land Baden-Württemberg geförderten Science Data Center MoMaF und in Zusammenarbeit mit dem DFG geförderten Exzellenzcluster POLiS. Das Ziel der Software ist es, die Möglichkeit der strukturieren Datenablage mit protokollierter und reproduzierbarer Datenanalyse und -visualisierung zu verknüpfen, wobei Technologien und Systeme mit etablierten und neuen Konzepten verbunden werden sollen. Um die technologischen Anforderungen der verschiedensten Forschergruppen im Überblick zu behalten und die Entwicklungen entsprechend auszurichten steht das Entwicklerteam in engem Kontakt mit verschiedenen

Initiativen und engagiert sich auf nationaler und internationaler Ebene, wie z.B. MaterialDigital, NFDI4Ing, FairMat, EMMC, EMMO.

Komplexe Fragestellungen aus Forschung und Industrie zur Optimierung der Zellfertigung werden mit Hilfe komplementär aufeinander abgestimmten Methoden und Kompetenzen untersucht und die Ergebnisse für die Prozessmodellierung bzw. weitere Optimierung von Elektroden- und Zelldesign und von Fertigungsprozessen zur Verfügung gestellt. Ausgenommen sind rein elektrische Charakterisierungsverfahren von Zellen oder Systemen, da diese bereits im Cluster „Nutzungskonzepte“ eingesetzt und validiert werden.

Entlang dreier Plattformen (s. Abbildung 1) für die Charakterisierung von Material, Zelle und Fertigungsprozessen werden komplementäre Charakterisierungs- und Analysemethoden eingesetzt und weiterentwickelt, um ein möglichst umfassendes Verständnis der Struktur/Eigenschaftsbeziehungen zu erarbeiten. Umfassende Analysen sind notwendig, um maßgeschneiderte Materialien und Batterien für unterschiedliche Anwenderprofile entwickeln zu können und Qualitätsabweichungen entlang des gesamten Lebensdauerzyklus vom Rohstoffmaterial bis zum „End of Life“ des Produkts zu minimieren.

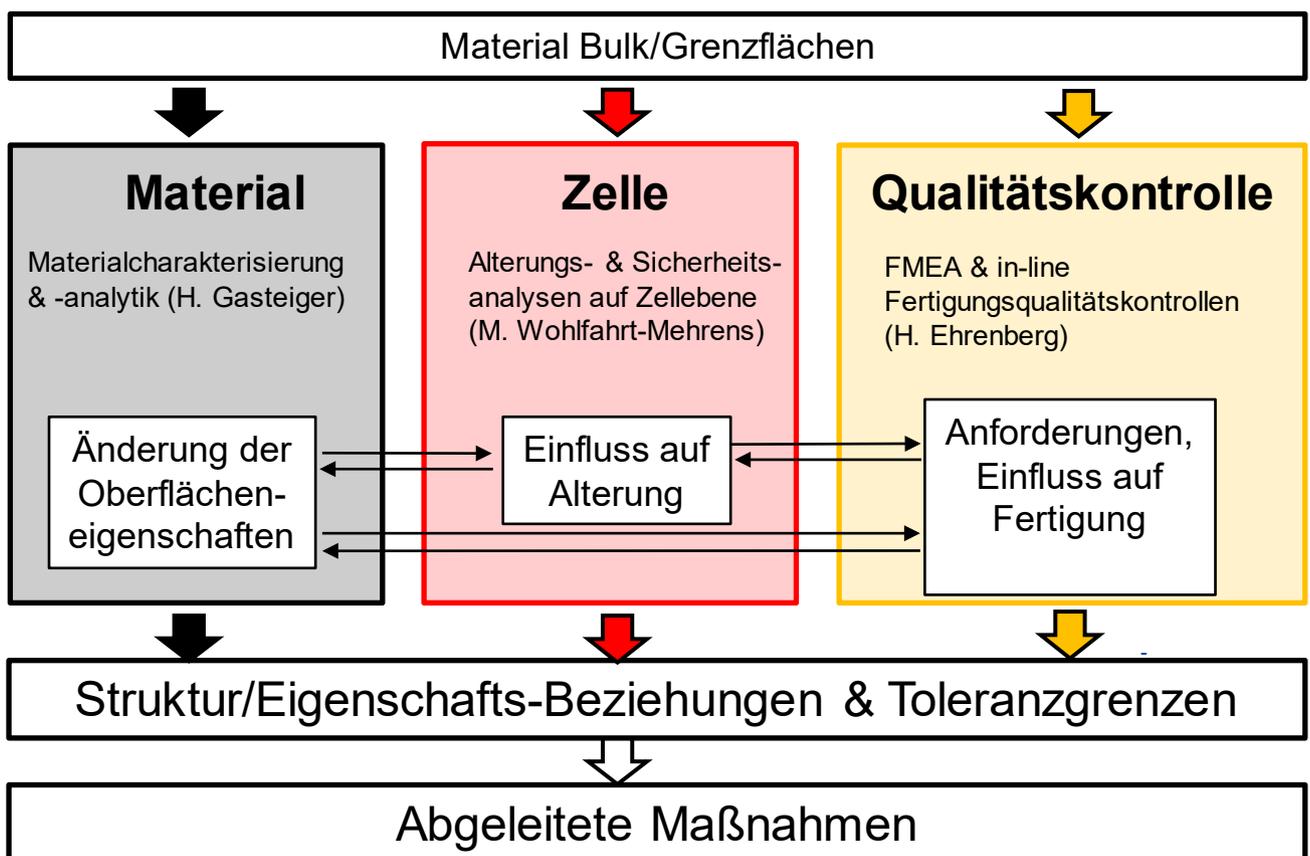


Abbildung 2: Allgemeiner Workflow des Analytikclusters und Wechselbeziehungen zwischen den Plattformen.

Die Schwerpunkte und Arbeitsinhalte der einzelnen Plattformen werden im Folgenden beschrieben:

### Plattform 1 – Materialcharakterisierung und -analytik

Die Entwicklung und Implementierung neuer Anoden- und Kathodenaktivmaterialien (AAMs und KAMs) sowie neuer Elektrolyte und Elektrolytadditive erfordert ein grundlegendes Verständnis der Reaktivität der Aktivmaterialien mit den Elektrolyten/Additiven. Eine Vielzahl der hierfür erforderlichen diagnostischen und analytischen Methoden werden bereits in dem „ExcellBattMat“-Cluster entwickelt und eingesetzt, von

denen im Folgenden die wichtigsten beispielhaft aufgeführt sind. Neben der konventionellen Analyse des Zyklusverhaltens und der Zyklusstabilität von Aktivmaterialien in Lithiumionenbatteriezellen mittels Lade-/Entladezyklen und dQ/dV Analyse ist eine der am häufigsten eingesetzte in-situ/operando diagnostische Methode die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) an Vollzellen, mit deren Hilfe der Zell-Impedanzaufbau von Batteriezellen für verschiedene Kombinationen an Aktivmaterialien, Elektrolyten und Elektrolytadditiven bestimmt werden kann [P1-1]. Um die Veränderung der Zell-Impedanz auf die einzelnen Komponenten aufzuschlüsseln, werden entweder post-mortem Messungen an symmetrischen Zellen [P1-2, P1-3] oder in jüngerer Zeit in-situ/operando EIS Messungen mittels einer Referenzelektrode durchgeführt [P1-4, P1-5, P1-6]. Eine weitere häufig verwendete in-situ/operando Methode ist die Quantifizierung der Gasentwicklung während der Formierung oder über Zyklentests mittels des sogenannten Archimedes Prinzips [P1-7] oder über on-line Massenspektrometrie [P1-8, P1-9, P1-10], wobei letztere neben der Quantifizierung der Gasmenge auch eine Bestimmung der einzelnen Gaskomponenten erlaubt, was detaillierte mechanistische Einblicke liefert. Zur Untersuchung der strukturellen Veränderung der Aktivmaterialien werden vorwiegend ex-situ [P1-11] und in-situ/operando [P1-12, P1-13, P1-14] Röntgendiffraktion (XRD) wie auch in-situ/operando Neutronendiffraktion [P1 15, P1 16] eingesetzt. Neben alterungsbedingten Veränderungen der Aktivmaterialien liefert auch die Bildung von Elektrolytzersetzungsprodukten während der Formierung/Zyklisierung und die Bildung von im Elektrolyten gelösten Übergangsmetallen wichtig Hinweise auf die relevanten Alterungsmechanismen, wobei zurzeit vorwiegend post-mortem Analysen eingesetzt werden [P1-17, P1-18, P1-19].

Während die in den „ExcellBattMat“ Projekten aufgebauten und sich unter Entwicklung befindenden diagnostischen Methoden viele der kritischen Fragestellungen zur Anoden- und Kathodenaktivmaterial Performance und Lebensdauer und zu den Zersetzungsmechanismen der Elektrolyte und Elektrolytadditive adressieren, liegt der Schwerpunkt in Plattform 1 des Analytikclusters auf der Methodenweiterentwicklung und dem Einsatz komplementärer und vor allem von in-situ/operando Analysetechniken, um ein vollständigeres Bild zu ermöglichen. Ziel dieser Plattform ist die umfassende Ermittlung der Eigenschafts-Struktur-Beziehungen auf Materialebene (sowie auf Zellebene in Plattform 2), um damit Einsatzpotenziale und Limitierungen von Materialkombinationen frühzeitig abschätzen und wesentliche Hinweise für das zielgerichtete „Engineering“ von Materialien und Partikeldesign geben zu können. Zusätzlich sollen neue Fragestellungen, die sich aus der Zusammenarbeit mit dem Industriemanagementkreis ergeben, mit aufgegriffen werden. Fragen zu Festkörperbatterien sollen erst adressiert werden, nachdem die Methoden für Flüssigelektrolytzellen validiert und mögliche Bedarfe des „FestBatt“-Clusters formuliert wurden.

Der Fokus der anvisierten Arbeiten in Plattform 1 ist in 4 Arbeitsbereiche gegliedert, die die folgenden wichtigen Fragestellungen bezüglich der Materialcharakterisierung und -alterung adressieren.

- AP 1.1: Schichtoxid-basierte Kathodenaktivmaterialien verlieren bei hohen Delithierungsgraden (ab ca. 80%) Gittersauerstoff, was zur Bildung O-verarmerter Oberflächenschichten auf der Nanometer Skala ( $M_3O_4$  & MO Strukturen) mit hoher Impedanz [P1-20, P1-21] und zur Elektrolytzersetzung durch reaktive Sauerstoffspezies führt [P1-22, P1-23]. Ein ähnlicher Verlust von Gittersauerstoff findet beim Trocknen von gewaschenen LCP oder NCMs statt [P1-24, P1-25]. Eine ähnliche Strukturveränderung wird auch mit Silicium Aktivmaterialien beobachtet, sowohl für Submikrometer Partikel [P1-26] wie auch für teil-lithiierte Silicium Partikel mit Durchmessern von mehreren Mikrometern [P1-27].

Um diese Veränderungen der Aktivmaterialien bei der Formierung bzw. bei der Alterung über Lade/Entlade Zyklen zu verfolgen, ist ein Ausbau der Kompetenz in der spezifischen Anwendung von Methoden erforderlich, die eine Auflösung auf einer Nanometer- bzw. auf atomarer Skala (hochauflösendes TEM) und eine Bestimmung der chemischen Zusammensetzung über wenige Monolagen hinweg erlauben (XPS mit Tiefenprofilierung, TOF-SIMS, FIB SEM). Hiermit können Einblicke in die SEI/CEI Bildung, die Bildung von Spinell/Rocksalt Oberflächenschichten auf Schichtoxid basierten

KAMs (bei der Zyklisierung wie auch beim Trocknen nach dem Waschen von vor allem Ni-reichen KAMs), sowie die Riß- und Porenbildung in KAMs und Silicium-basierten AAMs gewonnen werden. Da KAMs zumeist mit Dotierstoffen stabilisiert werden, soll hier deren Konzentrationsprofil vor und nach Alterung bestimmt und mit der Alterung (z.B. Aufbau von Impedanz) korreliert werden. Hier sollen Methoden ausgebaut werden, die tiefere Einblicke in die alterungsbedingte Oberflächenveränderung von AMs liefern können und somit neue Materialsynthesestrategien, Formierungsstrategien und neue post-mortem Analysen erlauben. Beispielhaft könnten somit folgende Fragestellung untersucht werden:

- Wie sind die O-verarmten Oberflächenschichten von Schichtoxid basierten KAMs aufgebaut, wenn diese entweder elektrochemisch oder chemisch delithiiert werden?
- Welche chemische Zusammensetzung haben die gebildeten  $MO_x$  Oberflächenschichten und die darauf abgeschiedenen Elektrolytzersetzungsprodukte?
- Was ist der Einfluss der Zellzyklenparameter (C-Rate, Temperatur, Abschaltpotentiale, etc.) und der Zyklenzahl?
- Wie verläuft das Wachstum O-verarmer Oberflächenschichten in den freigelegten Cracks zwischen den KAM Primärpartikeln?
- Was beeinflusst die Oberflächenstrukturierung und -vergrößerung bei der Zyklisierung von Silicium basierten Aktivmaterialien?

Insgesamt sollen in diesem Arbeitspaket Charakterisierungsmethoden ausgebaut werden, die genauere Einblicke in die Alterung bzw. die Oberflächenveränderung von Aktivmaterialien liefern können. Dies kann zu neuen Materialsynthesestrategien und neuen Formierungsstrategien liefern, aber auch post-mortem Analysemethoden schaffen, mit denen diese Alterungsphänomene mechanistisch untersucht und verstanden werden können.

- AP 1.2: Die bei Alterungstests beobachtete Übergangsmetallauflösung aus den Kathodenaktivmaterialien und deren Abscheidung auf der Graphitanode [P1-18, P1-28] führt zu verstärktem SEI Wachstum und Impedanzaufbau, was die Lebensdauer reduziert und vor allem die Ratenfähigkeit negativ beeinflusst; allerdings wird das Ausmaß dieses Effekts in der Literatur immer noch kontrovers beschrieben [P1-29, P1-30]. Während die meisten Untersuchungen in diesem Bereich sich auf post-mortem Analysen gealterter Elektroden stützen, ist für ein detailliertes mechanistisches Verständnis die Weiterentwicklung von in-situ/operando Methoden zur Verfolgung der Metallauflösung essentiell, was zum Beispiel mittels in-situ/operando Röntgenabsorptions Spektroskopie (XAS) Messungen möglich ist [P1-31]. Mit Bezug auf die Weiterentwicklung von NCM basierten Kathodenaktivmaterialien in Hinsicht auf Nachhaltigkeit (kein bzw. minimaler Kobaltgehalt), Kosten (hoher Mangananteil) und Energiedichte sind Li- und Mn-reiche NCMs (LMRNCMs, oft auch als HE-NCM benannt) sehr vielversprechend, zumal hierfür auch Kobalt-freie Materialien prinzipiell in Frage kommen [P1-32]. Die hohe Kapazität dieser Materialien wird vor allem deren Sauerstoffredoxaktivität zugeschrieben [P1-33], die aber gleichzeitig für deren Leerlaufspannungs (OCV) Hysterese und deren Spannungsverlust über die Zyklisierung verantwortlich gemacht wird [P1-34, P1-35]. Für ein tieferes Verständnis und die detaillierte Charakterisierung dieser Materialien sollen hier ex-situ soft-XAS Methoden ausgebaut und in-situ/operando Röntgenemissionsspektroskopie (XES) basierte Messmethoden entwickelt werden.

In diesem Arbeitspaket sollen die obengenannten Methoden entwickelt werden, um die Alterung von Aktivmaterialien unter verschiedenen Betriebsbedingungen (Lade/Entladepotentiale, Temperatur, etc.) mit Bezug auf die Übergangsmetallauflösung von KAMs und deren Abscheidung auf der Anode zu untersuchen, wobei vor allem auch der Einfluss von Elektrolyten und von Elektrolytadditiven auf diesen Prozess untersucht werden soll. Weiterhin soll ex-situ soft-XAS eingesetzt werden, um die Bildung von

Oberflächenphasen komplementär zu AP 1.1 zu bestimmen. Letztlich soll das Ausmaß von Sauerstoff Redox Effekten bei LMRNCMs untersucht werden, um diese Klasse von Kathodenaktivmaterialien besser zu verstehen und weiterzuentwickeln. Begleitend hierzu sollen ab-initio Methoden angewandt werden, die zum einen die potentiellen atomaren Prozesse abbilden (z.B. bei der Delithiierung/Lithiierung, bei der Elektrolytzersetzung) und zum anderen die Interpretation der XAS/XES Spektren auf einer fundamentalen Skala ermöglichen. Beispielhaft könnten somit folgende Herausforderungen und Fragestellungen adressiert werden:

- Quantifizierung der Übergangsmetallauflösung durch in-situ/operando Messmethoden.
- Gibt es eine Korrelation zwischen Alterung (bzgl. Kapazität und Ratenfähigkeit) und Übergangsmetallkonzentration in der Anode?
- Welchen Einfluss auf die Alterung hat die Übergangsmetallauflösung bei Silicium Anoden?
- Entwicklung von in-situ/operando soft-XAS/XES Zellen zur Quantifizierung des Sauerstoff Redox Verhaltens in LMRNCMs und zur Untersuchung O-verarmter Oberflächenschichten auf NCMs.

Langfristig sollen die Ergebnisse dieses Arbeitspakets dazu beitragen, Übergangsmetallauflösungsprozesse in Batteriezellen als Funktion der Betriebsbedingungen und der Elektrolytzusammensetzung abschätzen zu können, was eine Interpretation von Alterungsdaten an großformatigen Zellen erleichtern sollte. Weiterhin wird erhofft, ein grundlegendes Verständnis der Alterungsprozesse in Zellen mit LRMCMN basierten Kathoden Aktivmaterialien zu entwickeln, mit dem es möglich sein wird, das zukünftige Potential dieser Materialklasse für die Zellfertigung abzuschätzen.

- AP 1.3: Zahlreiche der Aktivmaterialien der nächsten Generation weisen eine erhebliche OCV-Hysterese in den Strom-Spannungskurven auf (z.B. Silicium [P1-36], LMRNCM [P1-37]), was neben der damit einhergehenden verminderten Effizienz auch zu einer hohen Abwärmelast führt, was mittels hochaufgelöster kalorimetrischer Messungen bestimmt werden könnte [P1-38]. Diese Methode erlaubt nicht nur eine Klärung der Frage, ob die durch die OCV Hysterese bedingte Abwärme beim Laden oder Entladen stattfindet (relevant für das Batteriemangement), sondern sollte auch Einblicke liefern, auf welche atomaren Vorgänge dies zurückgeführt werden kann. Weiterhin kommt bei Silicium basierten Anoden zur OCV Hysterese noch die signifikante Volumenveränderung über den Lade- und Entladezyklus hinzu, was nicht nur zu einer permanenten morphologischen Veränderung der Silicium Partikel [P1-26, P1-27], sondern auch häufig zu einer Destabilisierung der Elektrodenstruktur über die langfristige Zyklisierung des Materials führt [P1-39]. Die Abhängigkeit der Dickenänderung der Zellen als Funktion der Elektrodenzusammensetzung und der Betriebsbedingungen (Abschaltspannungen, C-Rate, Temperatur) kann mittels in-situ/operando dilatometrischen Messungen bestimmt werden [P1-40, P1-41, P1-42].

In diesem Arbeitspaket sollen kalorimetrische Messmethoden weiterentwickelt werden, um die OCV Hysterese, deren Ursachen und deren Auswirkungen auf die Wärmelast von Batteriezellen zu untersuchen und zu quantifizieren. Die mittels Dilatometrie bestimmten Elektrodendickenänderungen in Zellen mit Silicium Anoden sollen in Abhängigkeit von der Struktur des Siliciums (z.B. nano Silicium Komposite oder  $\mu\text{m}$ -große Si-Partikel) bestimmt werden. Beispiele relevanter zu beantwortender Fragestellungen sind:

- Wie teilen sich die der OCV Hysterese entsprechenden Wärmemengen bei Aktivmaterialien mit OCV Hysterese auf den Lade und den Entladeprozess auf?
- Welche neuen Einblicke in die Funktion von Li- und Mn-reichen NCMs können mittels kalorischer Messungen gewonnen werden?
- Wie hängt die Dickenveränderung von Silicium basierten Anoden von der Morphologie der Silicium Partikel und vom Nutzungsgrad des Siliciums ab?

- Kann die beobachtete Dickenveränderung von Silicium basierten Anoden durch externen Kompressionsdruck beeinflusst werden?

Die Quantifizierung der Verteilung der OCV Hysterese bedingten Wärmeflüsse auf den Lade- und den Entladeprozess beim Einsatz neuer Aktivmaterialien (LMRNCMs, Silicium) kann anschließend für die Auslegung von Batteriesystemen genutzt werden. Weiterhin können die Daten zur Veränderung des Elektrodenvolumens mit der Zyklisierung eine wichtige Grundlage für das Batteriezellendesign mit diesen neuen Materialien bilden.

- AP 1.4: Die Bestimmung der Zersetzungsmechanismen von Elektrolyten und Additiven erfolgt bisher zum Großteil durch on-line Massenspektrometrie, womit zwar die Umesterungsreaktionen quantifiziert werden können [P1-43], aber womit schwer flüchtige Produkte bei der SEI/CEI Bildung nicht erfassbar sind. Somit sollen hier neue analytische Methoden entwickelt werden, mit denen flüssige Zersetzungsprodukte durch ex-situ und in-situ/operando Messungen bestimmt werden können, vor allem auch mit Fokus auf Ethylencarbonat-freie Elektrolyte [P1-44] und neue Additive [P1-19, P1-45]. Kritisch ist vor allem die Erfassung von Elektrolytverunreinigungen im 100-1000 ppm Bereich, die mit den herkömmlichen NMR Messungen zumeist nicht erfasst werden; vor allem protische Verunreinigungen (z.B. Alkohole) in diesem Konzentrationsbereich können sich stark auf die Gasentwicklung der Zellen auswirken [P1-31].

Hier sollen also analytische Methoden weiterentwickelt werden, die eine ex-situ Analyse von Elektrolytverunreinigungen im 100-1000 ppm Bereich erleichtern. Weiterhin wäre es erstrebenswert, Methoden zu entwickeln, die eine in-situ/operando Analyse des Elektrolyten ermöglichen, was vor allem die Analyse der Prozesse bei der Formierung der Zellen mit neuen Elektrolyten und Elektrolytadditiven voranbringen würde. Beispielhaft sollen in diesem Arbeitspaket folgende Punkte adressiert werden:

- Weiterentwicklung von analytischen Methoden, die eine Quantifizierung von Verunreinigungen in Elektrolyten im 100-1000 ppm Bereich erlauben,
- Entwicklung von in-situ/operando Methoden, die eine Untersuchung von Elektrolytzersetzungsreaktionen (elektrochemisch, thermisch) ermöglichen,
- Erarbeitung eines grundlegenden Verständnisses der oxidativen und reduktiven Zersetzungsreaktionen Ethylencarbonat-freier Elektrolyte und neuer Additive.

Die hier entwickelten Methoden sollen neben mechanistischen Studien, die die Entwicklung neuer Elektrolyte/Additive befördern sollen, auch für die Qualitätskontrolle von Elektrolyten in der Zellfertigung genutzt werden.

## **Plattform 2 – Zellanalytik**

Performanceparameter wie Leistung, Lebensdauer, Schnellladefähigkeit und Sicherheit werden nicht allein durch die verwendeten Aktivmaterialien bestimmt, sondern ganz wesentlich auch durch das Elektroden- und Zellendesign. Die Langlebigkeit einer Lithium-Ionen-Batterie im praktischen Gebrauch, d.h. bei unterschiedlichen Operationsbedingungen ist ein wesentliches Qualitätskriterium. Die weitere Optimierung von Batterien setzt daher eine detaillierte Kenntnis der Alterungsmechanismen und deren Auswirkungen voraus. Neben strukturbedingten Änderungen oder Grenzflächenreaktionen der Aktivmaterialien spielen insbesondere Wechselwirkungen der Komponenten im Gesamtzellverbund eine signifikante Rolle für die Zellalterung. Zur Ermittlung von Alterungs- und Fehlermechanismen werden in der Regel post-mortem Analysen an neuen und gealterten Zellen durchgeführt. Hierzu werden die Zellen geöffnet und anschließend die Komponenten mit verschiedenen physikalisch-chemischen Methoden

untersucht. Eine gute Zusammenfassung des Stands der Technik geben zwei kürzlich erschienene Übersichtsartikel [P2-1, P2-2].

Nicht destruktive Methoden zur Alterungsbestimmung umfassen elektrische Meßverfahren wie z.B. „incremental capacity analysis“ (ICA) [P2-3, P2-4], elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) [P2-5, P2-6, P2-7], die nicht Gegenstand dieses Clusters sind. Andere nicht zerstörende Methoden umfassen X-ray Computertomographie (CT) [P2-8, P2-9, P2-10] und Neutronentomographie [P2-11, P2-12]. Für detailliertere Alterungsuntersuchungen müssen die Zellen geöffnet, die Komponenten separiert und anschließend mit verschiedenen Methoden analysiert werden. Einen Überblick über verschiedene Charakterisierungsmethoden gibt die folgende Abbildung.

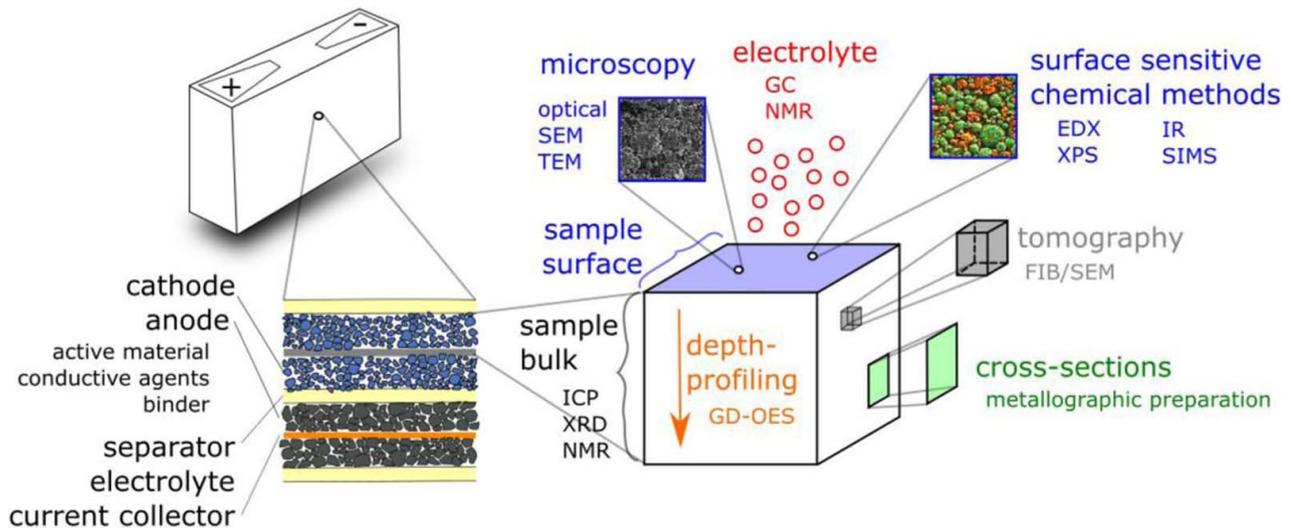


Abbildung 3: Schematische Darstellung der Komponenten einer Lithium-Ionen-Batterie und physikalisch-chemische Methoden zur Charakterisierung nach Zellöffnung [P2-1].

Ziele der Plattform 2 sind die Ermittlung von Alterungsmechanismen in Abhängigkeit vom Elektroden- und Zelldesign und die zuverlässige Vorhersage von Lebensdauer- und Sicherheitsparametern auch für neue Materialkombinationen. Für die Analysen werden Pouchzellen oder für spezielle Untersuchungen auch zylindrische Zellen im 21700-Format hergestellt. Die dazu notwendigen Elektroden werden in Plattform 3 gefertigt. Zum Methodenvergleich werden auch ausgewählte kommerzielle Zellen im „frischen“ und gealterten Zustand analysiert. Es sollen verschiedene Themenkomplexe untersucht werden, die für die weitere Optimierung von Lithium-Ionen-Batterien relevant sind.

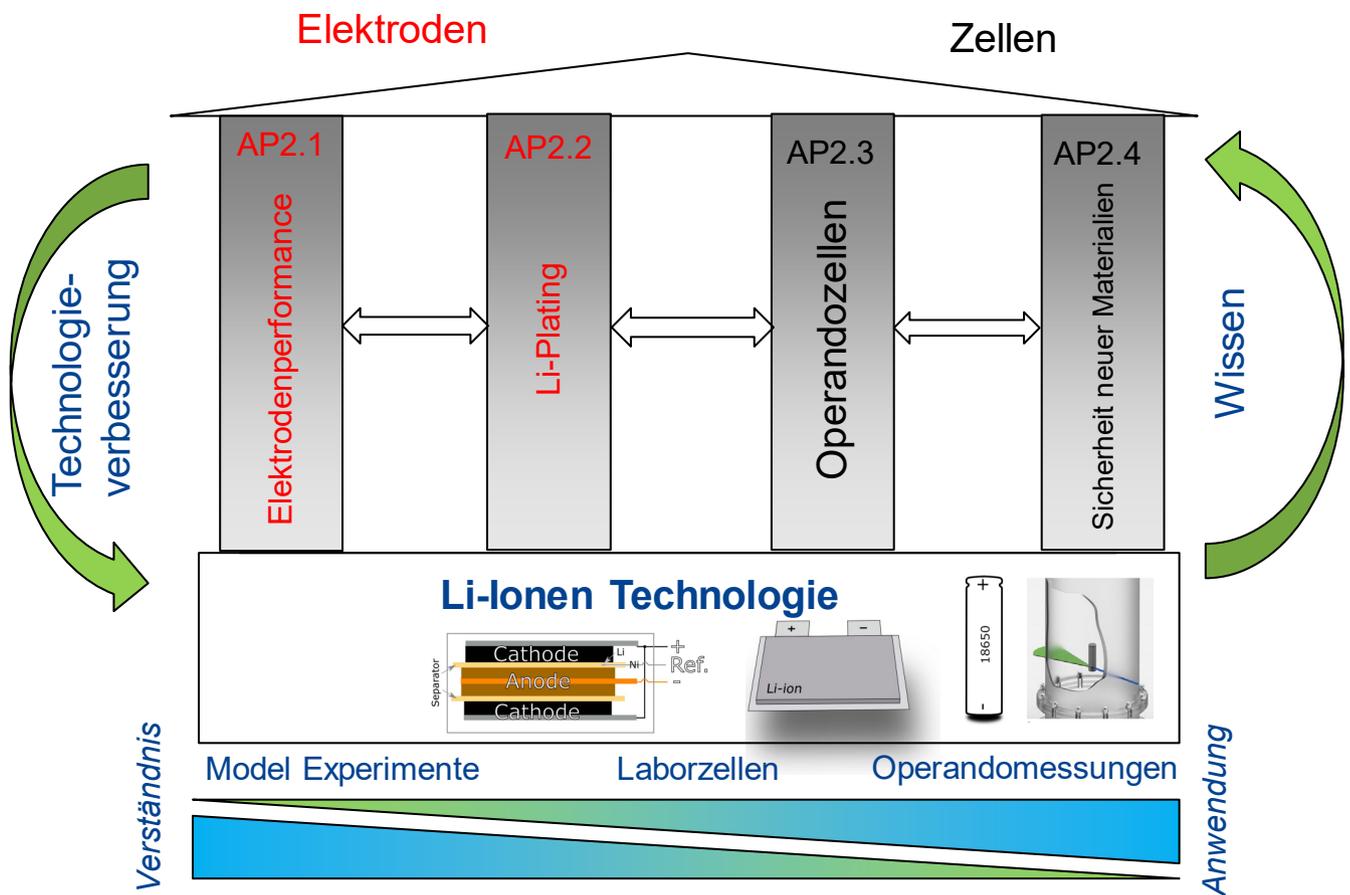


Abbildung 4: Schematische Darstellung der Themenkomplexe, Zelldesigns und Interaktionen in Plattform 2 Alterungs- und Sicherheitsanalysen.

Ziel der Arbeiten in Plattform 2 ist die Charakterisierung ganzer Zellen bei verschiedenen Lade- und Alterungszuständen mit komplementären Methoden. Es sollen Workflows definiert werden, die die Abwicklung arbeitsteiliger Vorgänge mit dem Ziel größtmöglicher Effizienz ermöglichen. Themenschwerpunkte sind:

- post-mortem Analysen Elektroden- und Zelldesign (Fehlerfortpflanzung),
  - Lithiumplating als dominanter Alterungsmechanismus,
  - Alterungsmechanismen nächste Generation (Si/C; manganreiche KAMs; Operationsfenster),
  - Kontrolle über interne Sensorik,
  - Abschätzung Sicherheit vom Pulver bis zur Zelle.
- AP 2.1: Die Mikrostruktur der Elektroden bestimmt im Wesentlichen die Performancedaten einer Batterie in Hinblick auf Energiedichte, Leistung und Schnellladefähigkeit. Sie spielt zudem eine wesentliche Rolle für die Alterung der Zelle. Eine genaue Kenntnis der Elektrodenzusammensetzung (Russ- und Binderverteilung), der Homogenität und der Mikrostruktur der Elektroden und deren Änderungen während der Lade/Entladevorgänge ist zwingend notwendig für die weitere Optimierung. Dies gilt im besonderen Maße für neue Aktivmaterialien wie z.B. SiAMs, da sich die Struktur auf Grund der Volumenschübe während des Zyklisierens verändert.

Die Elektrodenperformance in Abhängigkeit von Parametern wie Beladung, Zusammensetzung (Russ und Binderverteilung), Adhäsion zum Stromableiter, Porosität, Elektrolytverbrauch und deren Änderungen mit der Alterung soll sowohl mittels ex-situ post-mortem Analysen, bildgebenden Verfahren und chemischen Analysen als auch mit operando Verfahren wie z.B. operando  $\mu$ /nano X-Ray

Tomographie an Zellen mit frischen und gealterten Zellen untersucht werden. Die erhaltenen experimentellen Daten werden mit Modellierungen und numerischen Simulationen gekoppelt. Für AAM/KAM-Kombinationen der nächsten Generation ist der Einfluss vieler Faktoren auf die Lebensdauer noch nicht hinreichend untersucht. Alterungsprofile, Änderungen der Elektrodenstruktur und Gasbildung sollen mit Hilfe komplementärer Analysemethoden, die teilweise auf die spezifischen Anforderungen noch angepasst und weiterentwickelt werden müssen, untersucht werden.

- AP 2.2: Lithiumplating auf der Anodenseite führt einerseits zu einer signifikanten Beschleunigung der Alterung und stellt andererseits ein ernstzunehmendes Sicherheitsrisiko dar. Das Auftreten irreversiblen Lithiumplatings limitiert die Schnellladefähigkeit von Zellen und ist von einer Reihe von Faktoren abhängig wie Partikelmorphologie und -größenverteilung des Graphits, Flächenmassenbelegung, Porosität und Tortuosität der Elektrode, Elektrolytverteilung in der Zelle, Elektrodenbalancierung und Operationsbedingungen wie Temperatur, Stromdichte und Ladeschlußspannung [P2-13].

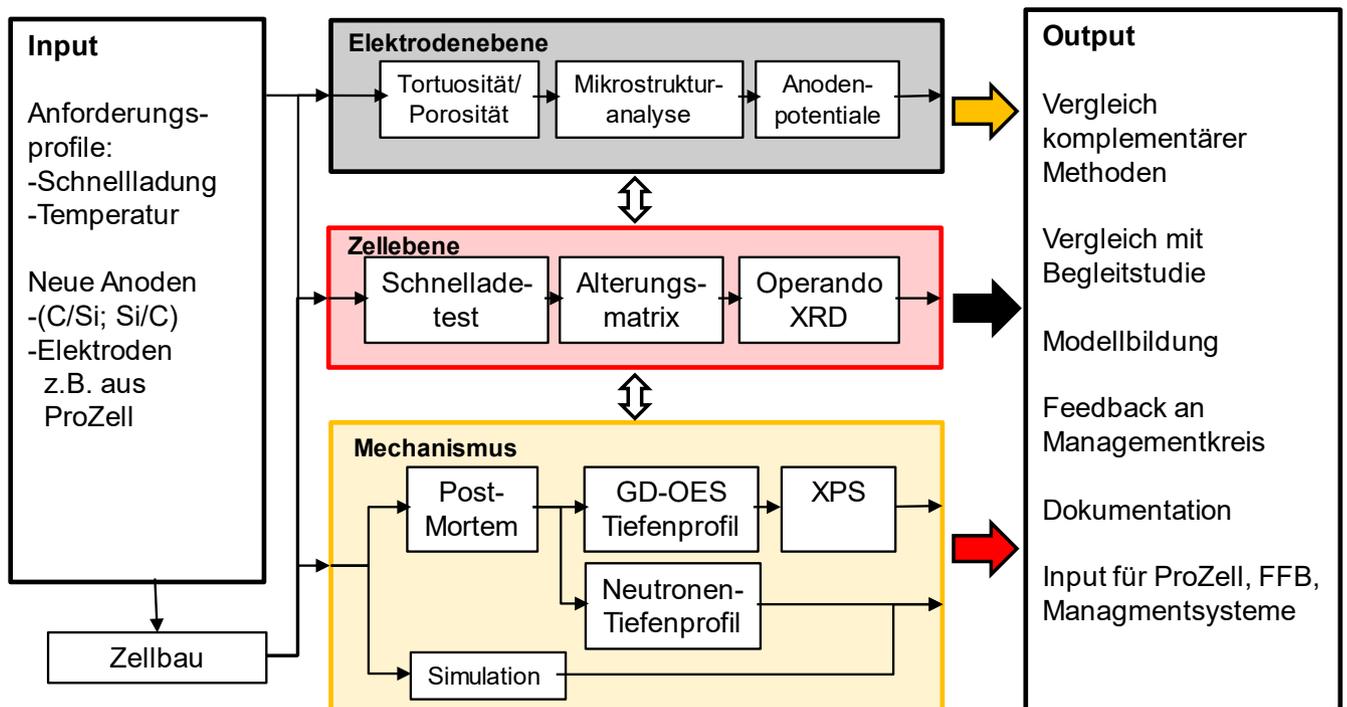


Abbildung 5: Beispiel eines Workflows zur Untersuchung des Auftretens von Lithiumplating.

Für die Untersuchungen von Lithiumplating sollen neue Charakterisierungsmethoden wie operando optische Mikroskopie, operando Neutronendiffraktion und operando Referenzelektrodenmessungen eingesetzt und die Ergebnisse mit ex-situ durchgeführten post-mortem Analysen, wie z.B. den Resultaten optischer Inspektionen und chemischer Analysen verglichen werden.

- AP 2.3: Während der Zyklierung von Lithium-Ionen-Batterien ändern sich innerhalb der Zelle gleichzeitig zahlreiche Parameter wie Elektrodenpotentiale, Widerstand, Druck und Temperatur. Die Einbringung von Sensoren in Modellzellen und kommerzielle Zellen soll das Monitoring eines oder mehrerer Parameter während der Zyklierung in Echtzeit ermöglichen. Mit Hilfe der Daten lassen sich z.B. Temperaturgradienten in Zellen genauer simulieren. Diese Technik kann signifikant zur Optimierung von Elektrodenkombinationen und Betriebsparametern in Hinblick auf erhöhte Lebensdauer und Sicherheit beitragen.
- AP 2.4: Die frühzeitige Abschätzung der Sicherheit ist ein kritischer Aspekt insbesondere auch für die Einführung neuer Materialkombinationen. DSC-Messungen an Elektroden/Elektrolytkombinationen

liefern erste Basisinformationen zu exothermen Reaktionen, die zu einem thermal runaway führen könnten. Exakte Flamm- und Zündpunktbestimmungen für verschiedene Elektrolytformulierungen können für Modellierungen genutzt werden. ARC-Messungen von Zellen geben weitere Hinweise auf die Auslösung kritischer exothermer Reaktionen und ermöglichen die Festlegung sicherer Betriebsstrategien für die Zellen nächster Generation. Diese Methoden sollen durch die Einbringung zusätzlicher Analytik, z.B. online Gasanalyse weiterentwickelt werden.

### Plattform 3: Failure Mode and Effects Analysis (FMEA) und in-line Fertigungsqualitätskontrollen

Ziele dieser Plattform sind die Identifizierung möglicher Fehlerquellen im gesamten Produktionsprozess, die quantitative Bestimmung von Toleranzgrenzen aller Prozessschritte und die Erarbeitung standardisierter Workflows für Qualitätssicherungsmaßnahmen entlang der gesamten Elektroden- und Zellfertigungskette (Abb. 6).

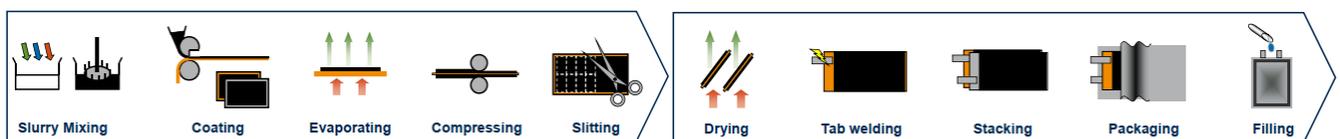


Abbildung 6: Schematische Darstellung der Prozesskette zur Fertigung von Pouchzellen von der Pastenherstellung bis zur Formation.

Zu diesem Zweck wird auf prozessbegleitende Werkzeuge zurückgegriffen, die sich in anderen Produktbereichen als qualitätsverbessernde Maßnahmen im Rahmen des Produktentwicklungs- und Produktionsprozesses etabliert haben. In AP 3.1 wird das Konzept der Failure Mode and Effects Analysis (FMEA) auf die Fertigungsprozesse zur Batteriefertigung angewendet. FMEA erlaubt die Identifikation von Fehlerquellen im Herstellungsprozess, die einen signifikanten Einfluss auf die Leistungsdaten der gefertigten Batteriezellen aufweisen. Durch das Einbringen gezielter Fehler kann ein quantifizierbarer Zusammenhang zwischen Störung und Auswirkung abgeleitet werden. Dies ermöglicht die Festlegung von Toleranzgrenzen, die im Fertigungsprozess eingehalten werden müssen, um ein vorgegebenes Leistungskriterium als Qualitätsziel sicher einhalten zu können. Hierzu müssen Elektroden und Zellen in ausreichender Menge mit spezifischen Fehlern produziert werden, um statistisch belastbare Aussagen zu erhalten.

Eine die Prozesskette begleitende in-line-Analytik in AP 3.2 bildet eine wesentliche Voraussetzung für die Etablierung von qualitätsverbessernden Maßnahmen, da die kritischen Einflussgrößen in Echtzeit während der Fertigung erfasst und Zwischenprodukte unmittelbar nach dem jeweiligen Prozessschritt überprüft werden können. Prozessstörungen können so frühzeitig entgegengewirkt werden. Zudem kann erreicht werden, dass Fehler bereits in den Zwischenprodukten erkannt werden. Hierdurch besteht die Gelegenheit zur frühzeitigen Eliminierung des Abschnitts oder einer Rückkoppelung auf den verursachenden Prozessschritt, um die Prozessstörung frühzeitig zu beseitigen. Durch den Eingriff nahe am Entstehungsort kann vermieden werden, dass auch nachfolgende Prozessschritte betroffen sind und so die Bildung und der Umfang von Ausschuss minimiert werden, wodurch ein wesentlicher Beitrag zu einer Kostenreduktion geleistet werden kann.

Die Untersuchung und Implementierung von Lösungsansätzen entlang der gesamten Prozesskette, beginnend mit den Ausgangsmaterialien bis hin zur end-of-line-Bewertung auf Zellebene, sollen das angestrebte Ergebnis der Arbeiten sein. Das Ausmaß und die Diversität der etablierten Prozesskette im Batteriebereich erlaubt eine vollständige und gleichzeitige Abdeckung aller Prozessabschnitte aber nur mit einem Aufwand, der den verfügbaren Finanzrahmen überschreitet. Es ist daher zunächst zielführender, die Mittel unter Bildung von Schwerpunkten einzusetzen, die einen maximalen Beitrag zur Verbesserung der Fertigungsqualität versprechen. Hierzu wurde für eine erste Phase zur in-line-Prozessüberwachung in AP 3.2 der Abschnitt der Elektrodenfertigung von der Pastenpräparation (inklusive Eingangskontrolle) bis zur

kompaktierten, getrockneten Elektrodenbahn identifiziert. Die prozessorientierte FMEA von AP 3.1 findet dagegen Anwendung bei der Zellausfertigung, da dieser Abschnitt wesentlich zugänglicher für eine systematische Fehlereinbringung und Fehlerbewertung ist. Eine Ausweitung des Anwendungsbereichs auf angrenzende Prozessabschnitte soll Inhalt nachfolgender Projektphasen sein.

#### -AP 3.1: Prozess-FMEA

Alle Produktionsschritte im Rahmen der Zellfertigung sind fehleranfällig und zeigen im Ergebnis eine von Prozesskenntnis und Prozessbeherrschung abhängige Streuung. Daher sollen Verfahren zur Bestimmung der jeweiligen Toleranzbänder entwickelt und angewandt werden, um die Fähigkeit und Beherrschbarkeit der Prozesse beurteilen und verbessern zu können. Im Vordergrund steht hier der Erkenntnisgewinn über die Auswirkungen einzelner Prozessparameter und Fehlerquellen auf die Leistungsdaten der fertigen Zelle und der zu Grunde liegenden Zusammenhänge. Die Ergebnisse dieses Arbeitspakets liefern dem Kompetenzcluster „Intelligente Batteriezellproduktion“ wichtige Informationen über Toleranzgrenzen und für die eingesetzten Werkstoffe kritische Prozessbedingungen. Die Erkenntnisse über die Mechanismen der Fehlerfortpflanzung sind eine Grundvoraussetzung, um in Zukunft robustere Zellkonzepte zu entwickeln und eine virtuelle Zellproduktion zu simulieren.

Beiträge zu dieser Plattform setzen eine flexible und reproduzierbare Fertigung großformatiger Zellen in Industriequalität voraus. Eine statistische Qualitätskontrolle ist nicht Gegenstand dieser Plattform. Stattdessen soll die Auftrittswahrscheinlichkeit der wichtigsten kosten- und sicherheitsrelevanten Produktionsfehler, sowie deren Toleranzgrenzen geprüft und evaluiert werden. Zu den wirtschaftlich und sicherheitskritisch relevantesten Fertigungsqualitätsmerkmalen zählen:

- Pastenhomogenität bei der Elektrodenpräparation,
- Beschichtungshomogenität (Schichtdicke, Agglomerate) bei der Elektrodenpräparation,
- Restfeuchte in den Elektroden und anderen Zellkomponenten zu Beginn des Zellbaus,
- Qualität des Schneidprozesses beim Separator und Elektrodenschneiden,
- Stapelgenauigkeit bei der Einzelblattstapelung der Separator- und Elektrodenblätter bzw. Wickelgenauigkeit des Separators und der Elektroden,
- Qualität der Ableiterschweißung,
- Abstand des Zellstapels/der Ableiterföhnchen zur Siegelnaht,
- Dichtigkeit der Pouchverpackung und viele mehr.

#### AP 2: in-line Fertigungsqualitätskontrollen

Eine leistungsfähige in-line-Messtechnik ermöglicht eine verbesserte Prozesskontrolle und auf diese Weise eine Kostenreduzierung durch Prozessoptimierung und Ausschussminimierung. Voraussetzung hierfür ist auch eine Rückkoppelung der Analytik in die Prozesssteuerung, die zeit- und ortsnahe korrigierend eingreift. Die daraus resultierende Fähigkeit zur Definition von Prozesstoleranzen und zur Einrichtung von Quality Gates entlang der Prozesskette soll Freigabeprozesse etablieren, die hohe Qualitätsstandards in jedem Prozessschritt, insbesondere bei der Übergabe der Zwischenprodukte zur Zellfertigung sicherstellen. In-line Qualitätskontrollen werden in die Elektrodenfertigung sowohl durch integrierte in situ Kontrollverfahren als auch die Entnahme und ex situ Analyse von Stichproben adressiert. Ausdrücklich eingeschlossen sind Untersuchungen von Veränderungen bei Materialien und Zwischenprodukten während der Prozessierung, die Aufklärung der zu Grunde liegenden Mechanismen und eine möglichst quantitative Korrelation mit den resultierenden Leistungskenngrößen.

Im Vordergrund steht die Entwicklung und Implementierung von Charakterisierungsverfahren, die nicht auf Routinemethoden und den Einsatz kommerziell verfügbarer Analytik basieren, sondern eine erhebliche methodische Weiterentwicklung erfordern. Ein Ziel ist es, bereits erhältliche Messvorrichtungen an die

Prozesse bei der Elektrodenfertigung anzupassen, um z.B. Elektrodenprofil und Trocknungsverlauf mit ausreichender zeitlicher Auflösung innerhalb der Beschichtungsanlage bestimmen zu können. Für eine effiziente Nutzung zur Verbesserung der Produktqualität ist es zusätzlich zur Datenakquisition erforderlich, die Messdaten mit den zugrundeliegenden Prozessen in Verbindung zu bringen. Dies setzt ein fundiertes Prozessverständnis, insbesondere beim Beschichtungsvorgang und bei der Filmtrocknung voraus [P3-1 bis P3-8]. Eine wesentliche Komponente der Plattform besteht aber auch darin, gänzlich neuartige analytische Ansätze aufzugreifen, in den jeweiligen Prozessschritt zu integrieren und hinsichtlich ihres Potentials zu evaluieren. Beispiele sind die Anwendung von Niederfeld-NMR oder Wirbelstrom-Messungen zur Pasten- oder Elektrodenhomogenitätsbestimmung [P3-9, P3-10] oder die Integration von Methoden, die Aussagen zur Binderverteilung ermöglichen [P3-11, P3-12]. Wenn nur ein grundsätzlicher Nachweis erbracht wurde, besteht darüber hinaus die Möglichkeit, eine Methodenoptimierung mit Unterstützung von Mess- und Regelungstechniker durchzuführen.

Die Arbeiten in diesem AP können nicht eindeutig einem TRL-Level zugeordnet werden. Je nach Fragestellung und Projektansatz werden hier unterschiedliche TRL-Level adressiert. So liegen einerseits Fragestellungen und Lösungen zur in-line-Kontrolle häufig auf einem relativ hohen TRL-Level, während neue Analysemethoden für Stichprobenuntersuchungen eher einem niedrigerem TRL-Level zuzuordnen sind. Neben der Nutzung bereits bekannter Ansatzpunkte stellt die Neuentwicklung und Prozessintegration von neuartigen Ansätzen zur in-line-Erfassung von Produktionszuständen einen wesentlichen Beitrag des AP dar. Hierdurch sollen möglichst auch Prozessabschnitte für eine in-line-Messung erschlossen werden, die bisher nicht abgedeckt wurden, um ein möglichst engmaschiges Netz an Erfassungspunkten aufspannen zu können. Abschließend soll daher auch eine Bewertung aller eingebrachten Ideen ausgearbeitet werden, welches Potenzial und welche Relevanz sich hinsichtlich eines Transfers für die Forschungsfabrik Batterie ergeben können.

Für eine Beteiligung an den Arbeiten ist die Verfügbarkeit von leistungsfähigen und zuverlässig funktionierenden Anlagen, die für einen kontinuierlichen Betrieb ausgelegt sind, erforderlich. Betrachtet werden sowohl Kathode als auch Anode. Für die Untersuchungen sollen Standardmaterialien eingesetzt werden, die bereits bei der Herstellung von kommerziellen Elektroden etabliert sind. Für die Elektrodenfertigung werden die NMP-basierte und die wässrige Prozessroute berücksichtigt.

Entlang der Prozesskette bei der Elektrodenfertigung lassen sich verschiedene Arbeitsinhalte für die jeweiligen Zwischenprodukte adressieren. Die Relevanz und Umsetzbarkeit der Ansätze soll zunächst mit Hilfe von Experteninterviews festgelegt werden, so dass nur erfolgversprechende Arbeiten zur Umsetzung kommen.

- Trockene Pulvermischungen  
Eingangskontrolle für Rohstoffe, on/in-line Qualitätskontrolle des Partikelstrukturierungszustands und der Mischgüte
- Elektrodensuspension  
Überwachung von Pastenrheologie und –zusammensetzung durch elektrische und akustische Impedanzspektroskopie mit Wirbelstrom und Ultraschall; in-line-Messung der Pastenhomogenität durch NMR oder Zetapotential; Monitoring der Binderstruktur mittels Ramanspektroskopie; Erfassung von Suspensionseigenschaften an oder innerhalb der Schlitzdüse (Volumenstrom, Temperatur, Druckverlauf, Entmischungseffekte)
- Elektrode Nassfilm  
Profil- und Defektbestimmung an Nassfilmen mit hoher Geschwindigkeit; in-line-Bestimmung des Trocknungsstatus und Porenentleerung durch 4D-Methodik und Wirbelstrommessung
- Elektrode trocken, unverdichtet  
Überwachung der Elektrodenhomogenität durch Wirbelstromarraymessung; Bestimmung der Bahnzugshomogenität durch in-line-Dehnungsmessung; Erfassung von Binderanreicherungseffekten (IR/Raman)

- Elektrode trocken, verdichtet  
Überwachung der Elektrodenhomogenität durch Profil- und Glanzmessung; Bestimmung der Bahnzugshomogenität durch in-line-Dehnungsmessung
- Ausarbeitung eines Quality Gate-Konzepts an der Schnittstelle zur Zellfertigung  
Definition eines Eigenschaftsvektors zur hinreichenden Beschreibung des Übergabeprodukts

In Abb. 7 sind weitere Beispiele für die Integration von in-line-Kontrollen bei der Elektrodenpräparation gezeigt, sowie mögliche Rückkopplungsmechanismen durch die Integration von aktorischen Elementen, die eine ort- und zeitnahe Beseitigung der Fehler ermöglichen. Für die produktionstechnische Umsetzung dieser Ansätze ist eine Kooperation mit der Prozessentwicklung, z.B. im Kompetenzcluster „ProZell“ geplant. Für diesen Kompetenzcluster stellen die Ergebnisse des AP eine wertvolle Ergänzung dar, die zu einem verbesserten Prozessverständnis führt und die Prozessentwicklung unterstützt. Die Ergebnisse von in-line-Messungen können generell einen wertvollen Input für eine externe Prozessmodellierung darstellen. Eine Echtzeitauswertung kann insbesondere aber auch in eine intelligente Prozesssteuerung im Rahmen einer KI-gestützten Produktion im Kompetenzcluster „InZePro“ einfließen. Die enge Kooperation mit den genannten Kompetenzclustern wird dadurch sichergestellt, dass die Mehrzahl der beteiligten Einrichtungen von „AQua“ auch an „ProZell“ und „InZePro“ beteiligt sind und dort an vergleichbaren Prozessabschnitten arbeiten.

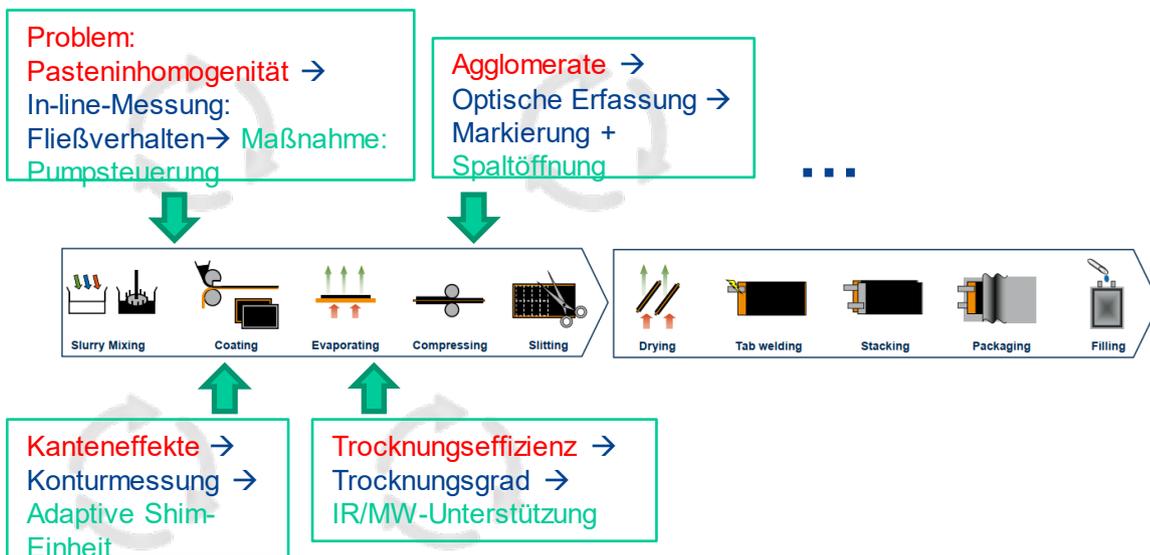


Abbildung 7: Schematische Darstellung von Fehlern bei der Elektrodenproduktion und möglichen Maßnahmen zur In-linekontrolle.

## 2. BMBF-Dachkonzept Forschungsfabrik Batterie

Im Dachkonzept „Forschungsfabrik Batterie“ sollen relevante Fragestellungen aus der Grundlagenforschung in die industrielle Anwendung überführt werden. Dies geschieht im Kompetenzcluster „AQua“ durch die Weiterentwicklung von Analysemethoden, die heute noch nicht routinemäßig zur Charakterisierung von Batteriezellen oder Zellkomponenten eingesetzt werden. Dies können spezielle operando Verfahren sein, die während des Herstellungsprozesses oder dem Betrieb der Batteriezellen relevante Informationen über Material- oder Bauteilveränderungen liefern und so erlauben, robustere Zellkonzepte und beherrschte Herstellungsprozesse zu entwickeln.

Der Cluster „AQua“ bearbeitet dabei Themen mit starker Grundlagenfokussierung bei der Methodenentwicklung, um Messgrößen mit anwendungsrelevanten Kenndaten kausal zu verknüpfen, bis hin zur Integration von Charakterisierungsverfahren zur Rückkopplung in den Fertigungsprozess, um in Echtzeit Zwischenprodukte zu bewerten und Prozessparameter nachjustieren zu können. Dabei wird auf die Material- und Prozessexpertise aus anderen Kompetenzclustern (wie „ExcellBattMat“ und „ProZell“) zurückgegriffen. „AQua“ selbst konzentriert sich auf die Weiterentwicklung von analytischen Methoden, die für die Zellproduktion relevant sind.

In einem engen Austausch mit den anderen Forschungsclustern im Dachkonzept Forschungsfabrik werden in der Begleitmaßnahme des Clusters auch während der Laufzeit analytische Problemstellungen z.B. aus der Materialentwicklung („ExcellBattMat“), der Prozessentwicklung („ProZell“) oder den Nutzungskonzepten identifiziert und falls möglich in die Bearbeitung aufgenommen und Maßnahmenempfehlungen zur weiteren Optimierung an diese Cluster übergeben.

Die Übernahme erprobter Charakterisierungsmethoden mit Auswerteroutinen durch die anderen Cluster wird darüber hinaus zu einer deutlich besseren Vergleichbarkeit von Messergebnissen und damit zu einer besseren Einschätzung der erzielten Fortschritte zwischen den Clustern sorgen.

Ein umfassenderes Verständnis der ablaufenden Prozesse und Qualitätskriterien von der Eingangskarakterisierung der Materialien bis hin zur fertigen Zelle kann Innovationszyklen in der FFB beschleunigen.

### 3. Cluster- & Governanacestruktur

#### 3.1. Clusterstruktur

Der Cluster ist in drei Plattformen unterteilt, in denen Projekte zu verschiedenen Arbeitsschwerpunkten bearbeitet werden. Eine Begleitmaßnahme, die organisatorische Belange des Clusters bearbeitet, eine Technologiestudie zu analytischen Methoden erarbeitet und Standards für Proben, Methoden, Datensicherung und –analyse definiert und zur Verfügung stellt, verbindet die Plattformen miteinander.

Querverbindungen zwischen den Plattformen werden darüber hinaus durch thematische Workflows zu ausgewählten Fragestellungen, die sich über alle Plattformen erstrecken, hergestellt.

Plattform 1: Materialcharakterisierung - und analytik	Plattform 2: Zellanalytik	Plattform 3: FMEA und in-line Fertigungskontrollen
<b>Leitung: Hubert Gasteiger</b> <u>AP 1.1:</u> AM Grenzflächenanalyse via TEM, XPS, TOF-SIMS & FIB-SEM <u>AP 1.2:</u> AM Alterung via <i>operando</i> XAS/XES <u>AP 1.3:</u> OCV-Hysterese & Alterung via Dilatometrie und Kalorimetrie <u>AP 1.4:</u> Analytische Methoden zur Bestimmung der Elektrolytzersetzung	<b>Leitung: Margret Wohlfahrt-Mehrens</b> <u>AP 2.1:</u> post-mortem Analysen, Alterung Elektrodenesign <u>AP 2.2:</u> Analyse Lithiumplating <u>AP 2.3:</u> Zellsensorik <u>AP 2.4:</u> Analytische Methoden zur Abschätzung der Sicherheit	<b>Leitung: Helmut Ehrenberg</b> <u>AP 3.1:</u> FMEA Prozesse <u>AP 3.2:</u> Inline Qualitätskontrolle
<b>Begleitmaßnahme:</b> Technologiestudie Benchmarkanalyse, Qualitätssicherungsmethoden, Standardisierung, Datenerfassung –und Auswertung		

### 3.2. Governance-Struktur

- Der Managementkreis aus Vertretern der Industrie, Vertretern des BMBF und des PTJ trifft sich mindestens 2 x jährlich. Der Managementkreis berät den Kompetenzcluster aus Industriesicht. Er evaluiert die eingegangenen Projektskizzen und führt ein Ranking der Skizzen durch.
- KPIs und Meilensteine der Plattformen und Projekte werden mit dem Managementkreis definiert und der Managementkreis validiert die Projektfortschritte halbjährlich bei den Statusmeetings.
- Der Managementkreis kann auf Basis dieser Evaluierungen Empfehlungen für die weitere Fortführung der Projekte aber auch zur weiteren generellen Ausrichtung des Clusters geben.
- Die drei Koordinatoren koordinieren gemeinsam den Gesamtcluster.
- Für jede der drei Plattformen ist jeweils ein Koordinator zuständig. Für die Unterprojekte wird jeweils ein Arbeitspaketkoordinator bestimmt, der die Arbeiten aus den Teilprojekten innerhalb des Arbeitspakets koordiniert.
- Es wird ein Steeringkomitee aus den drei Koordinatoren und den Projektkoordinatoren gebildet, welches Querschnittsprojekte zwischen den Plattformen identifiziert.

### 3.3. Kooperation mit weiteren Clustern

Der Kompetenzcluster Analytik/Qualitätssicherung ist mit allen weiteren Kompetenzclustern im Dachkonzept eng verknüpft.

Zum Modul *Material* gehören dabei das „ExcellBattMat“-Kompetenzcluster sowie das BMBF-Kompetenzcluster für Festkörperbatterien („FestBatt“). Hier gibt es natürliche Verknüpfungen von „AQua“ zu den an der Materialentwicklung beteiligten „Excellent Battery“-Zentren und den Helmholtz-Instituten in Ulm und Münster dadurch, dass teilweise dieselben Institutionen und Koordinatoren in Personalunion involviert sind.

So sind zwei der „AQua“ Koordinatoren (HG, MWM) voll in die „ExcellBattMat“-Aktivitäten involviert, so dass ein enger Informationsaustausch gewährleistet ist, Dopplungen ausgeschlossen und Synergien optimal genutzt werden können. Einer der „AQua“ Koordinatoren (HE) ist Sprecher des Topics „Electrochemical Energy Storage“ in den Helmholtz Programmen „Storage and Cross-linked Infrastructures“ (POF III) bzw. „Materials and Technologies for the Energy Transition“ (POF IV). Auch ist die Koordinatorin und Sprecherin von „AQua“ (MWM) im Direktorium des Helmholtz-Instituts Ulm und damit auch im gemeinsamen Steering Committee der beiden Helmholtz-Institute Ulm und Münster, die sich mit der Materialentwicklung für elektrochemische Energiespeicher befassen. Damit ist auch sowohl über die personellen als auch die institutionellen Verbindungen von „AQua“ mit den „Excellent Battery“-Zentren Münster/Jülich/Aachen und Ulm/Stuttgart sowie der Helmholtz-Gemeinschaft sichergestellt, dass Synergien optimal genutzt, Informationen zeitnah und zielgerichtet ausgetauscht und ineffiziente Überschneidungen vermieden werden.

In „FestBatt“ wird die Methodenplattform „Charakterisierung“ von einem der „AQua“ Koordinatoren (HE) geleitet. Hierdurch ist ein direkter Austausch gewährleistet und sichergestellt, dass es nicht zu einer Doppelung der Arbeiten kommt. „FestBatt“ grenzt sich durch den Fokus auf reine Feststoffbatterien deutlich von „AQua“ und dem FFB Konzept ab, das Systeme mit konventionellen flüssigen Elektrolyten untersucht und entwickelt. Gerade für die Analysemethoden ergeben sich hieraus klare Abgrenzungen. Mögliche Synergien, z.B. bei der Untersuchung von Grenzflächenstabilitäten, der Lithiumdendritenbildung oder ionischen Leitfähigkeiten werden effektiv genutzt.

Zum Modul *Zelle und Prozesse* gehört das Forschungscluster „ProZell“, das auf die Analyse von Produktionsprozessen und den Aufbau eines vertieften Verständnisses der Prozess-Produkt-Eigenschafts-Beziehungen zur Fertigung von Batteriezellen abzielt. Das von Prof. Kwade (TU Braunschweig) koordinierte „ProZell“-Cluster beinhaltet insgesamt 13 Projekte zu verschiedenen Prozessschritten der Batteriezellproduktion und bietet eine Reihe von Anknüpfungsmöglichkeiten für Projekte der Plattform 3 des Kompetenzclusters „AQua“. Es ist ein enger Austausch zwischen den Aktivitäten des „ProZell“-Clusters

in Bezug auf Qualitätssicherungsmaßnahmen, insbesondere mit dem Projekt „E-Qual“ geplant. Der Schwerpunkt im „ProZell“-Cluster liegt auf der Prozessentwicklung; neue Analysemethoden werden im „ProZell“-Cluster nicht entwickelt. Hier setzen die Projekte des Clusters „AQua“ an, die sich schwerpunktmäßig mit der Prozessparametererfassung und -kontrolle beschäftigen und die Projekte im „ProZell“-Cluster ideal ergänzen. Die Sprecherin des Analytikclusters gehört auch dem Managementkreis von „ProZell“ an, so dass ein direkter Informationsaustausch gewährleistet werden kann.

Neben dem Austausch der in beiden Clustern entwickelten Methoden und Modelle sollen Möglichkeiten des Austauschs von Materialproben (Elektroden, Zwischenerzeugnisse, Zellen) und Daten geprüft werden, um direkte Kooperationen zu ermöglichen.

Das Forschungscluster „GreenBattery“ strebt die Schaffung von Voraussetzungen für eine nachhaltige Batterie durch einen energie- und materialeffizienten Batterielebenszyklus mit Fokus auf die Schließung von Stoff- und Materialkreisläufen an. Hier ergeben sich eine Vielzahl von Anknüpfungspunkten zur Qualitätssicherung und Analytik von recycelten Materialien oder neuen in diesem Cluster entwickelten Prozessen. In gemeinsamen Workshops sollen konkrete Anknüpfungspunkte und Kooperationen zwischen den Projekten erarbeitet werden.

Im BMBF-Kompetenzcluster „Batterienutzungskonzepte“ soll Know-how zur Modul- bzw. Zell-Diagnose inklusive einer End-of-Life-Schnellcharakterisierung bzw. Zustandsbestimmung erarbeitet werden. Zusätzlich werden beschleunigte Alterungsverfahren, Lebensdaueruntersuchungen, Performanceanalyse und Sicherheitskonzepte adressiert. Die gesammelten Daten sollen zurück in die Zellentwicklung und die Fertigungsprozesse fließen und es soll ein Basiskonzepte zur Diagnostik entwickelt werden. Zur erfolgreichen Implementierung des Moduls wird eine ergänzende System- und Anwendungsanalyse vorgeschlagen. Der Fokus liegt hier auf diagnostischen, elektrisch-basierten Verfahren von Zellen und Modulen, die im Analytikcluster explizit nicht im Vordergrund stehen. Daher sind die beiden Cluster von den Themenstellungen und den verwendeten Methoden komplementär zueinander.

Für die Intelligente Batteriezellproduktion „InZePro“ werden die Auswirkungen möglicher Fehlerquellen untersucht, um die Fehlerfortpflanzung im Herstellungsprozess und im Hinblick auf die relevanten Leistungskenndaten der Batteriezellen mechanistisch zu verstehen. Für die innovative Anlagentechnik können so Toleranzgrenzen abgeleitet werden, die nicht auf statistische Analysen für singuläre Prozessparameter begrenzt sind, sondern allgemeine Wirkungszusammenhänge beleuchten. Dies ermöglicht kostengünstigere Herstellungsverfahren durch eine bedarfsgerechte Optimierung aller Prozessschritte, da Toleranzgrenzen so voll ausgenutzt werden können. Nur durch ein Verständnis der Auswirkungen individueller Einflussgrößen auf den gesamten Herstellungsprozess und die resultierenden Leistungskenndaten kann eine virtuelle Beschreibung der gesamten Produktionskette aussichtsreich angegangen werden. Dazu müssen in jedem Prozessschritt die relevanten Daten identifiziert, erfasst, kompaktiert und entlang der Fertigungskette weitervererbt werden.

Da in dem KIT Battery Technology Center (BaTeC) jeweils zwei Clusterkoordinatoren (Jürgen Fleischer von „InZePro“ und HE von „AQua“) im Leitungsgremium sind, ergibt sich hieraus eine ideale Schnittstelle zwischen „AQua“ und „InZePro“. Die Forschungsvorhaben werden an den gemeinsam betriebenen Anlagen durchgeführt – das technische Personal arbeitet eng zusammen. Somit können Herausforderungen aus dem „InZePro“-Cluster direkt in „AQua“ aufgegriffen und Ergebnisse ausgetauscht werden. Die Brückenprojekte zwischen „InZePro“ und „AQua“ sind daher von besonderer Bedeutung. Beispielhaft sei hier das für die innovative Anlagentechnik notwendige Ableiten von Quality Gates mittels Methoden der Qualitätssicherung erwähnt. Die Arbeiten in dem Projekt „AgiloBat“ enthalten ein Arbeitspaket AP4 „Qualitätssicherung und In-Line Messtechnik“, das von Jens Tübke (Fraunhofer ICT) koordiniert wird. Auch zwischen Projektbeteiligten bei „AgiloBat“ und Koordination von „AQua“ gibt es einen direkten personellen Überlapp (MWM, HE). In Vorabgesprächen wurden bereits die Abgrenzungen der Aktivitäten besprochen und eine Zusammenarbeit zum gegenseitigen Nutzen vereinbart: Während es bei „AgiloBat“ konkret um die Realisierung einer auf

Flexibilität optimierten Produktionslinie mit einem Fokus auf schnellen Anlaufphasen beim Kombinieren von Modulen geht, steht bei „AQua“ die Weiterentwicklung von Analysemethoden im Vordergrund. Dabei sollen allgemeine Zusammenhänge zwischen Fehlermöglichkeiten und den Auswirkungen auf die weiteren Produktionsschritte und die resultierenden Leistungskenndaten untersucht werden, für die neue Analysemethoden erforderlich sind. Bei der Fehlermöglichkeits- und –einflussanalyse (FMEA) steht bei „AQua“ die Verarbeitung einzelner Komponenten durch Assemblierung im Vordergrund, bei der in-line Messtechnik konzentrieren sich die Arbeiten auf die Elektroden.

Da sich die Werkstoffe nicht nur während des Herstellungsprozesses, sondern auch durch Alterung und Ermüdung verändern, sind alle Erkenntnisse über die Materialwechselwirkungen auch für die Optimierung der Nutzungskonzepte relevant. Die Erfassung von Degradationsphänomenen sollte direkt an die Zellfertigung anschließen und die aus der Produktion übergebenen Metadaten übernehmen und erweitern.

Auch in diesem Bereich soll die enge Zusammenarbeit der Lehrstühle und Institute der TU München der Initiative TUM.Battery, die die Aktivitäten und Kompetenzen der Batterieforschung bündelt, genutzt werden, um Mehrwert durch den engen Informationsaustausch zwischen dem Cluster „AQua“ und dem Cluster „InZePro“ zu schaffen. Insbesondere die etablierte Zusammenarbeit zwischen dem *iwb* (Prof. Reinhart), dem Lehrstuhl für Elektrische Energiespeichertechnik (Prof. Jossen) und dem Lehrstuhl für Technische Elektrochemie (HG) aus den „ExZellTUM“-Projekten wird diesen Austausch unterstützen.

Langfristig sollen so nicht nur auf Material- und Prozessdaten basierende Simulationen des Batterieverhaltens über die gesamte Lebensdauer ermöglicht werden, sondern auch die Komponenten am Lebensende so beschrieben werden, dass diese eine belastbare Grundlage für Re-Synthesen liefern.

Ergebnisse aus diesem Cluster zur Qualitätskontrolle von Materialien und Prozessen, zur Auslegung von Elektroden- und Zelldesign und zur Modifizierung von Anlagen durch Einbringung geeigneter in-line-Kontrollen können gegebenenfalls auch in die Innovationsmodule der FFB einfließen. Die konkrete Ausgestaltung des Informationsaustauschs zwischen den Clustern und zukünftiger Kooperationen innerhalb des Dachkonzepts ist Teil des Begleitprojekts und findet u.a. in den Experteninterviews große Beachtung, bei denen der Status an existierenden Analyse- und Qualitätssicherungsmethoden mit dem Bedarf der Forschungscluster, der FFB und der Industrie erfasst und Konzepte zum Schließen möglicher Lücken entwickelt werden. Das übergeordnete Ziel von „AQua“ ist die Integration und Implementierung der Erkenntnisse in einen umfassenden produktionstechnischen Kontext des Dachkonzepts Forschungsfabrik Batterie. Dies geschieht im engen Austausch mit den Fabrikmodulen „Material“ sowie „Zelle und Prozesse“, gemeinsam mit der Entwicklung innovativer Anlagentechnik aus dem Kompetenzcluster „InZePro“ und der weiteren Querschnittsinitiative „Batterielebenszyklus“. Umgekehrt werden auftretende Fragestellungen aus den Clustern im Dachkonzept Forschungsfabrik Batterie in „AQua“ aufgegriffen und in laufenden oder neuen Projekten bearbeitet. Dabei werden Fragestellungen sowohl der nächsten als auch der übernächsten Zellgeneration adressiert und in Abstimmung zwischen den Koordinatorenteams ständig synchronisiert.

### 3.4. Ideen-, IP- & Technologietransfer – Verwertungsplan

Mit dem Einsatz und der Weiterentwicklung der hier genannten diagnostischen und analytischen Methoden soll das grundlegende Verständnis sowohl neuer Materialien als auch des Elektroden- und Zelldesigns sowie der Qualitätskontrolle entlang der gesamten Prozessfertigungskette erarbeitet werden, was die Implementierung in die serientaugliche Produktion großformatiger Zellen vereinfacht und beschleunigt. Es besteht eine enge Anbindung an die Cluster „ExcellBattMat“ und „ProZell“ aber auch an die neuen Cluster zur „Intelligenten Batterieproduktion“ und zu „Batterienutzungskonzepten“. Die Ergebnisse aus dem Cluster können zudem einen signifikanten Beitrag zur erfolgreichen Implementierung der "Forschungsfertigung Batteriezelle" leisten.

Weiterhin können die entwickelten Methoden in Plattform 1 für die Analyse von Materialien aus anderen Clustern (z.B. „ExcellBattMat“, „FestBatt“, „GreenBattery“), der FFB und aus der Industrie genutzt werden. Die Ergebnisse liefern eine wesentliche Basis für weitere maßgeschneiderte Materialoptimierungen sowohl bei Forschungs- aus auch bei industriellen Partnern. Die Weiterentwicklung von Analysemethoden und Erkenntnissen zur Performance-, Lebensdauer- und Sicherheitsabschätzung in Abhängigkeit vom Elektroden- und Zelldesign und für die nächste Generation Lithium-Ionenbatterien adressiert die Herausforderungen der Zellhersteller (wie z.B. Verkürzung der Entwicklungszeiten vom Labormuster bis zur Marktreife, zielgerichtete Optimierungen neuer Materialkombinationen, Fertigungsprozesse und Zelldesigns) und der Anlagenbauer (Prozessoptimierung in Hinblick auf Qualität und Kostenreduktion). Signifikante analytische Fragestellungen sollen innerhalb der Laufzeit durch intensiven Dialog mit dem Industriebeirat und den Austausch mit den anderen Forschungsclustern auch nach Projektbeginn kontinuierlich aufgenommen werden und Methoden in Hinblick auf ihre Reproduzierbarkeit und Aussagefähigkeit ständig weiter verbessert werden.

Um den Wissenstransfer bezüglich der Anwendbarkeit und der bestimmaren Materialeigenschaften mit den hier eingesetzten und weiterentwickelten Methoden zu fördern, sollen weiterhin jährliche Workshops veranstaltet werden, zu denen Wissenschaftler aus anderen Clustern, der FFB und der Industrie zur Teilnahme eingeladen werden. Letztlich können die in Plattform 1 etablierten Methoden auch für die Charakterisierung von (Elektro)Katalysatoren für Power to X Konzepte (Elektrolyse, synthetische Treibstoffe, Brennstoffzellen) genutzt werden.

- [P1-1] J. Illig, M. Ender, T. Chrobak, J. P. Schmidt, D. Klotz, E. Ivers-Tiffée, *J. Electrochem. Soc.* 159 (2012) A952.
- [P1-2] C. H. Chen, J. Liu, K. Amine, *J. Power Sources* 96 (2001) 321.
- [P1-3] R. Petibon, C. P. Aiken, N. N. Sinha, J. C. Burns, H. Ye, C. M. VanElzen, G. Jain, S. Trussler, J. R. Dahn, *J. Electrochem. Soc.* 160 (2012) A117.
- [P1-4] T. R. Jow, M. B. Marx, J. L. Allen, *J. Electrochem. Soc.* 159 (2012) A604.
- [P1-5] S. Solchenbach, D. Pritzl, E. J. Y. Kong, J. Landesfeind, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 163 (2016) A2265.
- [P1-6] M. Ender, J. Illig, E. Ivers-Tiffée, *J. Electrochem. Soc.* 164 (2017) A71.
- [P1-7] C. P. Aiken, J. Xia, D. Y. H. Wang, D. A. Stevens, S. Trussler, J. R. Dahn, *J. Electrochem. Soc.* 161 (2014) A1554.
- [P1-8] R. Robert, C. Bünzli, E. J. Berg, P. Novák, *Chem. Mater.* 27 (2015) 526.
- [P1-9] B. Michalak, B. B. Berkes, H. Sommer, T. Bergfeldt, T. Brezesinski, J. Janek, *Anal. Chem.* 88 (2016) 2877.
- [P1-10] M. Metzger, B. Strehle, S. Solchenbach, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 163 (2016) A798.
- [P1-11] T. Waldmann, M. Wilka, M. Kasper, M. Fleischhammer, M. Wohlfahrt-Mehrens, *J. Power Sources* 262 (2014) 129.
- [P1-12] N. N. Bramnik, K. G. Bramnik, C. Baetz, H. Ehrenberg, *J. Power Sources* 145 (2005) 75.
- [P1-13] A. O. Kondrakov, A. Schmidt, J. Xu, G. Geßwein, R. Mönig, P. Hartmann, H. Sommer, T. Brezesinski, J. Janek, *J. Phys. Chem. C* 121 (2017) 3286.
- [P1-14] F. Friedrich, B. Strehle, A. T. S. Freiberg, K. Kleiner, S. J. Day, C. Erk, M. Piana, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 166 (2019) A3760.
- [P1-15] O. Dolotko, A. Senyshyn, M. J. Mühlbauer, K. Nikolowski, H. Ehrenberg, *J. Power Sources* 255 (2014) 197.
- [P1-16] V. Zinth, C. von Lüders, M. Hofmann, J. Hattendorff, I. Buchberger, S. Erhard, J. Rebelo-Kornmeier, A. Jossen, R. Gilles, *J. Power Sources* 271 (2014) 152.
- [P1-17] C. L. Champion, W. T. Li, B. L. Lucht, *J. Electrochem. Soc.* 152 (2005) A2327.
- [P1-18] D. R. Gallus, R. Schmitz, R. Wagner, B. Hoffmann, S. Nowak, I. Cekic-Laskovic, R. W. Schmitz, M. Winter, *Electrochim. Acta* 134 (2014) 393.
- [P1-19] J. Henschel, C. Peschel, F. Günter, G. Reinhart, M. Winter, S. Nowak, *Chem. Mater.* 31 (2019) 9977.
- [P1-20] R. Jung, M. Metzger, F. Maglia, C. Stinner, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 164 (2017) A1361.
- [P1-21] D. Streich, C. Erk, A. Guéguen, P. Müller, F.-F. Chesneau, E. J. Berg, *J. Phys. Chem. C* 121 (2017) 13481.
- [P1-22] R. Jung, M. Metzger, F. Maglia, C. Stinner, H. A. Gasteiger, *J. Phys. Chem. Lett.* 8 (2017) 4820.
- [P1-23] L. Giordano, P. Karayaylali, Y. Yu, Y. Katayama, F. Maglia, S. Lux, Y. Shao-Horn, *J. Phys. Chem. Lett.* 8 (2017) 3881.
- [P1-24] S. Jeong, J. Kim, J. Mun, *J. Electrochem. Soc.* 166 (2019) A5038.
- [P1-25] D. Pritzl, T. Teufl, A. T. S. Freiberg, B. Strehle, J. Sicklinger, H. Sommer, P. Hartmann, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 166 (2019) A4056.
- [P1-26] M. Wetjen, S. Solchenbach, D. Pritzl, J. Hou, V. Tileli, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 165 (2018) A1503.
- [P1-27] D. Jantke, R. Bernhard, E. Hanelt, T. Buhrmester, J. Pfeiffer, S. Haufe, *J. Electrochem. Soc.* 166 (2019) A3881.
- [P1-28] S. Solchenbach, G. Hong, A. T. S. Freiberg, R. Jung, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 165 (2018) A3304.
- [P1-29] J. A. Gilbert, I. A. Shkrob, D. P. Abraham, *J. Electrochem. Soc.* 164 (2017) A389.

- [P1-30] L. M. Thompson, W. Stone, A. Eldesoky, N. K. Smith, C. R. M. McFarlane, J. S. Kom, M. B. Johnson, R. Petibon, J. R. Dahn, *J. Electrochem. Soc.* 165 (2018) A2732.
- [P1-31] R. Jung, F. Linsenmann, R. Thomas, J. Wandt, S. Solchenbach, F. Maglia, C. Stinner, M. Tromp, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 166 (2019) A378.
- [P1-32] W.-C. Chen, Y.-F. Song, C.-C. Wang, Y. Liu, D. T. Morris, P. A. Pianetta, J. C. Andrews, H.-C. Wu, N.-L. Wu, *J. Mater. Chem. A* 1 (2013) A10847.
- [P1-33] H. Koga, L. Croguennec, M. Ménétrier, P. Mannesiez, F. Weill, C. Demas, *J. Power Sources* 236 (2013) 250.
- [P1-34] K. G. Gallagher, J. R. Croy, M. Balasubramanian, M. Bettge, D. P. Abraham, A. K. Burrell, M. M. Thackeray, *Electrochem. Commun.* 33 (2013) 96.
- [P1-35] W. E. Gent, K. Lim, Y. Liang, Q. Li, T. Barnes, S.-J. Ahn, K. H. Stone, M. McIntire, J. Hong, J. H. Song, Y. Li, A. Mehta, S. Ermon, T. Tyliczyak, D. Kilcoyne, D. Vine, J.-H. Park, S.-K. Doo, M. F. Toney, W. Yang, D. Prendergast, W. C. Chueh, *Nature Commun.* 8 (2017) article 2091.
- [P1-36] N. M. Obrovac, V. L. Chevrier, *Chem. Rev.* 114 (2014) 11444.
- [P1-37] F. Dogan, B. R. Long, J. R. Croy, K. G. Gallagher, H. Iddir, J. T. Russell, M. Balasubramanian, B. Key, *J. Am. Chem. Soc.* 137 (2015) 2328.
- [P1-38] S. L. Glazier, S. A. Odom, A. P. Kaur, J. R. Dahn, *J. Electrochem. Soc.* 165 (2018) A3449.
- [P1-39] M. Wetjen, M. Trunk, L. Werner, R. Gernhäuser, B. Märkisch, Z. Révay, R. Gilles, H. A. Gasteiger, *J. Electrochem. Soc.* 165 (2018) A2340.
- [P1-40] G. Jeong, S. M. Lee, N. S. Choi, Y.-U. Kim, C. K. Lee, *Electrochim. Acta* 56 (2011) 5095.
- [P1-41] B. Rieger, S. Schlueter, S. V. Erhard, J. Schmalz, G. Reinhart, A. Jossen, *J. Energy Storage* 6 (2016) 213.
- [P1-42] A. R. Jimenez, R. Nolle, R. Wagner, J. Husker, M. Kolek, R. Schmuck, M. Winter, T. Placke, *Nanoscale* 10 (2018) 2128.
- [P2-1] T. Waldmann, A. Iturrondobeitia, M. Kasper, N. Ghanbari, F. Aguesse, E. Bekaert, L. Daniel Sylvie Genies, I. J. Gordon, M. W. Loeble, E. De Vito, M. Wohlfahrt-Mehrens, *J. Electrochem. Soc.* 163 (2016) A2149.
- [P2-2] A. M. Tripathi, W.-N. Su, B. J. Hwang, *Chem. Soc. Rev.* 47 (2018) 736.
- [P2-3] G. Kilibarda, S. Schlabach, V. Winkler, M. Bruns, T. Hanemann, D. V. Szabo, *J. Power Sources* 263 (2014) 145.
- [P2-4] M. Dubarry, V. Svoboda, R. Hwu, B. Y. Liaw, *Electrochem. Solid-State Lett.* 9 (2006) A454.
- [P2-5] S. Brown, N. Mellgren, M. Vynnycky, G. Lindbergh, *J. Electrochem. Soc.* 155 (2008) A320.
- [P2-6] N. Mellgren, S. Brown, M. Vynnycky, G. Lindbergh, *J. Electrochem. Soc.* 155 (2008) A304
- [P2-7] C. J. Mikolajczak, T. Hayes, M. V. Megerle, M. Wu, in: *IEEE International Conference on Portable Information Devices* (2007) p. 203.
- [P2-8] J. Swart, D. Slee, in: *IEEE International Symposium on Product Compliance Engineering* (2008) p. 40.
- [P2-9] T. C. Bach, S. F. Schuster, E. Fleder, J. Müller, M. J. Brand, H. Lormann, A. Jossen, G. SEXTL, *J. Energy Storage* 5 (2016) 212.
- [P2-10] O. Dolotko, A. Senyshyn, M. J. Mühlbauer, K. Nikolowski, F. Scheiba, H. Ehrenbeg, *J. Electrochem. Soc.* 159 (2012) A2082.
- [P2-11] A. Senyshyn, M. J. Mühlbauer, K. Nikolowski, T. Pirling, H. Ehrenberg, *J. Power Sources* 203 (2012) 126.
- [P2-12] A. Senyshyn, M. J. Mühlbauer, O. Dolotko, M. Hofmann, T. Pirling, H. Ehrenberg, *J. Power Sources* 245 (2014) 678.
- [P2-13] T. Waldmann, B. I. Hogg, M. Wohlfahrt-Mehrens, *J. Power Sources* 384 (2018) 107.
- [P3-1] M. Schmitt, M. Baunach, L. Wengeler, K. Peters, P. Junges, P. Scharfer, W. Schabel, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 68(2013) 32
- [P3-2] M. Schmitt, P. Scharfer, W. Schabel, *Journal of Coatings Technology Research* 11 (2014) 57

- [P3-3] R. Diehm, H. Weinmann, J. Kumberg, M. Schmitt, J. Fleischer, P. Scharfer, W. Schabel, Energy Technology 1900137 (2019) 1
- [P3-4] R. Diehm, J. Kumberg, C. Dörrer, M. Müller, W. Bauer, P. Scharfer, W. Schabel, (2020) 201901251
- [P3-5] S. Jaiser, M. Müller, M. Baunach, W. Bauer, P. Scharfer, W. Schabel, Journal of Power Sources 318 (2016) 210
- [P3-6] S. Jaiser, J. Kumberg, J. Klaver, J. Urai, W. Schabel, J. Schmatz, P. Scharfer, Journal of Power Sources 345 (2017) 97
- [P3-7] S. Jaiser, L. Funk, M. Baunach, P. Scharfer, W. Schabel, Journal of colloid and interface science 494 (2017) 22
- [P3-8] B.G. Westphal, A. Kwade, Journal of Energy Storage 18 (2018) 509
- [P3-9] MA Vargas, M. Cudaj, K. Hailu, K. Sachsenheimer, G. Guthausen, Macromolecules. 43 (2010) 5561
- [P3-10] R. Balbierer, R. Gordon, S. Schuhmann, N. Willenbacher, H. Nirschl, G. Guthausen, Journal of Materials Science 54 (2019) 5682
- [P3-11] M. Müller, L. Pfaffmann, S. Jaiser, M. Baunach, V. Trouillet, F. Scheiba, P. Scharfer, W. Schabel, W. Bauer, Journal of Power Sources 340 (2017) 1
- [P3-12] L. Pfaffmann, S. Jaiser, M. Muller, P. Scharfer, W. Schabel, W. Bauer, F. Scheiba, H. Ehrenberg, Journal of Power Sources 363 (2017) 460

Tabellarische Übersicht der in der 2. Sitzung des Managementkreises zur Förderung empfohlenen Projekte

AP	Akronym	Name der Skizze	Projektpartner
1.1	AQua-Pop	Oberflächen- und Grenzflächenanalytik von Aktivmaterialien mittels hochaufgelöster Analytischer Verfahren (von Post mortem- zu in situ- und <b>Operando</b> -Methoden)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Justus-Liebig-Universität - Physikalisch Chemisches Institut &amp; Zentrum für Materialforschung</li> <li>- Technische Universität München - Lehrstuhl für Technische Elektrochemie</li> <li>- RWTH Aachen - Gemeinschaftslabor für Elektronenmikroskopie (GFE) und Ernst Ruska-Centrum für Mikroskopie und Spektroskopie mit Elektronen (ER-C 2)</li> </ul>
1.2	operaXX	Aufklärung der Alterungsmechanismen neuartiger Kathodenaktivmaterialien via <b>operando XAS/XES</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH (HZB) - Dept. Interface Design</li> <li>- Technische Universität München (TUM) - Lehrstuhl für Technische Elektrochemie</li> <li>- Carl von Ossietzky Universität Oldenburg (UOL) Institut für Physik</li> </ul>
1.3	HysKaDi	Analyse der <b>Hysterese</b> und Alterung von Aktivmaterial via <b>Kalorimetrie</b> und <b>Dilatometrie</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Universität Bayreuth - Lehrstuhl Elektrische Energiesysteme (UBT-EES)</li> <li>- Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung - Akkumulatoren Materialforschung (ZSW-ECM)</li> <li>- Technische Universität München - Lehrstuhl für Technische Elektrochemie (TUM-TEC)</li> <li>- Technische Universität München - Lehrstuhl für Elektrische Energiespeichertechnik (TUM-EES)</li> </ul>
1.4	E-FloA	<b>Elektrolyt-Floating-Analyse</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Rheinisch Westfälische Technische Hochschule Aachen - Lehr- und Forschungsgebiet für Alterungsprozesse und Lebensdauerprognose von Batterien</li> <li>- Rheinisch Westfälische Technische Hochschule Aachen - Lehrstuhl für elektrochemische Energiewandlung und Speichersystemtechnik</li> <li>- Westfälische Wilhelms Universität Münster (WWU) MEET - Münster Electrochemical Energy Technology</li> <li>- Forschungszentrum Jülich - Helmholtz-Institut Münster: Ionics in Energy Storage (IEK-12)</li> </ul>
2.1	MiCha	<b>Mikrostruktur</b> charakterisierung von Elektroden und Wirkzusammenhänge mit Elektroden-performance und -alterung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Hochschule Aalen (HSAA) - Institut für Materialforschung (IMFAA)</li> <li>- Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Institut für Angewandte Materialien / Werkstoffe der Elektrotechnik (IAM-WET)</li> <li>- Zentrum für Sonnenenergie- und</li> </ul>

			<p>Wasserstoff-Forschung Baden-Württemberg (ZSW) - Accumulators Materials Research (ECM)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt (DLR) am Helmholtz-Institut Ulm für Elektrochemische Energiespeicher - Institut für Technische Thermodynamik, Computergestützte Elektrochemie</li> </ul>
2.2	CharLiSiKo	<b>Charakterisierung von Li-Abscheidungen auf Si/Graphit Kompositanoden</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung Baden-Württemberg (ZSW) - Accumulators Materials Research (ECM)</li> <li>- Hochschule Aalen (HSAA) -Institut für Materialforschung</li> <li>- Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt (DLR) am Helmholtz-Institut Ulm für Elektrochemische Energiespeicher - Institut für Technische Thermodynamik, Computergestützte Elektrochemie</li> <li>- Assoziierter Projektpartner: Technische Universität München (TUM) - Heinz Maier-Leibnitz Zentrum (MLZ)</li> </ul>
2.2	InOPlaBat	<b>In-Situ und Operando Plating Detektion in Batterien</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Institut für Stromrichtertechnik und elektrische Antriebe (ISEA), RWTH Aachen</li> <li>- Institut für Energie- und Klimaforschung: Grundlagen der Elektrochemie (IEK-9) Forschungszentrum Jülich</li> <li>- Gemeinschaftslabor für Elektronenmikroskopie (GFE), RWTH Aachen und Ernst Ruska-Centrum für Mikroskopie und Spektroskopie mit Elektronen (ER-C 2) Forschungszentrum Jülich</li> <li>- RWTH Aachen - Lehrstuhl für Anorganische Chemie und Elektrochemie - Institut für Anorganische Chemie (IAC)</li> <li>- Technische Universität München (TUM), Department Chemie - Lehrstuhl für Theoretische Chemie</li> </ul>
2.4	AnaLiBa	<b>Analytik an Lithium-Ionen-Batterien</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie ICT - Produktbereich Angewandte Elektrochemie Sensorik und Analysesysteme</li> <li>- Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Institut für Angewandte Materialien - Angewandte Werkstoffphysik (IAM-AWP) Kalorimeterzentrum/Gruppe Batterien – Kalorimetrie und Sicherheit</li> <li>- ZSW – Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung Baden-</li> </ul>

			<p>Württemberg Batterietestzentrum ECA - Akkumulatoren Materialforschung</p>
3.1	QualiZell	<p>Fehlermöglichkeits- und Einflussanalyse von sicherheitskritischen Aspekten in der Lithium-Ionenzellproduktion</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Institut für Angewandte Materialien – Energiespeichersysteme (IAM-ESS)</li> <li>- Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Institut für Produktionstechnik (wbk)</li> <li>- Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung Baden-Württemberg (ZSW) - Produktionsforschung (ECP)</li> <li>- TU Braunschweig (TU BS) - Institut für Ökologische und Nachhaltige Chemie (IÖNC)</li> <li>- RWTH Aachen - Lehrstuhl und Institut für Stromrichtertechnik und Elektrische Antriebe</li> <li>- Hochschule Aalen (HSAA) - Institut für Materialforschung Aalen (IMFAA)</li> </ul>
3.2	IQ-El	<p>Inline-Zwischenproduktanalyse und Ableitung eines Quality Gate-Konzepts für die Elektrodenfertigung</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Institut für Angewandte Materialien (IAM-ESS)</li> <li>- Technische Universität Braunschweig (TUB) - Institut für Partikeltechnik (iPAT)</li> <li>- Fraunhofer Institut für keramische Technologien und Systeme (IKTS) - Mobile Energiespeicher und Elektrochemie</li> <li>- Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik (MVM)</li> <li>- 5Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Thin Film Technology (TFT) / Institut für Thermische Verfahrenstechnik (TVT)</li> <li>- Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung Baden-Württemberg (ZSW) - Accumulators Materials Research (ECM)</li> </ul>
3.2	KritBatt	<p>Inline-Klassifizierung von Beschichtungsfehlern zur Ermittlung der Kritikalität in der Elektrodenherstellung</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme (IKTS-DD) - Mobile Energiespeicher und Elektrochemie, Gruppe Elektrodenentwicklung</li> <li>- Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme (IKTS-MD), Institutsteil Material-Diagnostik , Gruppe Speckle-basierte Verfahren</li> <li>- Technische Universität Dresden (TUD) Institut für Werkstoffwissenschaft</li> <li>- RWTH Aachen - Lehrstuhl Production Engineering of E-Mobility Components (PEM)</li> </ul>

<b>BP</b>	AQuaBP	Projektskizze zum Begleitprojekt	<ul style="list-style-type: none"><li>- Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung, Baden-Württemberg (ZSW) -Akkumulatoren Materialforschung</li><li>- Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Institut für Angewandte Materialien (IAM-ESS)</li><li>- Technische Universität München (TUM) - Department of Chemistry</li></ul>
-----------	--------	----------------------------------	---