

# LIANO

Lithium- Silizide als Anodenmaterial für Lithium- Ionen-Batterien

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Mobilität der Zukunft, Mobilität der Zukunft, MdZ - 12. Ausschreibung (2018)	<b>Status</b>	abgeschlossen
<b>Projektstart</b>	01.09.2019	<b>Projektende</b>	28.02.2021
<b>Zeitraum</b>	2019 - 2021	<b>Projektlaufzeit</b>	18 Monate
<b>Keywords</b>	Lithium-Ionen- Batterie; Lithiumsilizid; Prä lithiierung; Hochenergieanode; Materialbeschichtung		

## Projektbeschreibung

Derzeit gelten Superkondensatoren und Batterien als die effektivsten elektrochemischen Energiespeicher für erneuerbare Energien, Elektrofahrzeuge und viele mobile Anwendungen, die Teil unseres täglichen Lebens geworden sind. Es wird erwartet, dass Lithium-Ionen (Li-Ionen)-Batterien aufgrund ihrer hervorragenden Speicherkapazitäten und langen Lebensdauer den Markt für zumindest die nächsten 10 Jahre dominieren werden. Graphitischer Kohlenstoff ist das modernste Material für die negative Elektrode von Lithium-Ionen-Batterien. Leider leiden Graphitanoden unter einer relativ geringen Ladekapazität und einem Kapazitätsverlust beim schnellen Laden/Entladen. Um die Anforderungen heutiger und zukünftiger Anwendungen mit Lithium-Ionen-Batterien zu erfüllen, ist es von entscheidender Bedeutung, effizientere Elektrodenmaterialien zu entwickeln.

Silizium (Si) ist eines der vielversprechendsten Anodenmaterialien für hochenergetische Lithium-Ionen-Batterien der nächsten Generation aufgrund seiner theoretischen Ladekapazität, die zehnmal höher ist als die von Graphit. Allerdings bestehen bei Si-Anoden noch beträchtliche Herausforderungen: Es gibt große Volumenänderungen während des Ladens/Entladens, und ihre geringe coulombsche Effizienz in den ersten Zyklen aufgrund der kontinuierlichen Solid Electrolyte Interphase (SEI)-Schichtbildung verbraucht eine große Menge an Lithium. LIANO zielt darauf ab, diese Einschränkungen zu überwinden, indem es eine neue Art von nanostrukturiertem Anodenmaterial auf Si-Basis entwickelt. Neuartige mesoporöse Lithiumsilizide mit Porengrößen zwischen 2 nm und 50 nm werden unter Verwendung intelligenterer Synthesemethoden für Template/Selbstmontage- und Imprägnierungstechniken synthetisiert. Um der hohen Reaktivität des Lithiumsilizids entgegenzuwirken und ein atmosphärisch stabiles Material zu erzeugen, wird eine Schutzschicht aus Lithiumfluorid mittels eines aus einem Fluoropolymer in situ generierten Fluorgases aufgebracht.

Um diese Materialdesignanstrengungen zu unterstützen, wird es wichtig sein, die physikalisch-chemischen Eigenschaften dieser mesoporösen Materialien genau zu charakterisieren. Rationales Design der Oberfläche im Hinblick auf Kernzusammensetzung, Textur, Porennetz, Größe und Volumen sowie die spezifische Oberfläche der Materialien werden von entscheidender Bedeutung sein. Daher wird eine Kombination von experimentellen Techniken wie Gasadsorption, Röntgendiffraktion, Elementaranalyse und Elektronenmikroskopie eingesetzt, um ein gründliches Verständnis dieser

neuartigen Lithiumsilizide zu ermöglichen. Ihre elektrochemischen Eigenschaften und ihr Potenzial als Anodenmaterial für Lithium-Ionen-Batterien werden dann mit einer Vielzahl von elektrochemischen Methoden untersucht. Auch Röntgen-Photoelektronenspektroskopie-Studien werden durchgeführt, um die Wirkung der Lithiumfluoridschutzschicht auf das Lithiumsilizid und die Zusammensetzung der SEI-Schicht zu verstehen.

Diese Techniken werden zur Optimierung des synthetisierten LiF-beschichteten Lithiumsilizids beitragen, um die Entwicklung eines neuen stabilen Anodenmaterials für Hochenergie-Li-ion-Batterien mit höheren Speicherkapazitäten insbesondere für Traktionsanwendungen zu ermöglichen.

## **Abstract**

Currently, supercapacitors and batteries are considered the most effective electrochemical energy storage devices for renewable energies, electric vehicles, and many mobile applications that have become part of our daily lives. Lithium-ion (Li-ion) batteries are expected to dominate the market for at least the next 10 years due to their excellent storage capacity and long life. Graphitic carbon is the most advanced material for the negative electrode of lithium-ion batteries. Unfortunately, graphite anodes suffer from a relatively low charge capacity and a loss of capacity during fast charging/discharging. In order to meet the requirements made on today's and tomorrow's lithium-ion battery devices, it is crucial to develop more efficient electrode materials.

Silicon (Si) is one of the most promising anode materials for next-generation high-energy lithium-ion batteries due to its theoretical charge capacity, which is ten times higher than that of graphite. However, Si anodes themselves pose challenges: There are large volume changes during charging/discharging, and their low Coulombic efficiency in the first cycles consumes a large amount of lithium due to continuous solid electrolyte interphase (SEI) layer formation. LIANO aims to overcome these limitations by developing a new type of Si-based nanostructured anode material. Novel mesoporous lithium silicides with pore sizes between 2 nm and 50 nm are synthesized by using more intelligent synthesis methods for template/self assembly and impregnation techniques. In order to counteract the high reactivity of the lithium silicide and to produce an air-stable material, a protective layer of lithium fluoride is applied, using a fluorine gas generated in situ from a fluoropolymer.

To support these design efforts, it will be important to accurately characterize the physico-chemical properties of these mesoporous materials. Rational design of the surface compared to the core composition, texture, pore network, size and volume as well as the specific surface area of the materials will be crucial. Therefore, a combination of experimental techniques such as gas adsorption, X-ray diffraction, elemental analysis and electron microscopy is used to provide a thorough understanding of these novel lithium silicides. Their electrochemical properties and their potential as anode materials for lithium-ion batteries will then be investigated with a variety of electrochemical methods. X-ray photoelectron spectroscopy studies are also conducted to understand the effect of the protective layer on the lithium silicide and the composition of the SEI layer.

These techniques will contribute to the optimization of the synthesized LiF-coated lithium silicide to enable the development of a new stable anode material for high-energy Li ion batteries with higher storage capacities, especially for traction applications.

## **Projektkoordinator**

- AIT Austrian Institute of Technology GmbH

## **Projektpartner**

- Universität Wien