RESTINA

REcovered Silicon / TIN Sulphide Nanocomposite Anode Materials for Generation 3b Lithium Ion Batteries

Programm / Ausschreibung	Mobilität der Zukunft, MdZ M-EraNet Ausschreibung 2021	**Status**	abgeschlossen
Projektstart	01.09.2022	**Projektende**	30.04.2026
Zeitraum	2022 - 2026	**Projektlaufzeit**	44 Monate
Keywords	lithium ion battery; material design; silicon; interface; nanocomposite coatings		

Projektbeschreibung

In RESTINA werden Silizium-Nanopartikel, die aus rückgewonnenem Silizium von ausgedienten Solarzellen stammen, als Rohstoff für die Entwicklung von Si/SnS2-Nanokomposit-Anodenaktivmaterialien mit niedrigem CRM-Wert für Lithium-Ionen-Batterien der Generation 3b verwendet. Diese neuartige Klasse von Anodenaktivmaterialien vereint die hohe spezifische Kapazität von Silizium mit der hohen Leitfähigkeit von Zinn. Aufgrund der Reaktion mit Schwefelatomen in SnS2 werden während der Lithiierung Si/Li2S- und Sn/Li2S-Heterogrenzflächen erzeugt, welche die Volumsausdehnung der Silizium- und Zinn-Nanopartikel puffern und ihre Agglomeration während aufeinander folgender Lithiierungszyklen verhindern. Zur Synthese der Si/SnS2-Nanokomposite werden zwei Strategien verfolgt. Die Solvothermalsynthese wird angewendet, um SnS2-Schichten auf Silizium-Nanopartikel abzuscheiden, die in einem umweltfreundlichen Lösungsmittel dispergiert sind. Im zweiten Ansatz werden Silizium- und SnS2-Nanopartikel durch hochenergetisches Kugelmahlen homogen verteilt. Das Ziel ist es, eine reversible Kapazität von 1000 mAh/g über mehr als 1000 Zyklen zu erreichen.
Da innovative Materialien für Hochleistungsanwendungen nur maßgeschneidert werden können, wenn ihre Phasengleichgewichte, Phasenumwandlungen, Strukturen und Thermochemie bekannt sind, ist es ein weiteres Ziel von RESTINA, Phasengleichgewichte, Konstitution und Kristallstrukturen von Bulk- und Nano-Si/SnS2 experimentell aufzuklären. Das Phasendiagramm, die Kristallstruktur und die thermochemischen Daten aus RESTINA werden verwendet, um die Gibbsenergien der Phasen zu modellieren und die elektrochemischen Eigenschaften der jeweiligen Si/SnS2-Nanokomposite vorherzusagen.
Nach der Synthese werden kohlenstoffbasierte Schutzschichten auf die Si/SnS2-Nanokomposite aufgebracht. Diese Beschichtungen umschließen die Partikel gleichmäßig, um eine homogene, chemisch stabile Kohlenstoff/Luft-Grenzfläche zu schaffen. Durch die stabilisierten Partikeloberflächen können die Nanokomposite ohne Entstehung von giftigem H2S an der Luft gehandhabt werden. Darüber hinaus schützen die kohlenstoffbasierten Beschichtungen die Nanokompositpartikel während der wasserbasierten Herstellung der Elektroden vor der Reaktion mit Wasser, wodurch die Oxidation von Silizium verhindert und die Bildung von brennbarem H2-Gas und giftigem H2S gehemmt wird. So werden Design und Entwicklung von umweltverträglichen, wasserbasierten Verarbeitungsprozessen für die Elektrodenherstellung ermöglicht. Darüber hinaus können die Elektrodenmaterialien in wässrigen Lösungsmitteln ohne Nebenreaktionen rezykliert werden.
Die Synthese der Nanokomposite und die Verarbeitung der entsprechenden wässrigen Slurries werden mit Hilfe von

Pilotanlagen auf ein industrieelevantes Niveau hochskaliert. Mit den beschichteten Si/SnS2-Nanokompositen als Anodenmaterial in Kombination mit Hochenergie-Kathodenmaterialien und Hochspannungselektrolyten werden Pouch-Zellen hergestellt, um deren Entwicklungspotenzial zu demonstrieren. Die Alterungsmechanismen und -prozesse werden ebenso untersucht.
Das Konzept von RESTINA ist innovativ, da es einen ganzheitlichen und verantwortungsvollen Ansatz zur Erforschung und Gestaltung neuer Materialien darstellt. Umweltverträglichkeit, Verarbeitbarkeit und Upscaling der Materialien werden bereits in der Projektentwicklungsphase berücksichtigt. Der TRL-Wert zu Beginn des Projekts ist 2, da die Anwendung von beschichteten Si/SnS2-Nanokompositen als anodenaktive Materialien für LIBs innovativ ist und die Technologie noch am Anfang der Entwicklulng steht. Am Ende des Projektes wird jedoch ein TRL-Wert von 3 durch die Herstellung der Si/SnS2 Nanokomposite und die Unterschung deren elektrochemischen Alterungsmechanismen an der Universität Liège, Belgien erreicht. In Österreich wird die Herstellulng der Si/SnS2 Nanokomposite durch den Industriepartner hochskaliert und am AIT Generation 3b Pouch-Zellen mit einer Kapazität von 2-5 Ah unter Anwendung von umweltverträglichen Verfahren gefertigt und getestet. Hierbei wird ein TRL-Wert von 4 erreicht.

Abstract

In RESTINA, silicon (Si) nanoparticles recovered from end-of-life solar panels will be used as a raw-material to develop protectively coated, low-CRM Si/SnS2 nanocomposite anode active materials for generation 3b Lithium ion batteries (LIBs). This novel class of anode active materials will benefit from silicon’s high specific capacity and tin’s (Sn) electronic conductivity. Due to the presence of sulphur (S) in SnS2, Si/Li2S and Sn/Li2S heterojunction interfaces will be generated during lithiation to buffer the volume expansions of the Si and Sn nanoparticles and inhibit their agglomeration during successive lithiation cycles. Two strategies will be followed to synthesize the Si/SnS2 nanocomposites. The solvothermal method will be applied to deposit SnS2 layers onto the Si nanoparticles dispersed in an environmentally benign solvent, whereas high-energy ball milling will be performed to create a homogeneous distribution of the components. The goal of RESTINA is to deliver an anode material with a reversible capacity of 1000 mAh/g over more than 1000 cycles.
Since innovative materials for high-performance applications can only be designed when their phase equilibria, transformations, crystallography, and thermochemistry are known, RESTINA will also clarify the phase equilibria, constitution, and crystal structures of bulk and nano Si/SnS2 experimentally. The phase diagram, crystal structure and thermochemical data generated in RESTINA will be used to model the Gibbs free energies of the phases and predict the electrochemical performance properties of the Si/SnS2 nanocomposites.
Protective, carbon-based coatings will be applied onto the Si/SnS2 nanocomposites after synthesis. The carbon-based coatings will uniformly cover the particles to create a homogeneous, chemically stable carbon/air interface, allowing them to be handled in ambient air without generation of toxic H2S fumes. Furthermore, the carbon-based coatings will protect the nanocomposite particles from reacting with water during the aqueous processing of the electrodes, thereby preventing oxidation of Si and inhibiting the formation of flammable H2 gas and toxic H2S. This will enable the design and development of environmentally sustainable, water-based processing procedures for electrode fabrication as well as recycling in aqueous solvents without side-reactions at end-of-life.
The synthesis of the nanocomposites and the water-based processing of the nanocomposite slurries will be upscaled to the semi-industrial level using pilot line equipment. Pouch cells will be manufactured using the protectively coated Si/SnS2 nanocomposites as the anode in combination with high-energy cathode materials and high-voltage electrolytes to demonstrate the potential of the new anode materials as well as to study the electrochemical reaction and ageing mechanisms of Si/SnS2.

The concept of RESTINA is innovative, as it represents a holistic approach toward the responsible research and design of new materials by addressing the environmental sustainability, processability, and upscaling of the materials already in the project development stage. The TRL at the start of the project is 2, since the application of coated Si/SnS2 nanocomposites as anode active materials for LIBs is a new and original approach, and the technology is still in its infancy and requires basic research. At the end of the project, a maximum TRL of 3 will be achieved in Belgium for the synthesis of the Si/SnS2 nanocomposites and clarifying the electrochemical ageing mechanisms. In Austria, a maximum TRL of 4 will be attained, as the synthesis of the Si/SnS2 nanocomposites will be upscaled by the industrial partner and generation 3b pouch cells with 2-5 Ah capacity will be fabricated and tested using green processing of the electrode materials.

Projektkoordinator

- AIT Austrian Institute of Technology GmbH

Projektpartner

- FRIMECO Produktions GmbH
- Universität Wien Institut für Funktionelle Materialien und Katalyse