

FZ Jülich im Kompetenzverbund Nord

H.P. Buchkremer, F. Tietz

FVEE, Ulm, 20.01.2010

Teilprojekte

Forschungszentrum Jülich

„Elektrochemische Forschung an Festkörperbatterien“

Leibniz Universität Hannover

„Ladungsträgertransport und atomare Strukturen ionenleitender Materialien für elektrochemische Energiesysteme: 6,7Li-MAS-NMR-spektroskopische Grundlagenuntersuchungen“

Max Planck Institut für Eisenforschung Düsseldorf

„Untersuchungen an Modellgrenzflächen für Li-Ionen Batterien“

Ruhr Universität Bochum

„Mikroelektrochemische Untersuchungen an Modellmaterialien für Li-Batterien“

RWTH Aachen

„Bewertung von Alterungsmechanismen und Lebensdauervorhersage von Lithium-Ionen-Batterien“

Westfälische Wilhelms-Universität Münster

„Elektrochemie für Material-, Grenzflächen- und Funktionsanalytik an nanostrukturierten Lithium-Batterie-Verbundstrukturen“

Arbeitsziele

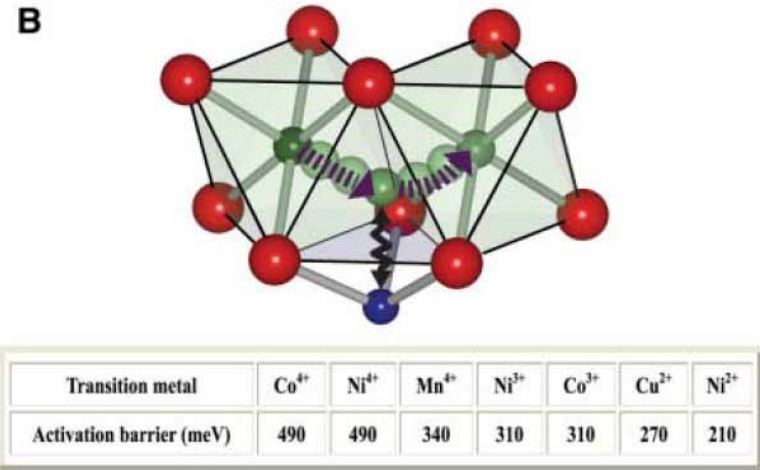
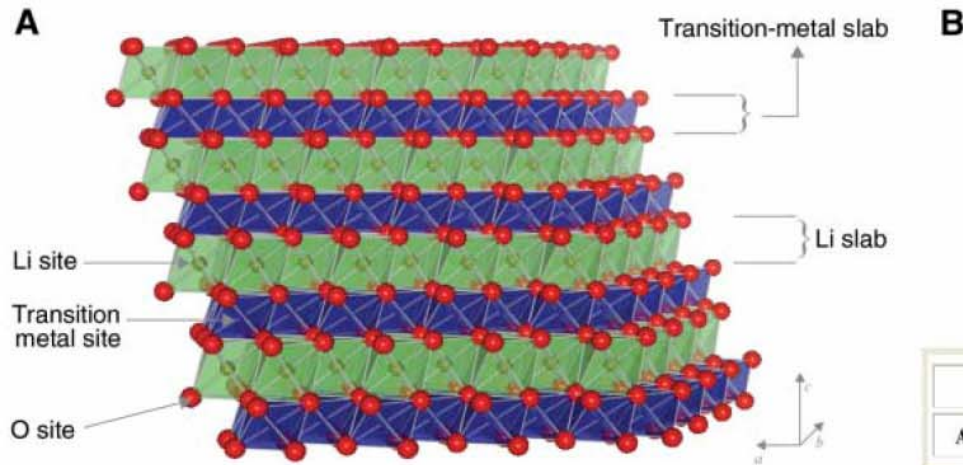
FZ Jülich

- Herstellung von Pulver für Kathoden und Elektrolyte, um die Transporteigenschaften mit unterschiedlichen Methoden zu untersuchen und um die bevorzugten Zusammensetzungen auswählen zu können für die weiteren Arbeiten.
- Herstellung von Substraten aus Kathodenmaterial und Optimierung des Kathodengefüges
- Herstellung von Elektrolytschichten auf Kathodensubstraten

Investigation of new cathode materials

- Experimental search for new materials (FZJ)
- Theoretical verification of energy barriers in new materials (NN)
- Identification of influence of structural parameters using **DFT methods**

LiMO₂ cathodes



The table shows the activation barrier for Li motion for various transition metals near the activated state. Values were calculated by GGA DFT (GGA DFT = generalized gradient approximation to density functional theory).

Activation energy for Li hops is determined by and very sensitive to

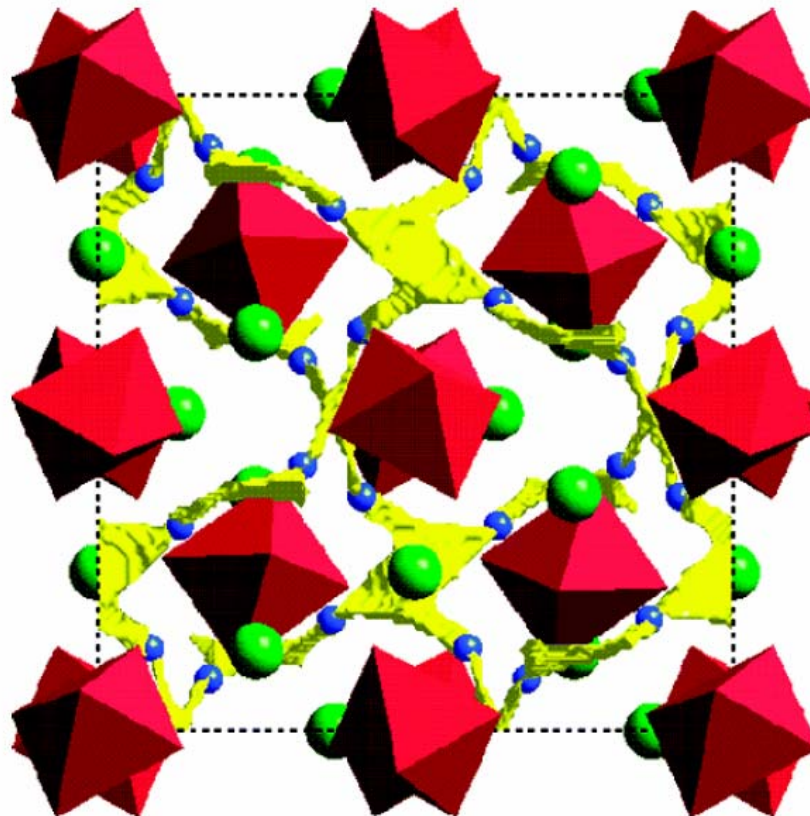
- changing the Li slab space ($\Delta d = 0.01 \text{ \AA} \propto 10\text{-}15 \text{ meV}$) (steric/strain effect)
 - type of transition metal
 - content of transition metal in the Li layer
 - disorder of transition metal and Li site occupation
- (electrostatic effect)

[1] K. Kang, Y. S. Meng, J. Bréger, C. P. Grey, G. Ceder, *Science* **311** (2006) 977-980

Electrolytes - Li garnets

General formula: A_2 B_3 C_3 O_{12}

Coordination number 6 8 4



Al_2	Mg_3	Si_3	O_{12} (mineral)
Al_2	Y_3	Al_3	O_{12} (YAG)
Fe_2	Y_3	Fe_3	O_{12} (YIG)

A'_2Li_{2-x}	La_3	Li_{3+x}	O_{12} ($A' = Nb, Ta, Sb$)
A'_2Li_{3-x}	$B'La_2$	Li_{3+x}	O_{12} ($B' = Sr, Ba$)
Zr_2Li_{4-x}	La_3	Li_{3+x}	O_{12}

[2] V. Thangadurai, S. Adams, W. Weppner, *Chem. Mater.* 16 (2004) 2998-3006

Investigation of new electrolyte materials

- Synthesis of garnet materials with varying cation ratios and substitutions (FZJ)
- Identification of stability limits of LLZ garnets (FZJ)
- Theoretical modification of compositions and impact on ionic conductivity using **bond valence analysis**
- Thermodynamic modelling of phase field/phase diagrams

Status

FZJ – IEF-1 has strong competences in

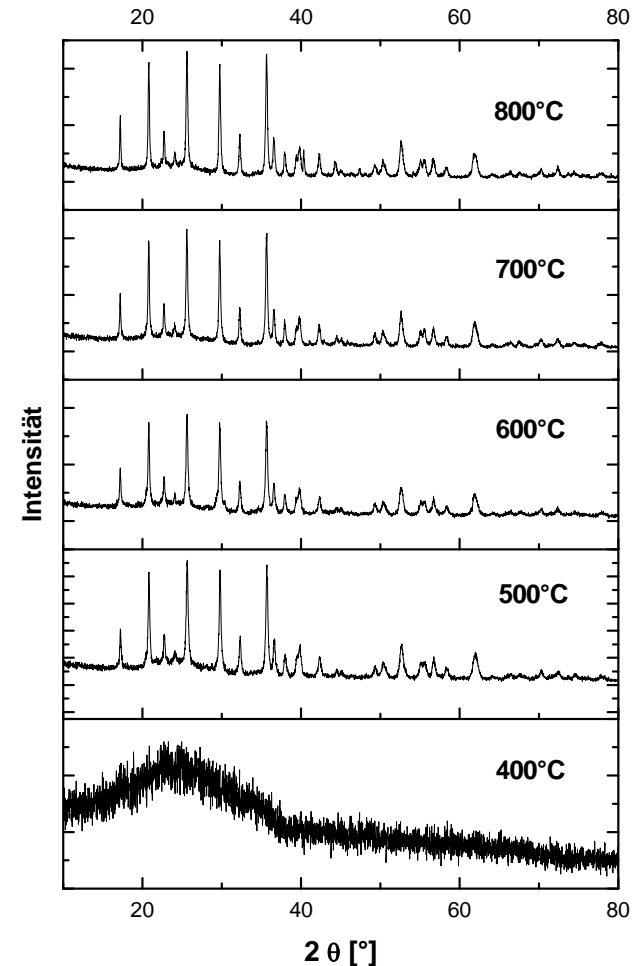
- **Synthesis** of ceramic materials from nano to micro-scale of particles (sol gel, co-precipitation, complexation, spray-pyrolysis, solid state reaction)
- **Manufacturing** of thin and thick layers (CVD, EB-PVD, sputtering, spin coating, screen printing, wet powder spraying, tape casting)
- **Characterisation** of powders and components (particle size analysis, BET surface, Hg porosimetry, SEM, XRD, etc.)

FZJ – IEF-1 looks for a partner with competences in

- Modelling of energy barriers using **DFT methods**
- Simulation of conduction paths using **bond valence analysis**
- **Theoretical support for finding new materials for solid state Li batteries**

Li₇La₃Zr₂O₁₂ als Elektrolytmaterial

Als keramischer Elektrolyt mit einer Granat-Struktur wurde das Li₇La₃Zr₂O₁₂ synthetisiert. Das Material besitzt eine hohe Ionenleitfähigkeit durch eine starke Delokalisation des Li-Ions im Kristallgitter.



XRD-Messungen des Pechini-LiFePO₄ nach Sinterung in Ar