

Pressemitteilung

Karlsruher Institut für Technologie

Monika Landgraf

07.03.2023

<http://idw-online.de/de/news810390>

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Chemie, Elektrotechnik, Energie, Werkstoffwissenschaften
überregional



Karlsruher Institut für Technologie

Batterien: Wichtiges Rätsel der Passivierungsschicht gelöst

Lithium-Ionen-Batterien sind aus unserem Alltag nicht mehr wegzudenken. Sie funktionieren nur mit einer Passivierungsschicht, die sich beim ersten Ladevorgang an den Elektroden bildet. Wie Forschende am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) nun anhand von Simulationen festgestellt haben, entsteht diese Feststoff-Elektrolyt-Grenzphase nicht direkt an der Elektrode, sondern wächst aus dem Lösungsmittel. Über ihre Studie berichten die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in der Zeitschrift *Advanced Energy Materials* (DOI: 10.1002/aenm.202203966). Ihre Erkenntnisse ermöglichen, Leistungsfähigkeit und Lebensdauer von zukünftigen Batterien zu optimieren.

Lithium-Ionen-Batterien sind aus unserem Alltag nicht mehr wegzudenken. Sie funktionieren nur mit einer Passivierungsschicht, die sich beim ersten Ladevorgang an den Elektroden bildet. Wie Forschende am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) nun anhand von Simulationen festgestellt haben, entsteht diese Feststoff-Elektrolyt-Grenzphase nicht direkt an der Elektrode, sondern wächst aus dem Lösungsmittel. Über ihre Studie berichten die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in der Zeitschrift *Advanced Energy Materials* (DOI: 10.1002/aenm.202203966). Ihre Erkenntnisse ermöglichen, Leistungsfähigkeit und Lebensdauer von zukünftigen Batterien zu optimieren.

Vom Smartphone bis zum Elektroauto – fast überall, wo mobile Stromversorgung gefragt ist, werden Lithium-Ionen-Batterien eingesetzt. Mit entscheidend für den zuverlässigen Betrieb dieser und anderer Flüssigelektrolyt-Batterien ist die Feststoff-Elektrolyt-Grenzphase (solid electrolyte interphase – SEI). Diese Passivierungsschicht bildet sich beim ersten Anlegen einer Spannung. Der Elektrolyt wird in der unmittelbaren Nähe der Oberfläche zersetzt. Bisher war unklar, wie die Bestandteile des Elektrolyten eine bis zu 100 Nanometer dicke und stabile Schicht an der Oberfläche der Elektroden bilden können, wenn die Zersetzungsreaktion nur innerhalb weniger Nanometer von der Oberfläche möglich ist.

Die Passivierungsschicht an der Anodenoberfläche bestimmt die elektrochemische Leistungsfähigkeit und die Lebensdauer einer Lithium-Ionen-Batterie wesentlich mit, weil sie in jedem Lade- und Entladezyklus stark beansprucht wird. Bricht die SEI dabei auf, wird der Elektrolyt weiter zersetzt und die Kapazität der Batterie nimmt stetig ab – ein Prozess, der die Lebensdauer der Batterie bestimmt. Mit dem entsprechenden Wissen über Wachstum und Zusammensetzung der SEI lassen sich Batterieeigenschaften gezielt anpassen. Bisher gelang es allerdings weder mit experimentellen noch mit computergestützten Ansätzen, diese auf ganz unterschiedlichen Größen und Längenskalen ablaufenden komplexen Wachstumsprozesse zu entschlüsseln.

Studie innerhalb der EU-Initiative BATTERY 2030+

Forschende am Institut für Nanotechnologie (INT) des KIT haben es nun geschafft, die Bildung der SEI mit einem multiskaligen Ansatz zu charakterisieren. „Damit haben wir eines der großen Rätsel der wichtigsten Schnittstelle in Flüssigelektrolyt-Batterien gelöst – auch in Lithium-Ionen-Batterien, wie wir alle sie täglich nutzen“, sagt Professor Wolfgang Wenzel, Leiter der Forschungsgruppe „Multiscale Materials Modelling and Virtual Design“ am INT. Über ihre Erkenntnisse berichten die Karlsruher Forschenden in der Zeitschrift *Advanced Energy Materials*. Die Forschungsgruppe ist an der großangelegten europäischen Forschungsinitiative BATTERY 2030+ beteiligt, die auf sichere, bezahlbare, langlebige und nachhaltige Hochleistungsbatterien für die Zukunft zielt.

Mehr als 50 000 Simulationen für verschiedene Reaktionsbedingungen

Um das Wachstum und die Zusammensetzung der Passivierungsschicht an der Anode von Flüssigelektrolyt-Batterien zu untersuchen, erzeugten die Forschenden am INT einen Satz von mehr als 50 000 Simulationen, die verschiedene Reaktionsbedingungen repräsentieren. Sie stellten fest, dass die Bildung der organischen SEI auf einem lösungsvermittelten Weg erfolgt: Zunächst schließen sich SEI-Vorläufer, die direkt an der Oberfläche gebildet werden, weit entfernt von der Elektrodenoberfläche über Keimbildung zusammen. Anschließend wachsen die Keime so schnell, dass sich eine poröse Schicht bildet, welche schließlich die Elektrodenoberfläche bedeckt. Diese Erkenntnis erklärt die paradox anmutende Situation, dass die SEI sich nur in der Nähe der Oberfläche bilden kann, wo Elektronen verfügbar sind, aber ohne den beobachteten Mechanismus sofort aufhören würde zu wachsen, wenn dieser kleine Bereich nahe der Elektrode aufgefüllt ist. „Wir haben diejenigen Reaktionsparameter identifiziert, die die Dicke der Passivierungsschicht bestimmen“, erklärt Dr. Saibal Jana, Postdoc am INT und einer der Autoren der Studie. „Dies wird es künftig ermöglichen, Elektrolyte und geeignete Zusatzstoffe zu entwickeln, um die Eigenschaften der SEI zu steuern und damit die Leistungsfähigkeit und Lebensdauer der Batterien zu verbessern.“ (or)

Originalpublikation (Open Access)

Meysam Esmaeilpour, Saibal Jana, Hongjiao Li, Mohammad Soleymanibrojeni, and Wolfgang Wenzel: A Solution-Mediated Pathway for the Growth of the Solid Electrolyte Interphase in Lithium-Ion Batteries. *Advanced Energy Materials*, 2023. DOI: 10.1002/aenm.202203966
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/aenm.202203966>

Informationen zur EU-Initiative BATTERY 2030+: <https://battery2030.eu>

Details zum KIT-Zentrum Materialien: <https://www.materials.kit.edu>

Details zum KIT-Zentrum Energie: <https://www.energie.kit.edu>

Kontakt für diese Presseinformation:

Dr. Martin Heidelberger, Pressereferent, Tel.: +49 721 608-41169, E-Mail: martin.heidelberger@kit.edu

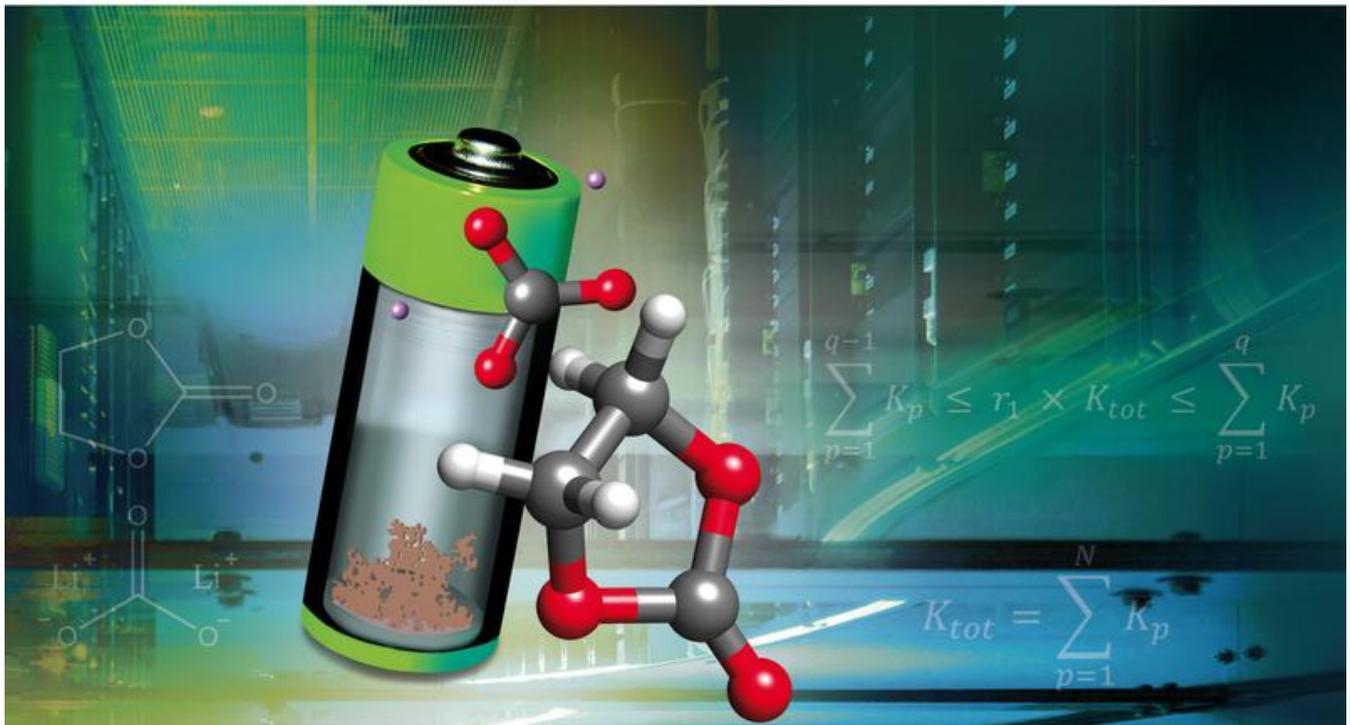
Als „Die Forschungsuniversität in der Helmholtz-Gemeinschaft“ schafft und vermittelt das KIT Wissen für Gesellschaft und Umwelt. Ziel ist es, zu den globalen Herausforderungen maßgebliche Beiträge in den Feldern Energie, Mobilität und

Information zu leisten. Dazu arbeiten rund 9 800 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter auf einer breiten disziplinären Basis in Natur-, Ingenieur-, Wirtschafts- sowie Geistes- und Sozialwissenschaften zusammen. Seine 22 300 Studierenden bereitet das KIT durch ein forschungsorientiertes universitäres Studium auf verantwortungsvolle Aufgaben in Gesellschaft, Wirtschaft und Wissenschaft vor. Die Innovationstätigkeit am KIT schlägt die Brücke zwischen Erkenntnis und Anwendung zum gesellschaftlichen Nutzen, wirtschaftlichen Wohlstand und Erhalt unserer natürlichen Lebensgrundlagen. Das KIT ist eine der deutschen Exzellenzuniversitäten.

Diese Presseinformation ist im Internet abrufbar unter: <https://www.kit.edu/kit/presseinformationen.php>

Originalpublikation:

https://www.kit.edu/kit/pi_2023_008-batterien-wichtiges-ratsel-der-passivierungsschicht-gelost.php



Forschende des KIT haben die Bildung der Feststoff-Elektrolyt-Grenzphase mit Hilfe von Simulationen charakterisiert.

(Collage: Christine Heinrich)

Christine Heinrich