

**Streszczenie pracy doktorskiej mgr. inż. Piotra Jankowskiego
„Computational and Experimental Studies on SEI-forming Electrolyte
Additives for Lithium-ion Batteries”**

(„Badania obliczeniowe i eksperymentalne dodatków formujących warstwę pasywną do elektrolitów baterii litowo-jonowych”)

Magazynowanie energii jest kluczowe dla trwającej rewolucji, która ma na celu bardziej zrównoważony rozwój poprzez zastąpienie paliw kopalnych przez odnawialne źródła energii. W tym kontekście baterie są odpowiednie do magazynowania energii i baterie litowo-jonowe są obecnie stosowane w urządzeniach przenośnych, samochodach elektrycznych oraz jako bufony sieci energetycznej przy elektrowniach słonecznych i wiatrowych. Jednak dalsza poprawa stabilności i czasu ich pracy jest potrzebna, szczególnie dla dwóch ostatnich zastosowań. Dodatki do elektrolitów są kluczowe dla stabilizacji baterii litowo-jonowych, głównie poprzez zatrzymanie spadku ich pojemności, związanej z tworzeniem się warstwy pasywnej na powierzchni elektrody ujemnej.

W tej pracy kompleksowe obliczeniowo-eksperymentalne podejście do badań procesu formowania warstwy pasywnej jest przedstawione. Odpowiednie dostosowanie metodologii obliczeń pozwoliło na bardzo dokładne przewidywanie właściwości redukcyjnych oraz szybkie wyselekcjonowanie nowych możliwych struktur związków. Dodatkowo, obliczenia DFT zostały użyte do prześledzenia każdego etapu redukcji i pozwoliły na powiązanie struktury dodatków ze strukturą formowanej warstwy, przebadaną za pomocą spektroskopii XPS oraz FTIR. Pozytywny efekt dodatków został potwierdzony poprzez cyklowanie baterii, zarówno z elektrolitem komercyjnym, jak i z elektrolitem nowej generacji opartym na soli LiTDI.

Abstract of the thesis of Piotr Jankowski
„Computational and Experimental Studies on SEI-forming Electrolyte
Additives for Lithium-ion Batteries”

Energy storage is crucial for the ongoing revolution to make the world more sustainable by replacing fossil fuels as the main energy source by renewable energy sources. In this context, batteries are suitable energy storage and Li-ion batteries (LIBs) are being implemented in mobile electronic devices, electric vehicles, and grid buffers for wind power plants and solar cell farms. However, a further improvement of the stability and lifetime of LIBs is desired, especially for the two latter applications for reliability and sustainability. Electrolyte additives are pivotal for stabilization of LIBs, foremost by suppressing the capacity losses associated with the creation of a solid electrolyte interphase (SEI) layer at the negative electrode and increasing life-time.

In this thesis, complex computational-experimental studies of the SEI-forming additives are reported. A calibration of the computational methodology has allowed for very accurate prediction of the reduction behavior and fast *in silico* screening for possible new additives. Additionally, DFT calculations have been used to track every step of the reduction process and allows to connect the structure of SEI-formers and that of the SEI-layer, verified by surface-sensitive experiments (XPS, FT-IR spectroscopy) revealing the composition. The positive effect of the additives has finally been confirmed by battery cycling in a commercial electrolyte cell set-up as well as with an electrolyte based on LiTfO, where suppression of anion decomposition is truly crucial.