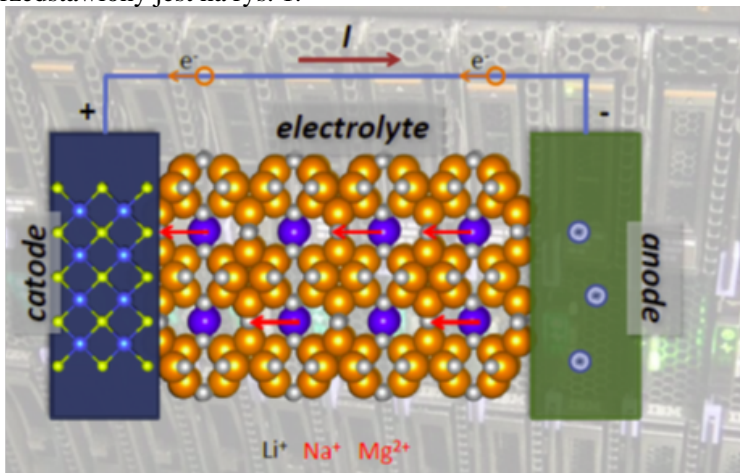


Wiele dyskusji toczonych w społeczeństwie oraz wiele badań poświęconych jest odnawialnym źródłom energii. Źródło odnawialne energii to takie którego szybkość zużycia jest porównywalna z produkcją wytwarzania tego źródła. Znanych i wykorzystywanych jest wiele odnawialnych źródeł energii, na przykład wiatr, promienie słoneczne, biomasa, energia geotermalna czy te pływy morskie. Cech wielu z nich jest okresowo występowania, za pozyskiwanie z nich energii zazwyczaj rozproszone jest na dużym obszarze. Szerokie zastosowanie takich odnawialnych źródeł energii wymaga opracowania strategii magazynowania energii takiej by zneutralizować okresowo występowanie energii. Jedną z takich metod jest elektrochemiczne magazynowanie energii elektrycznej w akumulatorach. Schemat współczesnego akumulatora przedstawiony jest na rys. 1.



**Rysunek 1.** Schemat współczesnego akumulatora. Elektrolit stały umożliwia transport jonów metalu (niebieskie kule) pomiędzy anodą i katodą. Poruszającymi się jonami może być lit, ale również sód bądź magnez.

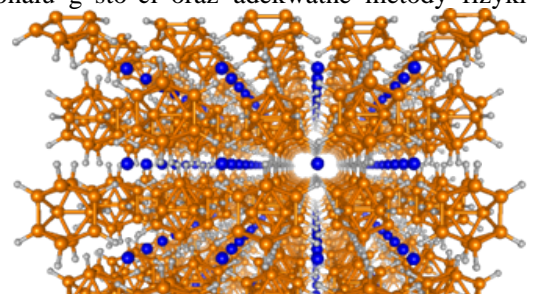
Zasada jego działania polega na transporcie jonów pomiędzy elektrodami (anodą i katodą). Podczas procesu rozładowywania jony przemieszczają się od anody do katody dając przy tym napięcie ogniwa. Wisko przewodzących urządzeń elektronicznych jest wyposażona w takie baterie litowe – litowe gdyż to jony litu są tymi które poruszają się pomiędzy elektrodami. Podczas gdy postęp w dziedzinie używanych materiałów elektrod umożliwiająca stała poprawa pojemności czy odwracalności ogniw litowych; stworzenie nowych lepszych elektrolitów jest bardzo istotne ze względu na bezpieczeństwo. A to może na spotkaniu na przykład kroku – uziemienie samolotów Dreamliner z powodu porażek elektrolitu w ogniwach litowych na pokładzie. Tego rodzaju awarie w dużej skali mogłyby być katastrofalne w skutkach. Bezpieczeństwo użytkowania ogniw może zostać znacząco poprawione poprzez zastosowanie stałego elektrolitu, jednak znalezienie

odpowiedniego materiału jest ogromnym wyzwaniem. Wymaga ono synergii różnych dyscyplin naukowych takich jak nauka o materiałach, fizyka, chemia, biologia i innych. Te komplikacje spowodowane są faktem, iż właściwością ciał stałych są zazwyczaj różne od cieczy. Jednym z wyjątków jest przewodnictwo jonowe: znane są ciała stałe (AgI) posiadające przewodnictwo jonów porównywalne z elektrolitami ciekłymi. Jednak w każdym typie ogniwa rodzaj aktywnych jonów jest określony (zazwyczaj są to jony litu, w przyszłości sodu lub magnezu) materiał musi być przewodzący dla konkretnego typu jonów. Musi też być izolatorem – nie przewodzi prądu elektrycznego w postaci elektronów. Takie wymagania stawiają dalsze przeszkody.

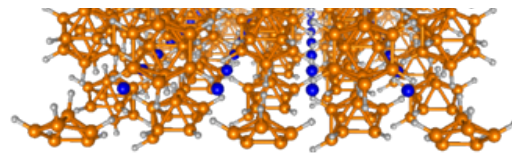
Ich pokonanie wymaga między innymi zaawansowanych badań podstawowych. Takie badania są przedmiotem niemiejszego projektu. Jego celem jest zrozumienie zjawiska transportu jonów w niedawno odkrytych materiałach superjonowych opartych o cło- dodekaborany. Te do egzotyczne materiały jak na przykład  $\text{Na}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$  wykazują przewodnictwo jonów porównywalne z tym w najlepszych przewodnikach sodu opartych na tlenku glinu. Sprawia to, iż są interesujące do zastosowania w akumulatorach kolejnych generacji. Wyznaczenie właściwości tej klasy materiałów wykonane zostanie przy użyciu metod obliczeniowych opartych na mechanice kwantowej. Szalony postęp jaki dokonał się w ostatnich latach w dziedzinie komputerów czy implementacji metod obliczeniowych fizyki ciała stałego umożliwia projektowanie nowych materiałów czy wyznaczanie właściwości tych bez wcześniejszego odniesienia do eksperymentu. Właściwościami można wyliczyć rozwiń odpowiednio równania Schrödingera (lub Diraca) dla układów wielu elektronów. Dalsze obliczenia ruchów atomów w skoczonych temperaturach możliwe są poprzez rozwiązanie adekwatnych równań ruchu w potencjale wyliczonym metodami kwantowymi. Nie jest to oczywiście procedura standardowa dla skomplikowanych układów. W tym projekcie tym się zajmujemy.

W dodekaboranach mechanizm przewodnictwa związany jest ze sprężeniem rotacyjno – translacyjnym ruchu jonów, jednak w skali atomowej mechanizm ten pozostaje niewyjaśniony. Niniejszy projekt jest poświęcony zrozumieniu zjawiska transportu jonów z cło – dodekaboranach i obejmuje takie problemy poznawcze jak termodynamiczna, elektrochemiczna stabilność tych związków; zrozumienie mechanizmu przewodnictwa kationów w skali atomowej, jak również możliwość modyfikacji tego przewodnictwa za pomocą podstawiania jonów. Dodekaborany mają skomplikowaną strukturę krystaliczną między innymi z powodu złożoności anionu  $\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ , patrz Rys. 2.

Obliczenia zostaną przeprowadzone w oparciu o metodę teorii funkcjonału gęstości oraz adekwatne metody fizyki statystycznej. Planowane obliczenia dadzą nam właściwości stanu podstawowego wybranych dodekaboranów (zawierających takie kationy jak  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ). Badania powinny dać nam również takie właściwości jak struktura elektronowa – przewodnik jonowy musi być izolatorem dla elektronów; stabilność – nie może się rozpaść pod wpływem napięcia lub umiarkowanych naprężeń. Badania dadzą nam również w naturę mechanizmu transportu jonów w skali atomowej. Dyfuzja jonów poprzez strukturę krystaliczną jest złożonym zjawiskiem (niebieskie sfery na Rys.



2), zrozumienie natury przewodnictwa w  $\text{Ag}_2\text{S}$  czy  $\text{PbF}_2$  zajęło ok. 100 lat. Stało się możliwe dopiero przy zastosowaniu metod obliczeniowych. Wyliczone zostały także własności spektroskopowe takie jak drgania ramanowskie i podczerwone, przesunięcia chemiczne. Rozmiar anionu dodekaboranowego sprawia, iż modele użyte do obliczeń zawierają muszą setki elektronów. Wpływ podstawników jonowych na parametry dyfuzji badany będzie dynamicznie molekularnie. Na każdym etapie projektu wyliczone parametry będą krytycznie porównywane z dostępnymi danymi eksperymentalnymi.



**Rysunek 2.** Widok struktury atomowej superjonowego przewodnika  $\text{Na}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ . Kationy Na to niebieskie kule, bor jest pomarańczowy, wodór szary.