

ADREBO - Dodatki do baterii o wysokiej energii opartych na jonach dwuwartościowych metali i organicznej katodzie – ABSTRAKT POPULARNONAUKOWY

Celem projektu badawczego jest poprawa właściwości ogniw nowej generacji opartych na dwudodatnich jonach metali (Ca, Mg) z katodami organicznymi. Głównym problemem współczesnych ogniw opartych na dwudodatnich jonach metali jest słaba dysocjacja soli, która prowadzi do tworzenia par jonowych (o ładunku +1) i słabej desolwatacji jonów wielowartościowych. Po stronie anody obecne w roztworze pary jonowe prowadzą do obniżenia stabilności redukcyjnej anionów, co prowadzi do słabej wydajności osadzania/roztwarzania metalu i tworzenia blokującej warstwy pasywnej. Od strony katodowej para jonowa może działać jako nośniki ładunku, zmieniając mechanizm elektrochemiczny, co skutkuje niecałkowitym wykorzystaniem pojemności materiału katodowego.

W prezentowanej pracy będziemy zapobiegać tworzeniu się par jonowych i promować desolwatację jonów Mg i Ca poprzez zastosowanie dodatków do elektrolitów. W pierwszym etapie zostaną wykorzystane komercyjne dodatki do zbadania wpływu różnych grup funkcyjnych na pracę ogniwa. Uzyskane dane z testów dodatków handlowych w połączeniu z wynikami obliczeń teoretycznych posłużą do prowadzenia syntezy specjalnie zaprojektowanych dodatków. Główna hipoteza badawcza opiera się na badaniu nie tylko oddziaływań między dwuwartościowymi kationami a dodatkami chelatującymi, ale także oddziaływaniami między anionami soli a receptorem anionowym – dodatkami. Postulujemy, że obecność odpowiednio zaprojektowanych grup funkcyjnych w strukturze dodatków umożliwi częściowe unieruchomienie anionów i poprawę dysocjacji soli. Zmodyfikowane roztwory elektrolitów zostaną przetestowane z wykorzystaniem nowo opracowanych nanostrukturizowanych organicznych materiałów katodowych opartych na elektroaktywnej grupie benzochinonowej.

Szczegółowe cele projektu badawczego to:

- **Określenie najlepszych dodatków oddziałujących z kationami i anionami do dysocjacji par jonowych i desolwatacji wielowartościowych kationów w przygotowanych elektrolitach poprzez badania przesiewowe z wykorzystaniem obliczeń DFT i MD**
- **Synteza dodatków wytypowanych przez badania przesiewowe oparte na obliczeniach DFT i MD**
- **Wytypowanie najlepszych dodatków drogą eksperymentalną**
- **Przygotowanie katod organicznych o wysokiej energii i pojemności praktycznej ponad 300 mAh/g**
- **Osiągnięcie wydajności osadzania/roztwarzania metalu powyżej 99%**

Realizacja tych celów pozwoli nam wyjść poza obecny stan wiedzy na temat ogniw opartych na wielowartościowych metalach i stworzyć podstawę wiedzy o ogniwach metalowo-organicznych o wysokiej gęstości energii. Aby osiągnąć te ambitne cele, łączymy dwa doświadczone zespoły badawcze z dużym doświadczeniem w rozwoju ogniw opartych na wielowartościowych metalach (Dominko, NIC) oraz rozwoju elektrolitów i ich dodatków (Wieczorek, PW). W dłuższej perspektywie czasu rozwój tego typu ogniw mógłby zwiększyć konkurencyjność polskiego i słoweńskiego przemysłu i szeroko pojętego przemysłu UE, który nie ma dobrego dostępu do surowców stosowanych we współczesnych akumulatorach litowo-jonowych.

Nowatorski charakter tego projektu będzie możliwy dzięki połączeniu wyspecjalizowanej wiedzy obu partnerów w konsorcjach. Grupa z NIC specjalizuje się w badaniach ogniw opartych na metalach wielowartościowych i zastosowaniu katod organicznych, natomiast grupa z PW posiada duże doświadczenie w stosowaniu dodatków i modyfikacji elektrolitów.