

Wzrastające zapotrzebowanie społeczne na urządzenia mobilne czy elektryczne pojazdy spowodowała szybki rozwój akumulatorów litowo-jonowych. W chwili obecnej nawet najlepsze takie urządzenia zawierają łatwopalne elektrolity tym samym sprawiając zagrożenie bezpieczeństwa ich użytkowania. Potencjalnie może to wpływać na ich użycie w domach celem magazynowania energii słonecznej. Dostępność metali używanych do produkcji ogniw litowo-jonowych tworzy kolejnych problem związany z bezpieczeństwem ich użytkowania.

To tylko wybrane powody, które wywołały szybki wzrost idei ulepszenia akumulatorów Li-jonowych jak na przykład koncepcje ogniw stałych czy tzw. alternatywnych urządzeń post-litowych. Te ostatnie muszą bazować na łatwo dostępnych pierwiastkach, być konkurencyjne z istniejącymi rozwiązaniami w kontekście gęstości energii czy bezpieczeństwa użytkowania. Pierwszym z kandydatów jest sód, który jest podobny do litu pod względem elektrochemicznym. Dokonano już wielu nowych odkryć w tym kierunku, np. nowe elektrolity stałe zostały odkryte. Niektóre z nich, oparte na borowodorach, przy udziale autora. Ogniwa stałe bazują na takich elektrolitach, wiąże się z mini nadzieje pokonania problemów z bezpieczeństwem oraz zwiększenia gęstości energii.

Uważa się, iż kolejnym krokiem w rozwoju akumulatorów będzie użycie jonów metali o walencyjności większej niż jeden, jak np. magnezu, wapnia czy aluminium. Duża dostępność tych pierwiastków oraz duża teoretyczna gęstość energii są atrakcyjne. Niestety większa gęstość ładunku związana z walencyjnością jonów nie pozwala w prosty czy łatwy sposób przenieść wiedzy zgromadzonej dla jednowartościowych metali. Jednym z najpoważniejszych ograniczeń w rozwoju akumulatorów z jonami wielowartościowymi jest brak odpowiednich elektrolitów. Ciekłe zawierające węglany tworzą warstwy blokujące elektrody, zaś te zawierające halogenki powodują korozję elektrod. Także w tej dziedzinie istnieje wielość nowych idei spośród których polegająca na użyciu elektrolitu stałego jest najbardziej przekonująca. Jeśli uda się odkryć taki materiał problemy z bezpieczeństwem i stabilnością wielowartościowych jonów w akumulatorach zostaną rozwiązane. Jednakże osiągnięcie tego celu ciągle wymaga zrozumienia procesów istotnych dla transportu jonów o dużej walencyjności w sieci krystalicznej. To właśnie jest przedmiotem niniejszego projektu.

Ciekawym jest, że przewodniki jonowe Mg bazujące na borowodorach połączonych z innymi cząsteczkami jak amoniak, etylenodiamina lub podobnymi są lepsze od tlenkowych czy siarczkowych. Istnieją już różne próby racjonalnego zrozumienia mobilności Mg w tych materiałach, niemniej brak systematycznego zrozumienia. Bez cienia takiego zrozumienia skazani jesteśmy na metodę prób i błędów zamiast racjonalnej drogi do stworzenia nowego materiału. Pragnąc zmienić tę sytuację w projekcie proponujemy: (i) analizę za pomocą metod kwantowo-mechanicznych korelacji czasowych i przestrzennych połączoną z próbą znalezienia powiązania pomiędzy lokalną strukturą i energią aktywacji dla Mg w  $Mg(BH_4)_2$  wraz z cząstkami eterów glikolowych, amoniaku, etylenodiaminy, borazanu i nowych cząstek w układzie ciała stałego. Badania te pozwolą na znalezienie wspólnych zależności związanych z mobilnością jonów  $Mg^{2+}$ . Optymalnie pozwoli to na znalezienie prostego deskryptora ułatwiającego badania eksperymentalne, nowego mechanizmu transportu jonów czy wreszcie stworzenie lepszego przewodnika jonów  $Mg^{2+}$ . (ii) obliczenie stabilności termodynamicznej, elektrochemicznej i mechanicznej powyższych przewodników jonowych. Każdy elektrolit stały musi być stabilny w kontakcie z anodą i katodą, musi być odporny na naprężenia mechaniczne powstałe w wyniku tworzenia powłoki metalicznej, zmian objętości elektrod czy fluktuacji temperatury. W chwili dobrego zrozumienia powyższych własności badania nasze skupią się na jonach Ca i potencjalnie Al. Pionierskie próby zrozumienia transportu  $Mg^{2+}$  otrzymane w tym projekcie mogą przyczynić się do stworzenia nowych akumulatorów.

Badania zostaną przeprowadzone w Zakładzie Badań Strukturalnych IFJ-PAN na naszych własnych serwerach obliczeniowych uzupełnionych superkomputerami. Jako metody używać będziemy teorii funkcjonału gęstości co spowodowane jest nieznanymi procesami przekazu ładunku elektrycznego, polaryzacji i innymi nie znanymi procesami towarzyszącymi dyfuzji jonów wielowartościowych w sieci krystalicznej.