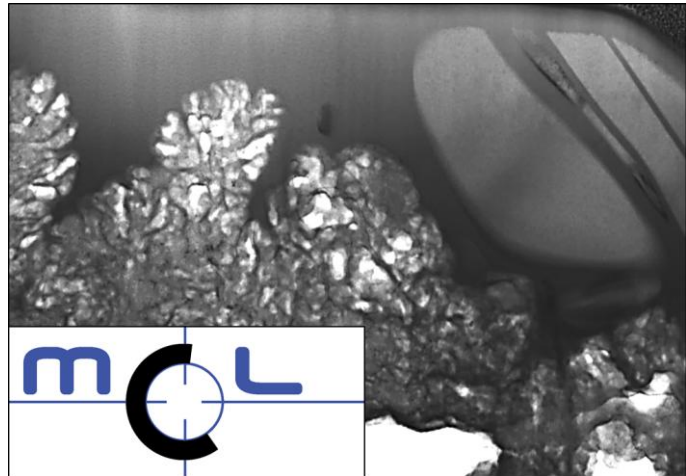


**IC-MPPE**  
**Integrated Computational Materials**  
**Process and Product Engineering.**

Programm: COMET – Competence  
Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET- K2 Zentrum, und  
FFG Mobilität der Zukunft, EU Horizon  
2020

Projekte: ASSESS, OpMoSi, Eco2Lib,  
01/2020-12/2024, multi-firm



Transmissionselektronenmikroskopie Aufnahme von gewachsener amorpher Silizium-Elektrolyt-Verbundschicht nach 300 Lade/Entlade Zyklen Bild: MCL

## EINE NEUE PERSPEKTIVE AUF DIE DEGRADATION VON SI-BASIERTEN ANODEN

DIE STARKEN VOLUMENÄNDERUNGEN DES SILIZIUMS BEIM LADEN UND ENTLADEN FÜHREN ZUR STRUKTURELLEN UMWANDLUNG (AMORPHISIERUNG) DES MATERIALS, WAS DIE KAPAZITÄT UND LEBENSDAUER DER LITHIUM-IONEN BATTERIE MASSGEBLICH BESTIMMT.

Der Wandel zur Elektrifizierung erfordert Lithium-Ionen-Batterien mit höherer Energiedichte, besserer Zyklenstabilität und längerer Lebensdauer. Dafür sind neue Elektrodenmaterialien notwendig, um die nächste Batteriegeneration voranzutreiben. Silizium (Si) mit seiner hohen Energiekapazität birgt enormes Potenzial für Lithium-Ionen-Batterien (LIBs) und Festkörperbatterien (SSBs) und eröffnet neue Möglichkeiten in der Energiespeicherung.

Trotz Fortschritten im Verständnis der elektrochemischen Eigenschaften von Si-Anoden sind die Auswirkungen von Volumenänderungen und mechanischen Belastungen auf die kristalline Struktur von Silizium noch wenig erforscht. Die Degradation wird vor allem durch die Reformierung der Silizium-

Elektrolyt-Grenzfläche (SEI) ausgelöst. Risse in der SEI-Schicht legen frisches Silizium frei, was zu wiederholtem SEI-Wachstum führt und dadurch eine dicke Silizium-Elektrolyt-Verbundschicht (SEC) entsteht. Neben diesen chemischen Prozessen kommt es durch Lithium-Einlagerung im Siliziumpartikel auch zu einem Übergang von der kristallinen in die amorphe Phase.

Studien zeigen, dass ähnliche Phasenübergänge unter mechanischer Belastung wie Kompression oder Nanoindentation auftreten. Dabei destabilisieren Scherbänder und kristallografische Defekte das Kristallgitter.

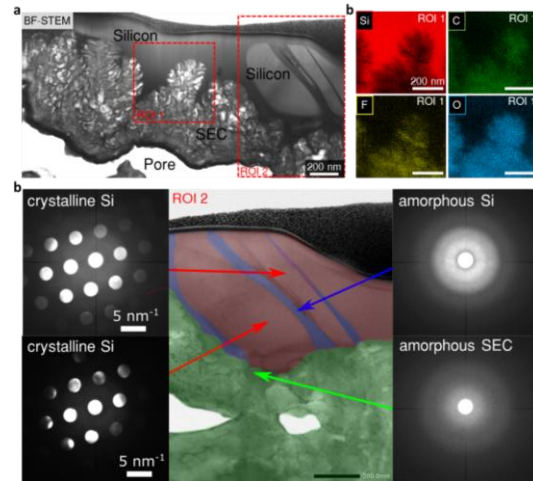
## SUCCESS STORY

Unsere Forschung zeigt mithilfe von 4D-STEM, FESEM, Synchrotron-Röntgen-Nanotomographie und KI-gestützter Mikrostrukturanalyse, dass Scherbänder in Si-basierten Anoden auftreten können, ausgelöst durch Spannungen während des Zyklisierens. Diese Übergänge fördern ein ungleichmäßiges SEC-Wachstum und verändern die Spannungsverteilung in der Anode. Zusätzlich beschleunigen phasenabhängige Lithierungsgeschwindigkeiten diese Prozesse. Überraschenderweise könnten diese Phasenübergänge langfristig stabilisierend wirken, indem sie Rissbildung und Partikelzerstörung mindern und den Batterieausfall verzögern.

### Auswirkungen und Perspektiven

Diese Studie beleuchtet das Zusammenspiel mechanischer und chemischer Degradationsprozesse und liefert neue Einblicke in Siliziumanoden. Die Steuerung von Grenzflächenkinetiken und die Entwicklung optimierter Siliziumarchitekturen sind entscheidend für die Weiterentwicklung der Energiespeicherung. In Zusammenarbeit mit Materials Center Leoben Forschung GmbH, Montanuniversität Leoben, der Österreichischen Akademie der Wissenschaften, Varta Innovation GmbH und ESRF – The European Synchrotron schaffen

wir eine Grundlage für zukünftige Innovationen in der Batterietechnologie.



Hochauflösende Aufnahmen zeigen, dass sich nach 300 Zyklen um ein Silizium-Partikel der Anode deutliche Ablagerungen (Dendriten) gebildet haben, wobei das Partikel selbst im Inneren teilweise kristallin bleibt und keine Verunreinigungen durch Fremdstoffe aufweist. Bild: MCL, Details wurden in der unten angegebenen Publikation veröffentlicht.



M. Häusler et al. Amorphous shear band formation in crystalline Si-anodes governs lithiation and capacity fading in Li-ion batteries. *Commun Mater* 5, 163 (2024).

### Projektkoordination (Story)

Priv.- Doz. Dr. Roland Brunner  
 Group Leader Material and damage analytics  
 Materials Center Leoben Forschung GmbH  
 T +43 (0) 3842 45922 - 620  
 Roland.brunner@mcl.at

### Projektpartner

- Materials Center Leoben Forschung GmbH, Österreich
- ESRF- The European Synchrotron, Frankreich
- Varta Micro Innovation GmbH, Österreich
- Montanuniversität Leoben, Österreich
- Erich Schmid Institute of Materials Science, Austrian Academy of Sciences, Österreich
- Varta Microbattery GmbH, Deutschland

Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMIMI, BMWET und die Bundesländer Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt ([www.ffg.at/comet](http://www.ffg.at/comet)).

**SUCCESS STORY**



 **Bundesministerium  
Innovation, Mobilität  
und Infrastruktur**

 **Bundesministerium  
Wirtschaft, Energie  
und Tourismus**

Österreichische  
Forschungsförderungsgesellschaft mbH  
Sensengasse 1, A-1090 Wien  
T +43 (0) 5 77 55 - 0  
office@ffg.at  
www.ffg.at