

08.03.2024

dr inż. Michał Rybski

Katedra Fizyki Materii Skondensowanej, Wydział Fizyki i Informatyki
Stosowanej AGH

Tytuł wystąpienia: "**Badania teoretyczne struktury elektronowej i zjawisk elektrochemicznych w wybranych materiałach katodowych baterii jonowych**"

Streszczenie:

Obserwowany przez ostatnie lata dynamiczny wzrost rynku akumulatorów litowo-jonowych (Li-ion) oraz sodowo-jonowych (Na-ion) związany jest z globalną transformacją energetyczną w kierunku odnawialnych źródeł energii oraz upowszechnieniem się pojazdów elektrycznych, a same akumulatory elektryczne stały się przedmiotem intensywnych badań naukowych będąc w centrum zainteresowania wielu grup eksperymentalnych i teoretycznych na całym świecie. Należy podkreślić, że nie uzyska się bardziej efektywnego procesu wytwarzania i eksploatacji baterii Li-ion i Na-ion bez głębszego zrozumienia zjawisk zachodzących w materiałach katodowych, gdyż to właśnie one stanowią najpoważniejszą barierę w poprawie parametrów użytkowych ogniw litowych/sodowych, takie jak gęstość energii i mocy, stabilność, właściwości transportowe. Nowoczesne projektowanie potencjalnie przydatnych materiałów katodowych w systemach bateryjnych wymaga interdyscyplinarnego podejścia z zakresu chemii, fizyki ciała stałego oraz inżynierii materiałowej. Jak się okazuje, znajomość kwantowego mechanizmu zjawisk fizycznych zachodzących wewnątrz baterii jest kluczowa przy próbie zrozumienia i udoskonalenia działania tych urządzeń, a obliczenia struktury elektronowej umożliwiają nie tylko teoretyczną interpretację obserwowanych przebiegów krzywych ładowania/rozładowywania ogniwa, ale też mogą ukierunkowywać dalsze badania eksperymentalne poprzez prognozowanie nowych rozwiązań materiałowych. Analiza wybranych systemów bateryjnych została przeprowadzona w oparciu o obliczenia struktury elektronowej przy użyciu metody Korringi-Kohna-Rostokera (KKR). Z uwagi na to, że rzeczywiste układy często zawierają różnego rodzaju defekty (wakansje na pozycjach Li/Na i O oraz nieporządek w podsieci metali przejściowych), które mogą znacząco wpływać na ich właściwości elektrochemiczne. Nieporządek chemiczny oraz obecność w strukturze krystalicznej wakansji zostały uwzględnione w obliczeniach struktury elektronowej w ramach przybliżenia koherentnego potencjału CPA (Coherent Potential Approximation). Uzyskane wyniki w postaci

elektronowych gęstości stanów materiałów katodowych baterii Li-ion $\text{Li}_x\text{Ni}_{0.9-y}\text{Co}_y\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ oraz Na-ion $\text{NaFe}_{0.3}\text{Co}_{0.7}\text{O}_2$, $\text{Na}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Mn}_y\text{O}_2$ oraz $\text{Na}_{0.67}\text{Mg}_{1/3}\text{Mn}_{2/3}\text{O}_2$ posłużyły jako narzędzie do interpretacji wyników pomiaru parametrów elektrochemicznych baterii jonowych, w szczególności charakteru krzywej rozładowania, stabilności chemicznej katody oraz właściwości transportowych.