

Batterieforschungsprojekt MAGNIFICO gestartet

Magnesium-Ionen-Batterien (MIB) gelten aufgrund ihrer spezifischen Zellchemie als vielversprechend, da diese potenziell in der Lage ist, für stationäre Energiespeichersysteme eine höhere Energiedichte zu niedrigeren Kosten als Lithium-Ionen-Batterien zu erreichen. Dies beruht auf den natürlichen Vorkommen, den niedrigen Kosten, der Umweltverträglichkeit und den elektrochemischen Eigenschaften von Magnesium (Mg). Das größte Hindernis für die weitere Entwicklung von MIBs ist jedoch die Inkompatibilität von Mg-Metallanoden mit herkömmlichen Elektrolyten. Diese Lösungen zersetzen sich an der Oberfläche des metallischen Mg und bilden eine Passivierungsschicht, die die Mg^{2+} -Diffusion und damit die elektrische Leitfähigkeit stark behindert.

Im kürzlich gestarteten Forschungsprojekt MAGNIFICO entwickeln Forscher:innen des AIT Austrian Institute of Technology und des [Institute of Science and Technology Austria \(ISTA\)](#) einen sicheren und nachhaltigen nasschemischen Ansatz zur Herstellung eines Anodenmaterials der Generation 5, indem eine schützende intermetallische Zwischenphase auf die Oberfläche von Mg-Metallpulverpartikeln maßgeschneidert wird. Diese Beschichtung verhindert die Zersetzung des Elektrolyten und die Mg-Passivierung, während die Diffusion von Mg^{2+} -Kationen erhalten bleibt. Es wird erwartet, dass die so geschützte Mg-Metallanode eine lange Zelllebensdauer (> 4000 Zyklen) erreicht und damit den derzeitigen Stand der Technik für MIBs übertrifft. Diese innovative Strategie wird es auch ermöglichen, die auf Mg-Pulver basierende Anode mit herkömmlichen Techniken und der bereits für Lithium-Ionen-Batterien entwickelten Infrastruktur für die Batterieproduktion industriell zu verarbeiten und herzustellen. Als Abschluss von MAGNIFICO wird die oberflächenbearbeitete Mg-Metall-Anode in eine umweltverträgliche 3-V-Mg-Ionen-Batterie für stationäre Energiespeichersysteme integriert, die eine Hochspannungs-Kathode aus dem wenig kritischen Rohstoff $MgMn_2O_4$ verwendet.

Experimentelle Methoden und Computerberechnungen (Dichtefunktionaltheorie und Machine-Learning-Potenzial) werden synergetisch eingesetzt, um die Eigenschaften der intermetallischen Zwischenphase zu charakterisieren. Mikroskopische, spektroskopische, diffraktometrische und elektrochemische Techniken werden eingesetzt, um die Zusammensetzung, die Morphologie, die Transporteigenschaften und die Stabilität der künstlichen Schutzschicht nach der Synthese sowie bei verschiedenen Ladezuständen (ex-situ) und während des Ladezyklus (in-situ) zu bewerten. First Principles und Potenzialberechnungen mit maschinellem Lernen werden durchgeführt, um mechanistische und molekulare Einblicke in die intermetallischen Interphasen unter idealen (0K) und realistischen Bedingungen (Anwendungstemperatur) zu gewinnen. Phasenstabilität und -energetik, Defektchemie, Defektbildungsenergien, Transporteigenschaften usw. werden im Rahmen des Projekts berechnet.

Dr. Martina Romio, Batterieforscherin am AIT Center for Low-Emission Transport und MAGNIFICO-Projektleiterin: „Durch die Kombination von rechnerischen und experimentellen Ansätzen für das Materialdesign zielt MAGNIFICO darauf ab, innovative Strategien für die Entwicklung von Mg-Pulveranoden zu entwickeln und MIBs über den Stand der Technik hinaus zu verbessern. Dies soll ein weiterer Baustein auf dem Weg zu einem nachhaltigen, klimafreundlichen und effizienten Energiesystem im stationären Bereich und Mobilitätssektor sein.“

MAGNIFICO wird von der Österreichischen Forschungsförderungsgesellschaft FFG unter Fördernummer 899395 finanziert.

Battery research project MAGNIFICO launched

Magnesium-ion batteries (MIBs) are a promising chemistry to potentially achieve higher energy densities at lower cost than lithium-ion batteries for stationary energy storage applications. This is possible thanks to the natural abundance, low costs, environmental sustainability, and electrochemical properties of magnesium (Mg). However, the major obstacle in the further development of MIBs is the incompatibility of Mg metal anodes with conventional electrolytes. These solutions decompose at the surface of metallic Mg, forming a passivation layer that inhibits Mg^{2+} diffusion and electronic transport.

In the recently launched MAGNIFICO project, researchers from the AIT Austrian Institute of Technology and the [Institute of Science and Technology Austria \(ISTA\)](#) are designing a safe and sustainable wet-chemical approach to develop a Generation 5 anode material by tailoring a protective intermetallic interphase onto the surface of Mg metal powder particles. This coating layer will prevent electrolyte decomposition and Mg passivation, while maintaining Mg^{2+} cation diffusion. The as-protected Mg metal anode is expected to achieve long cell lifetimes (> 4000 cycles), thereby exceeding the current state-of-the-art for MIBs. This innovative strategy will also allow the Mg-powder-based anode to be processed and fabricated with conventional techniques and battery production infrastructures already developed for the lithium-ion batteries industry. At the completion of MAGNIFICO, a surface-engineered Mg metal anode will be integrated into an environmentally sustainable 3 V Mg-ion battery for stationary energy storage applications using a high voltage, low-critical raw material $MgMn_2O_4$ cathode.

Experimental methods and computational calculations (density functional theory and machine learning potential) will be synergistically used to characterise the properties of the intermetallic interphase. Microscopic, spectroscopic, diffractometric, and electrochemical techniques will be applied to evaluate the composition, morphology, transport properties, and stability of the artificial protective layer after synthesis, as well as at different states of charge (ex-situ) and during cell cycling (in-situ). First principles and machine learning potential calculations will be performed to gain mechanistic and molecular-level insights on the intermetallic interphases at ideal (0K) and realistic (application temperature) conditions. Phase stability and energetics, defect chemistry, defect formation energies, transport properties, etc. will be computed throughout the project.

Dr. Martina Romio, battery researcher at the AIT Center for Low-Emission Transport and MAGNIFICO project manager: “Combining computational and experimental approaches to material design, MAGNIFICO aims to develop cutting-edge strategies for engineering Mg-powder anodes and push MIBs beyond the state-of-the-art. This should be another step towards the implementation of a sustainable, climate-friendly and efficient energy system in stationary and mobility sectors.”

The MAGNIFICO project has received funding from the Austrian Research Promotion Agency (Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft, FFG) under grant no. 899395.