

Projekt ma na celu opracowanie nowych dodatków do niewodnych elektrolitów litowych formuj cych stabiln warstw pasywn (Solid Electrolyte Interphase - SEI). Warstwa ta pełni bardzo wa n rol w ogniwach litowo-jonowych – zabezpiecza niestabilny termodynamicznie elektrolit przed kontaktem z elektrod ujemn . Jej wła ciwo ci odgrywaj istotn rol w sprawno ci baterii Li-ion – kluczowe parametry takie jak cyklowalno , samorozładowanie czy g sto mocy s cz ciowo determinowane przez natur SEI. W normalnych warunkach warstwa ta powstaje powoli w wyniku redukcji organicznych w glanów (w glanu etylenu, w glanu dimetylu) i składa si z w glanu litu oraz, cz ciowo, z oligomerycznych dianionów. Chc c polepszy stabilno baterii (wydłu y okres jej efektywnego działania), konieczne jest wytworzenie stabilnego SEI o optymalnych wła ciwo ciach takich jak szczelno , czy wysoka przewodno kationów litu. By tego dokona trzeba przej ze spontanicznego jej powstawania w wyniku redukcji rozpuszczalnika do procesu kontrolowanego jej formowania. Zrealizowa mo na to poprzez dodatek zwi zków, które z uwagi na wy szy potencjał redukcji, wcze niej ni rozpuszczalnik ulegn rozpadowi formuj c warstw pasywn . Optymalizuj c budow chemiczn dodatku mo na osi gn tak struktur warstwy, która b dzie zapewnia wysoki transport kationów oraz niski elektronów i cz steczek rozpuszczalnika.

Proces opracowywania nowych dodatków w przedstawionym projekcie zostanie oparty na przeprowadzonej analizie teoretycznej. Wyznaczone zostan relacje ł cz ce podstawowe parametry cz steczek dodatku (m.in. LUMO, moment dipolowy, twardo chemiczna) z obserwowanymi wła ciwo ciami makroskopowymi. Próby wygenerowania potencjału redukcji oraz produktów cie ki rozpadu pozwol z kolei bardziej zrozumie natur procesów zachodz cych na elektrodzie. Na podstawie tak zdobytej wiedzy mo liwe b dzie racjonalne zaproponowanie nowych struktur, które zostan poddane badaniem eksperymentalnym: sprawdzeniu ich parametrów elektrochemicznych i wytworzeniu warstw, oznaczeniu produktów rozpadu metodami spektroskopowymi oraz morfologii SEI za pomoc mikroskopii elektronowej. Wnioski z porównania obu podej pozwol na wprowadzenie zmian w utworzonym modelu, a przez bardziej trafne rekomendacje nowych zwi zków w kolejnych cyklach projektu.

Projekt skupiony jest na rozwoju cie ek projektowania nowych dodatków do elektrolitów litowych, które w prosty sposób ulegaj jedno-elektronowej redukcji. Efekty pracy zrealizowanej w ramach projektu, mog w znaczny sposób wpłyn na nasze ycie w przyszło ci, zdominowanej przez urz dzenie elektryczne (m.in. samochody elektryczne). Jednak zdobyta wiedza, zapisana w postaci uniwersalnego modelu, b dzie mogła zosta wykorzystana tak e w innych aspektach bada i nauki, gdzie zrozumienie zjawisk towarzyszc cych reakcji redukcji jest kluczowe.