

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Głównym celem projektu jest zbadanie procesów elektrochemicznej interkalacji jonów litu oraz sodu w strukturę materiałów elektrodowych ze stopów REM_2 i RE_5M_3 (RE = metale ziem rzadkich, szczególnie Sm, Gd; M = Sn, Pb i Sb), które wykazywałyby wyższą efektywność elektrochemiczną, dłuższy "czas życia", wyższą gęstość energii, korzystniejszą kinetykę procesów elektrodowych, mniejszą szkodliwość dla środowiska oraz niższe koszty produkcji, w porównaniu do stosowanych obecnie materiałów anodowych na bazie połączeń Li_xC_6 (w ogniwach litowo-jonowych).

Związki z metali o większym promieniu atomowym, które krystalizują w strukturach z dostatecznie dużymi lukami oktaedrycznymi w celu umieszczenia litu na wolnych stacjonarnych pozycjach bez poważnych zmian strukturalnych, są intensywnie badane. Ten projekt wyjaśnia warunki wstępne, które niezbędne dla umieszczenia Li lub Na w lukach wybranych systemów REM_2 i RE_5M_3 ze strukturami typu $ZrSi_2$, $ZrGa_2$, $LaSb_2$ oraz Mn_5Si_3 . Uważa się, że związki te powinny posiadać wystarczająco duży antypryzmat tetragonalny, a także puste przestrzenie oktaedryczne dla RE = metale ziem rzadkich, zwłaszcza Sm i Gd, oraz M = Sn, Pb lub Sb, aby umożliwić odwracalną interkalację/deinterkalację jonów Li lub Na. Kompleksowe badania strukturalne będą kompilować odpowiednie aspekty wypełniania litem lub sodem w strukturach antypryzmatów tetragonalnych oraz pustych luk oktaedrycznych oraz szczegóły dotyczące typu wiązania. Celem tego projektu jest stworzenie nowej klasy związków międzymetalicznych zawierających Li oraz Na przez ich odwracalną interkalację/deinterkalację do/z antypryzmatów tetragonalnych i luk oktaedrycznych, co znacznie poprawi stabilność cykliczną elektrod.