Съвместна интеркалация на алкални и алкалоземни йони в дву- и тримерни структури: експериментално и теоретично моделиране

Базова организация: Институт по обща и неорганична химия
проф. Радостина Стоянова

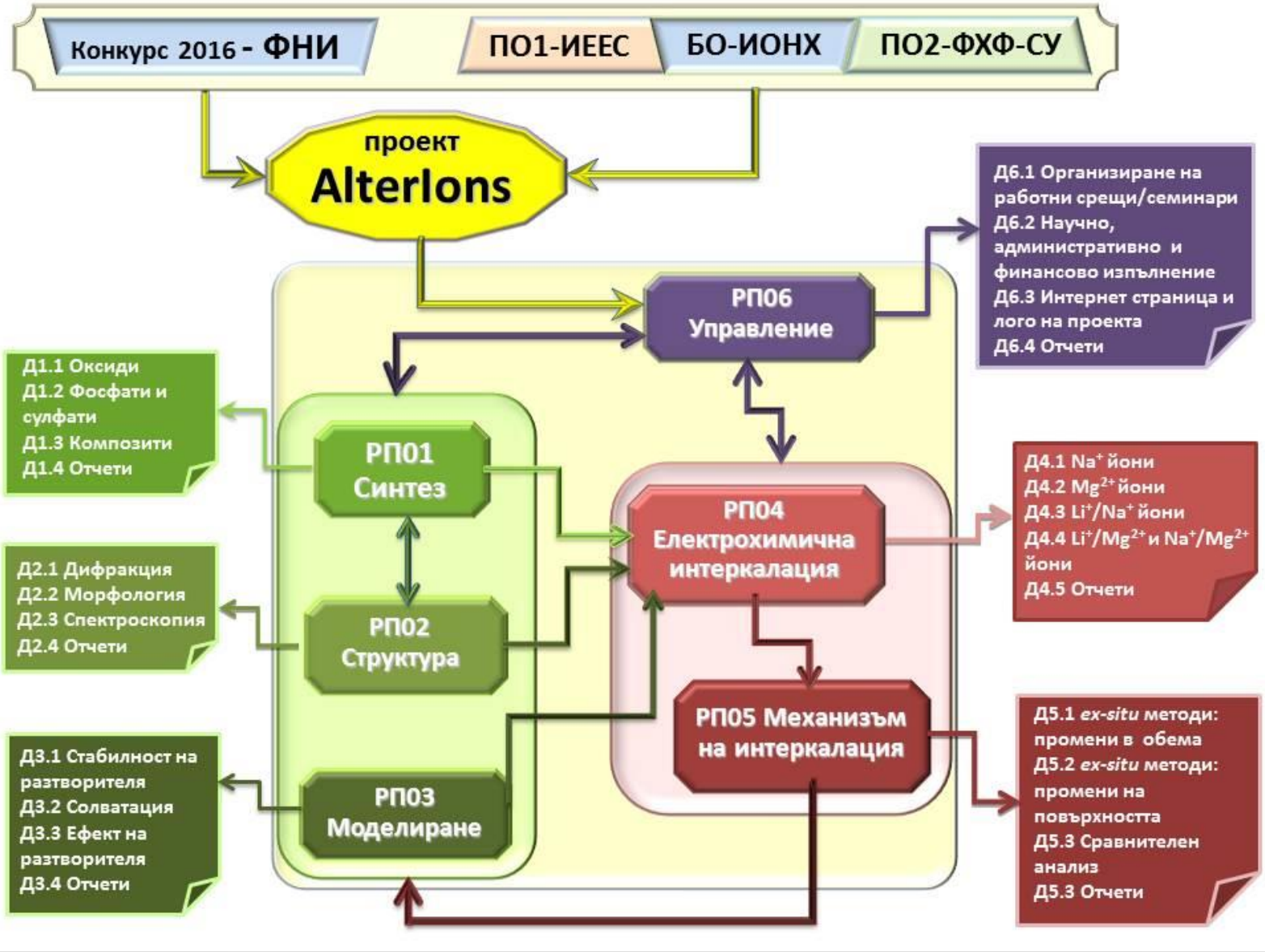
Партньори: Институт по електрохимия и енергийни системи
проф. Антония Стоянова



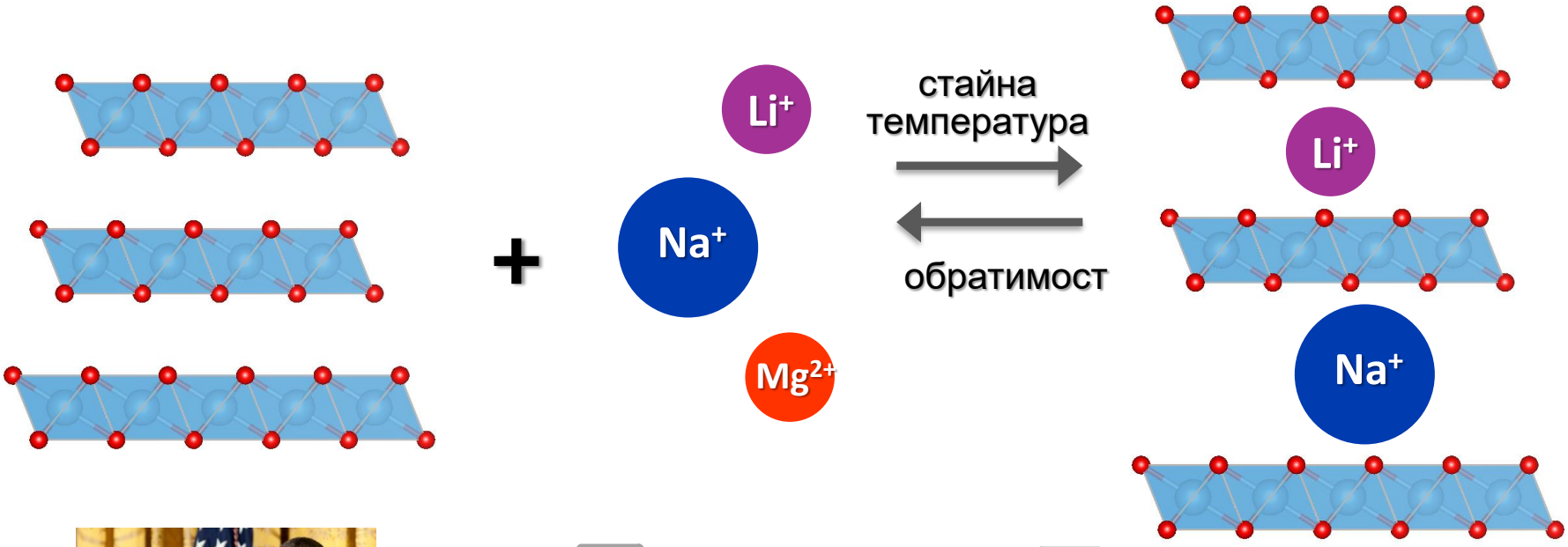
СУ- Факултет по химия и фармация
проф. Аля Таджер



Структура на проекта

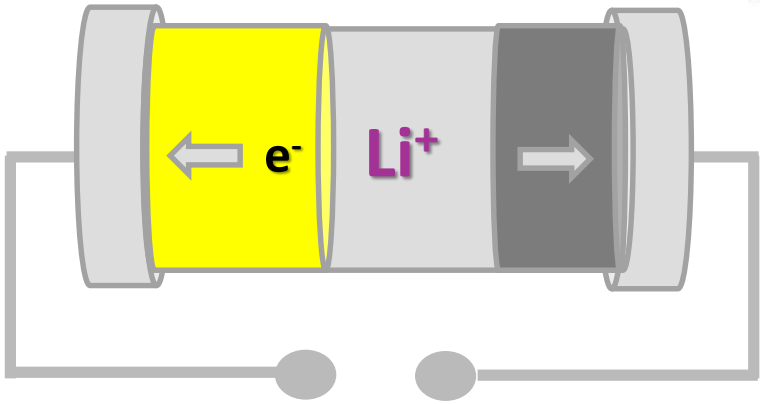


Реакции на взаимодействие на йони с твърди вещества



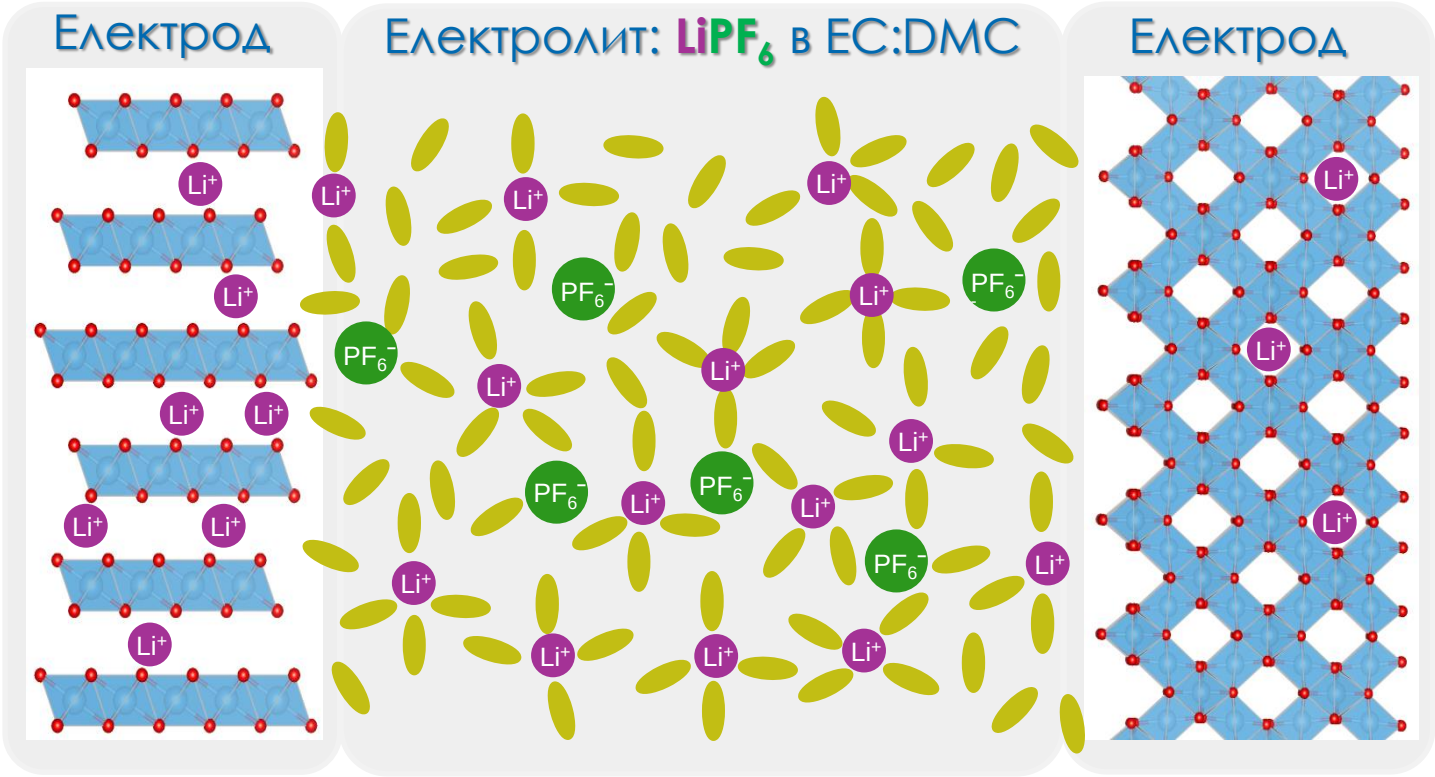


John B. Goodenough
22.07.1922
University of Texas at Austin
"I use chemistry to answer physics questions."



Литиево-йонни батерии (1991)

Химическа същност на литиево-йонните батерии



- цена / безопасност / безвредност ???

Sony (1991)
150-190 Wh/kg
> $2300 /kWh

→

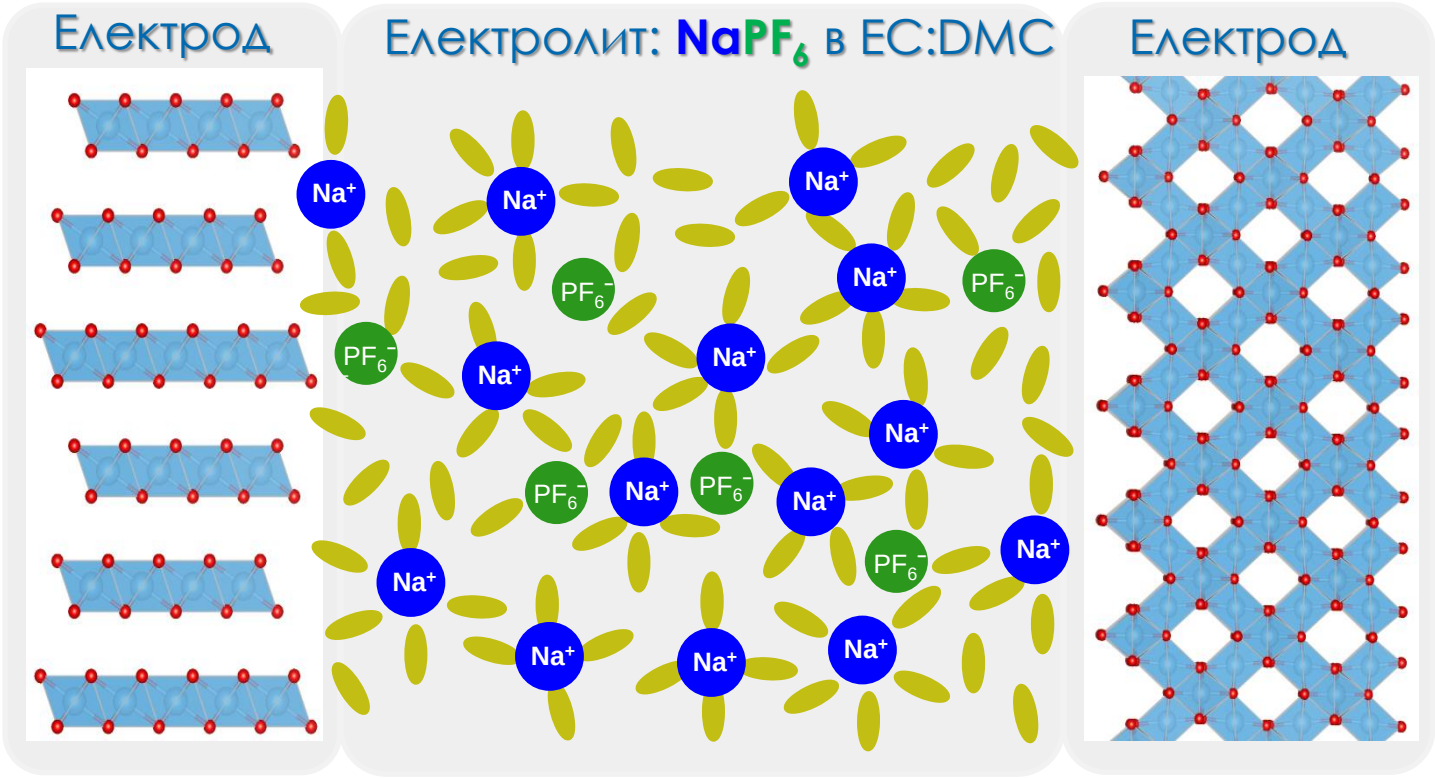
Cera:
~ 250 Wh/kg
≥ $250 / кWh

→

Цел:
350 Wh/kg
$125–$150 / кWh

Алтернатива на литиево-йонните батерии ?

Натриево-йонна батерия

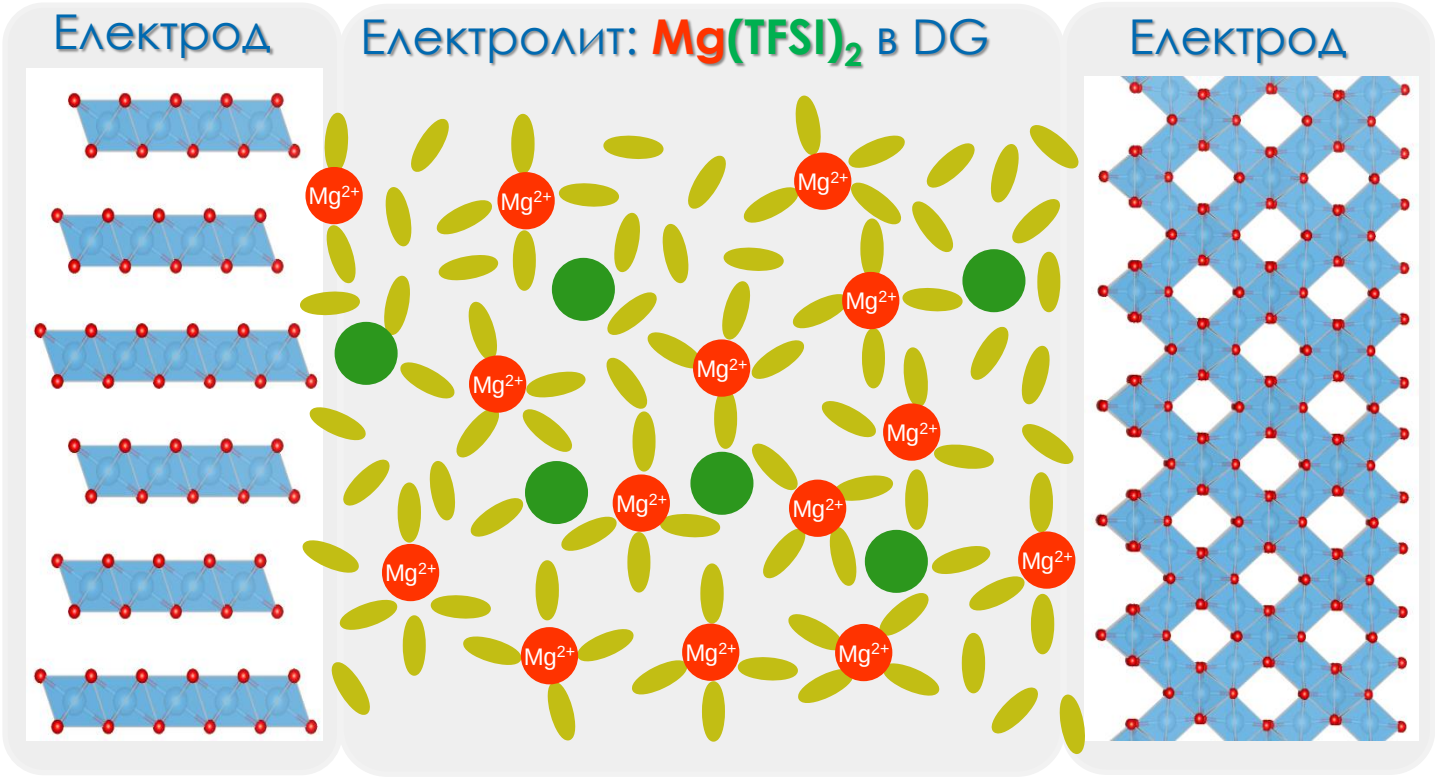


+ цена / безопасност / безвредност

- *МОЩНОСТ ?*

Алтернатива на литиево-йонните батерии ?

Магнезиево-йонна батерия

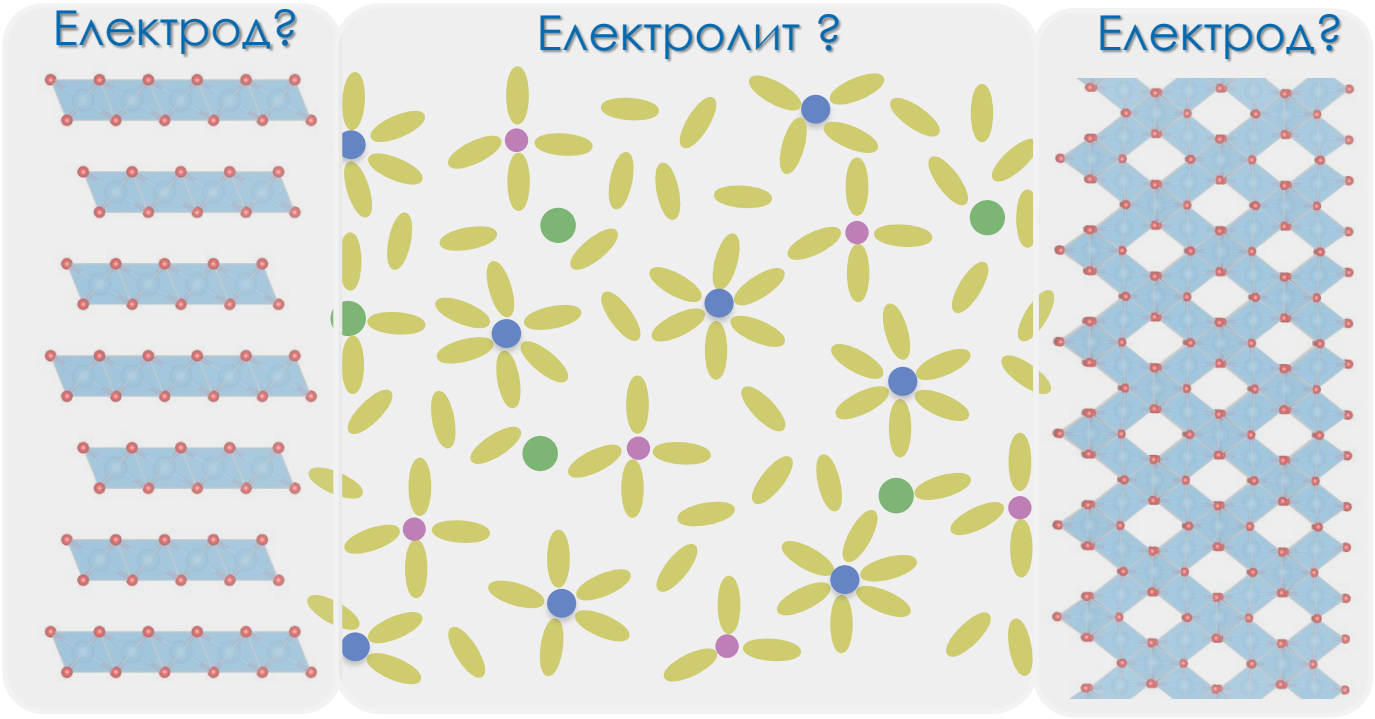


+ цена / безопасност / безвредност

- *скорост на разряд и заряд?*

Алтернатива на литиево-йонните батерии ?

AlterIons : хибридни метално-йонни батерии!

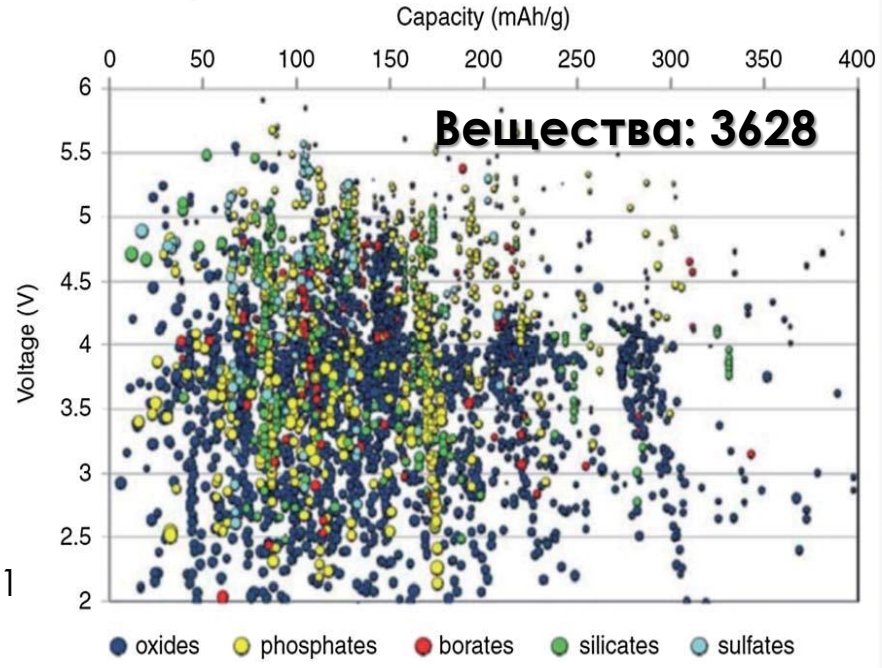


- Подбор на електродни материали;
- Реакции в електролитния разтвор;
- Модели електрохимични клетки.

Подбор на електродни материали ?

- « опит-грешка » - литиеви материали;
- **геном на материалите:**

https://materialsproject.org/



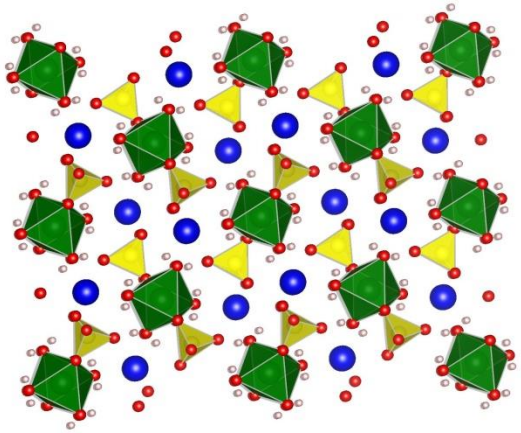
G. Ceder, MRS Bull., 2010, 35, 693–701

- **вдъхновени от минералите:**

  - повече от **4000** идентифицирани минерали;
  - минерали със специфична структура и състав.

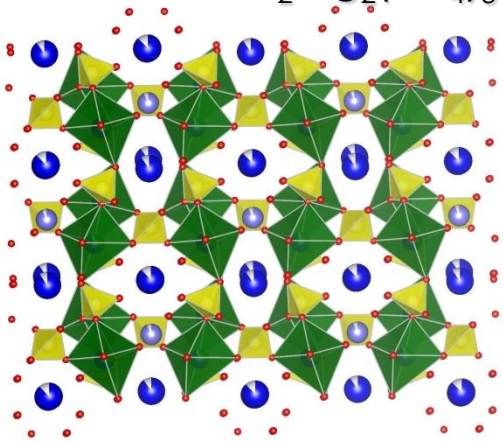
Идентифициране на нови електродни материали: сулфати

blödite $Na_2Mg(SO_4)_2.4H_2O$



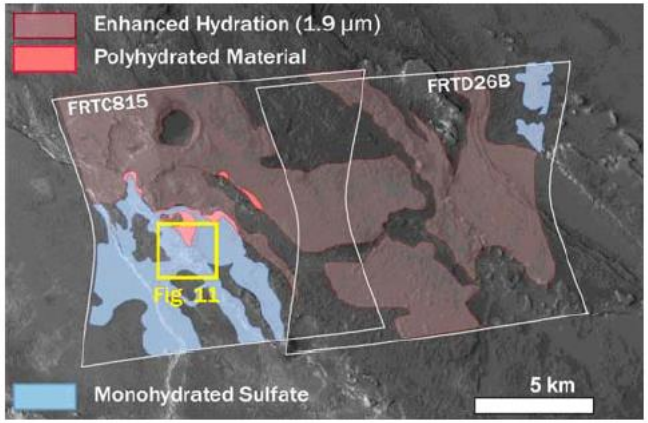
H_2O

alluaudite $Na_2Mg_2(SO_4)_3$

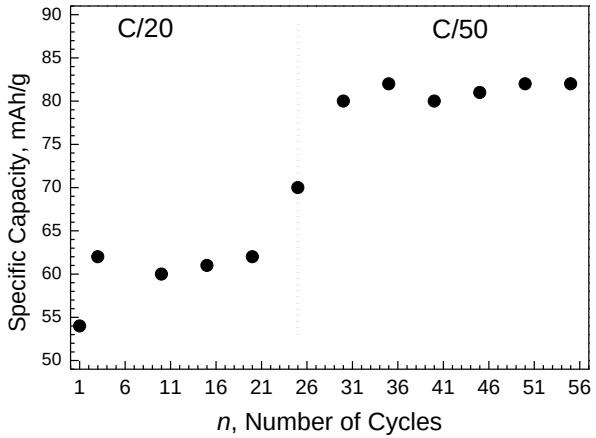


M = Mn, Co, Ni

Hydrated sulfates in the sedimentary deposits of Aram Chaos, Mars



K. Lichtenberg et al., J. Geophys. Res. 115 (2010) E00D17



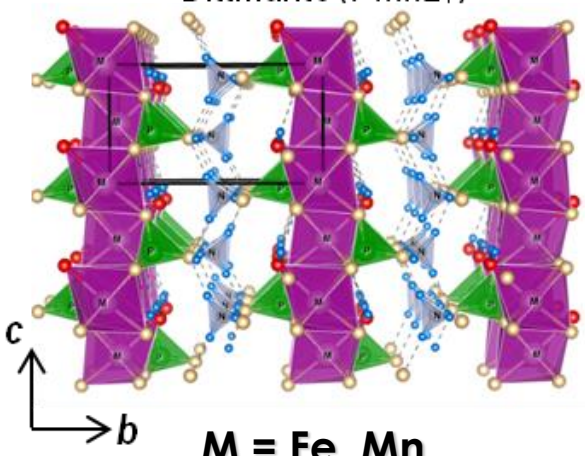


D. Marinova *et al.*, Phys.Chem.Chem.Phys. 20 (2018) 12755-12766.

D. Marinova *et al.*, Chem. Commun. 54 (2018) 5466-5469.

Идентифициране на нови електродни материали: фосфати

$NH_4MPO_4.H_2O$
Dittmarite ($Pmn2_1$)

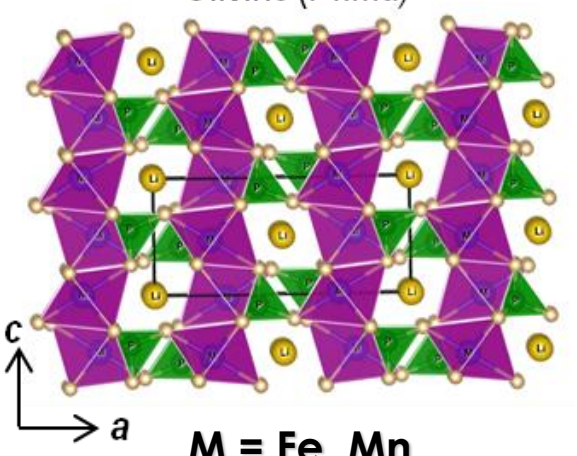


M = Fe, Mn

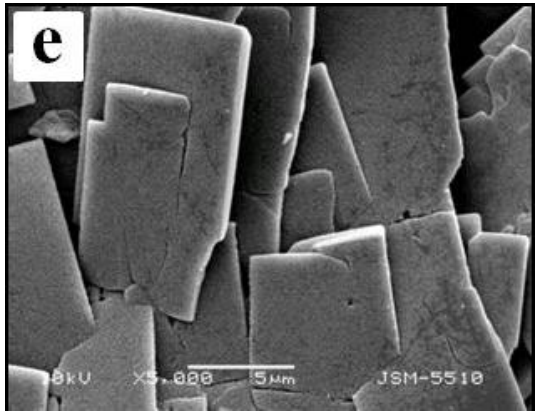
обмен на NH_4^+ с Li^+ или Na^+

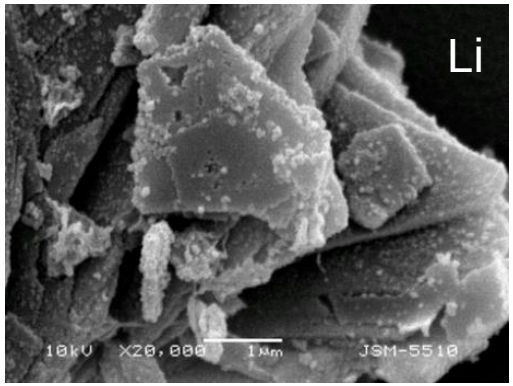
H_2O

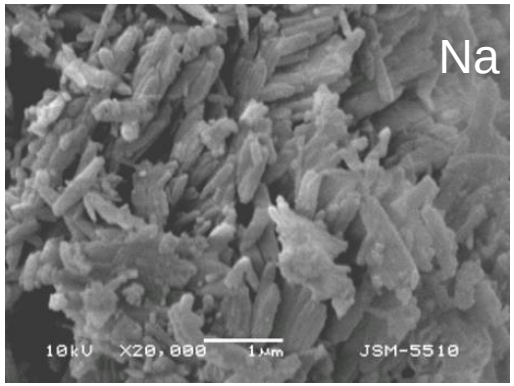
$Li/NaMPO_4$
Olivine ($Pnma$)



M = Fe, Mn



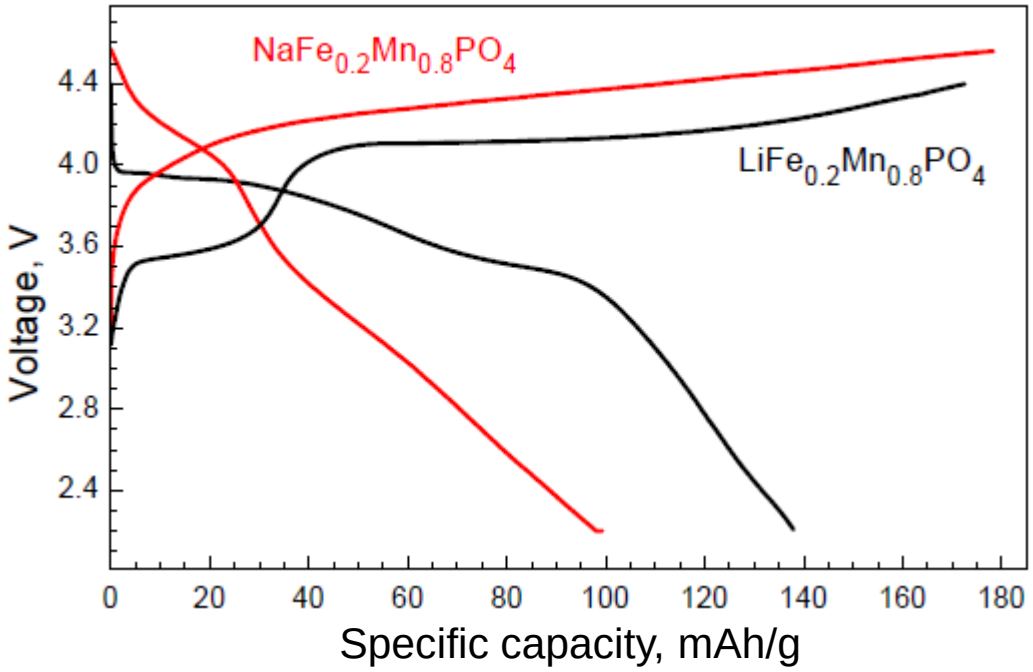




Идентифициране на нови електродни материали: фосфати

Модела електрохимична клетка:
Li | $LiPF_6$ (EC:DMC) | Li/$NaMnPO_4$







В. Колева



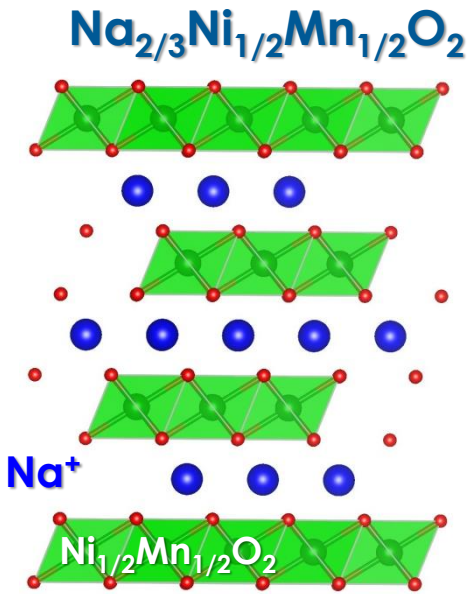
Т. Бояджиева

$LiFePO_4$



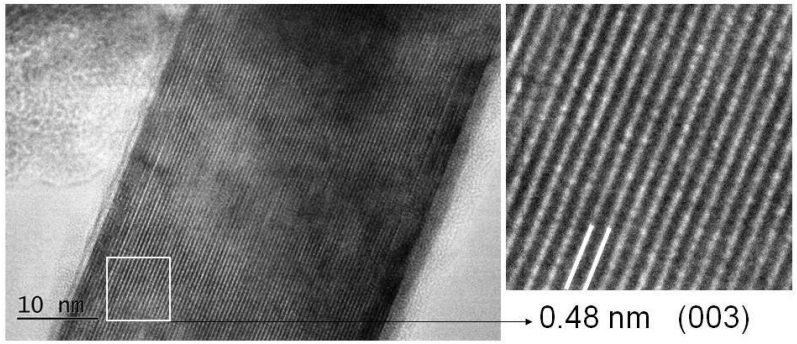
V. Koleva et al., Crystal Growth & Design, (2019), под рецензия

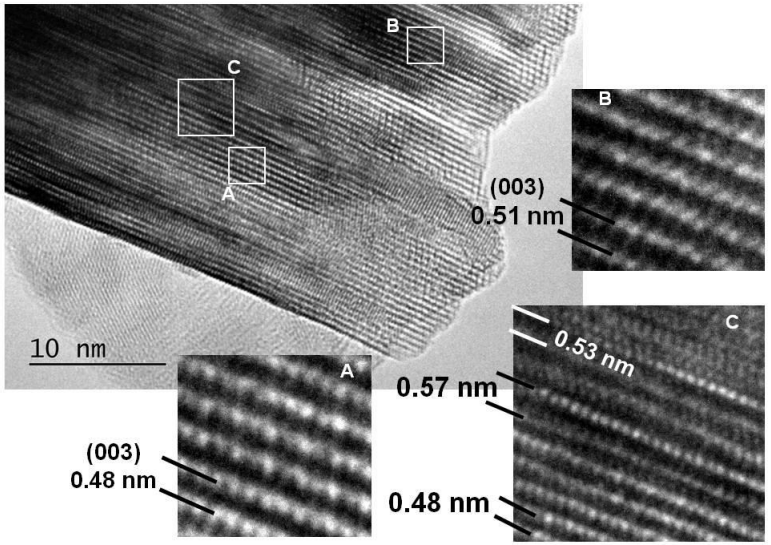
Електродни материали взаимодействащи едновременно с няколко вида йони

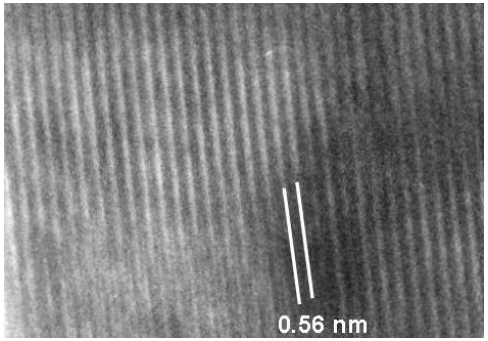


Li^+

Li^+, Na^+









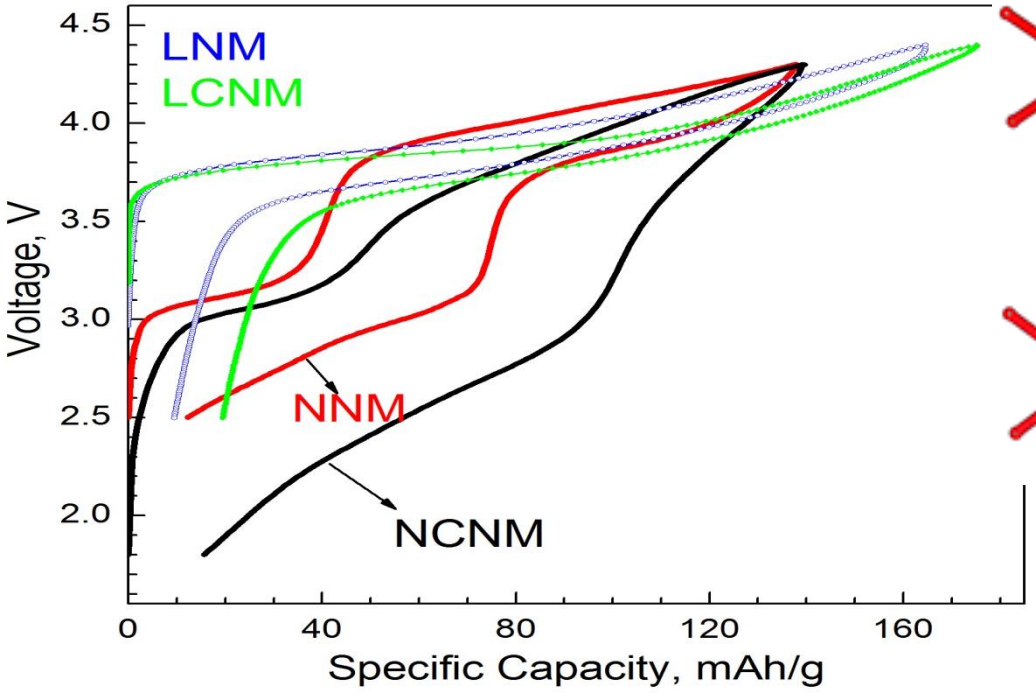
Д. Нихтянова

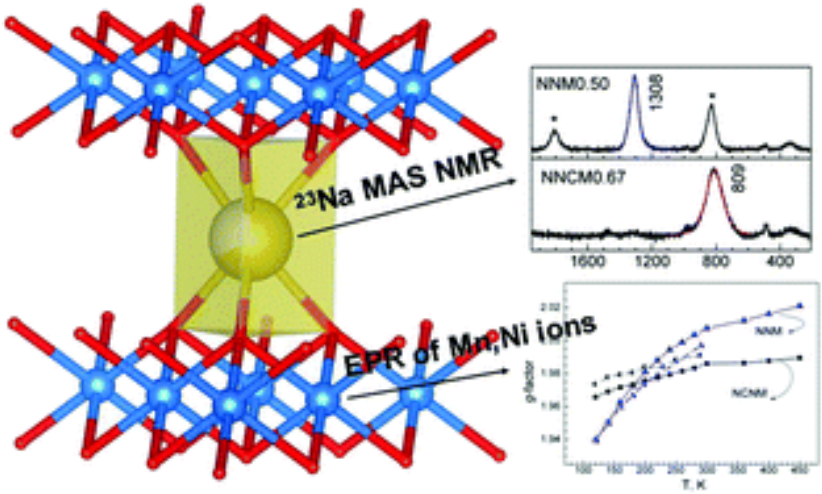
Литиеви спрямо натриеви електроди

$LiNi_{1/2}Mn_{1/2}O_2$
$LiCo_{1/3}Ni_{1/3}Mn_{1/3}O_2$

/

$Na_xNi_{1/2}Mn_{1/2}O_2$
$Na_xCo_{1/3}Ni_{1/3}Mn_{1/3}O_2$







Е. Жечева



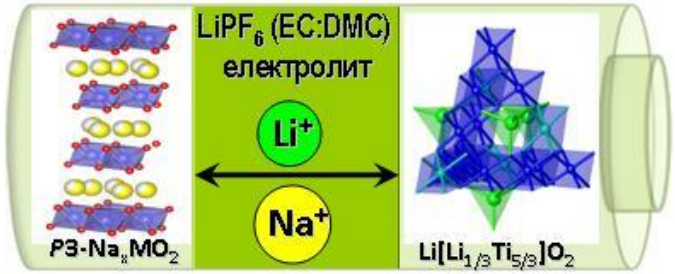
Р. Кукева

Хибридни йонни батерии



М. Калъпсъзова

M. Kalapsazova *et al., Phys.Chem.Chem.Phys.* 19 (2017), 27065-27073



R. Stoyanova *et al., Chem. Record* 19 (2019) 474-501

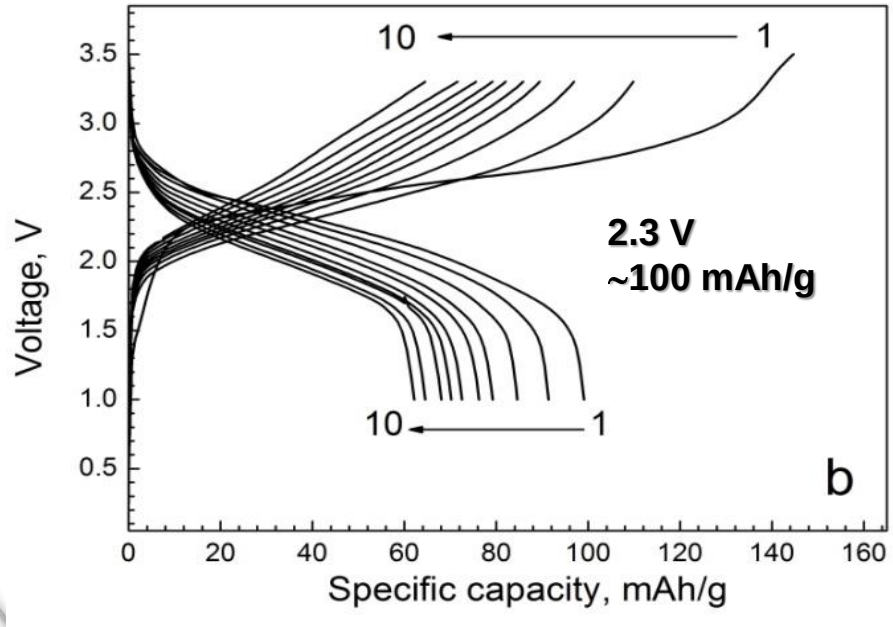


С. Велева

S. Veleva *et al., submitted*

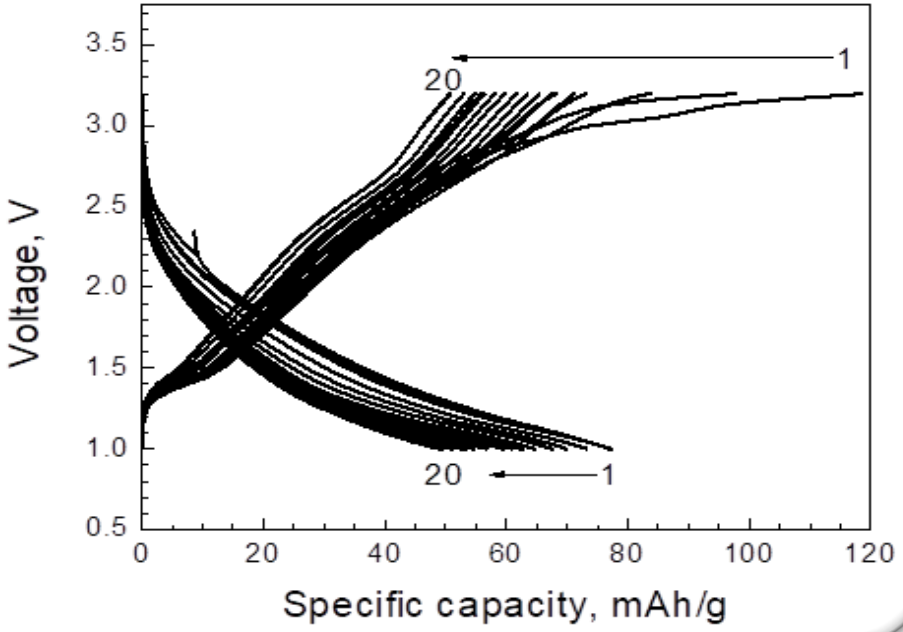
Li^+/ Na^+

$Li[Li_{1/3}Ti_{5/3}]O_4$ | $LiPF_6$ (EC:DMC) | Na_xMO_2

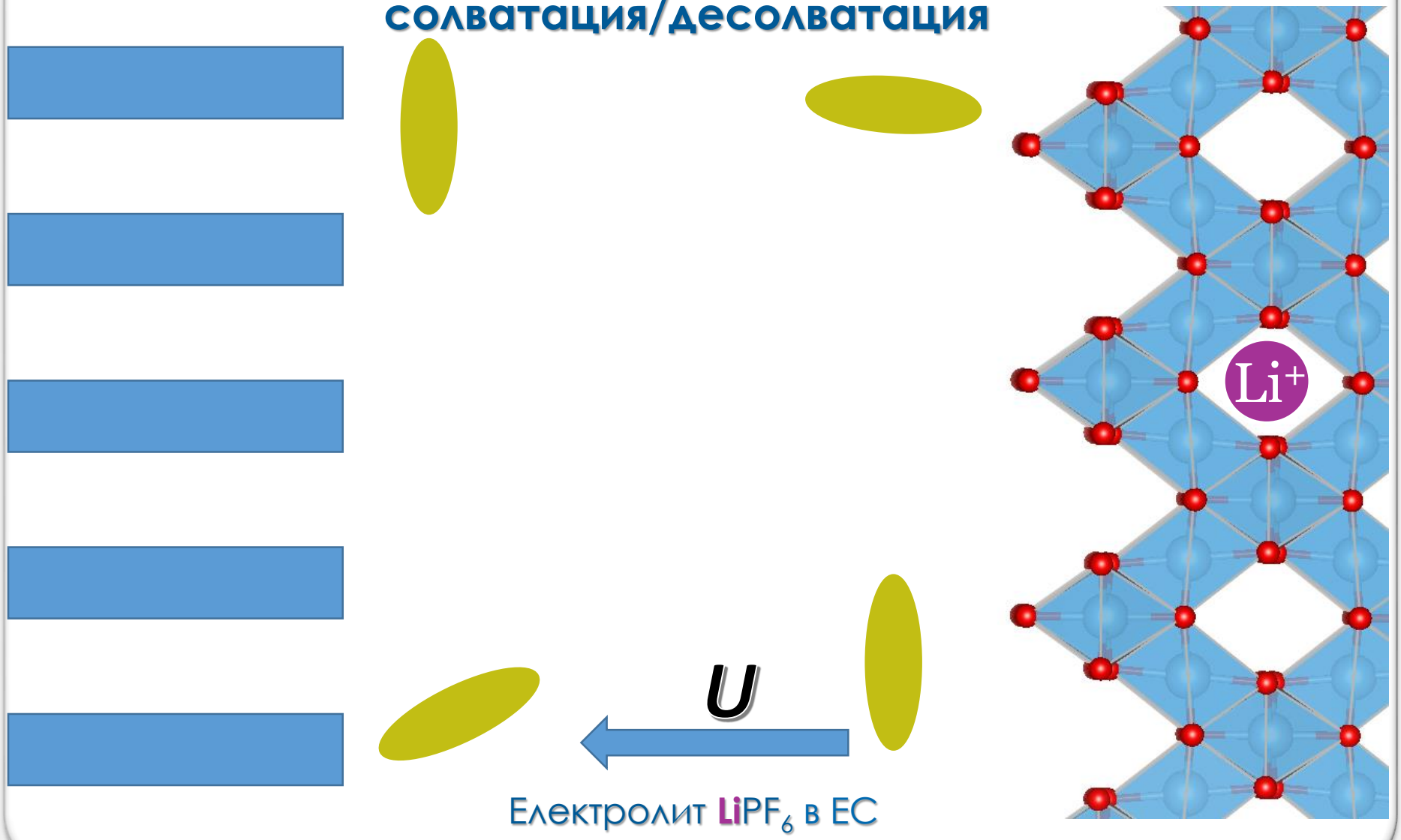


Li^+ / Mg^{2+}

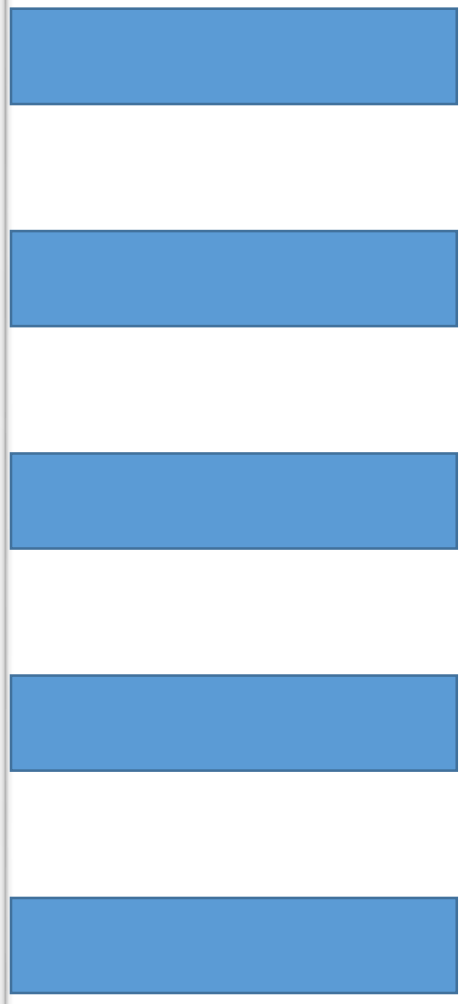
$Li[Li_{1/3}Ti_{5/3}]O_4$ | $LiPF_6$ (EC:DMC) | $MgMn_2O_4$

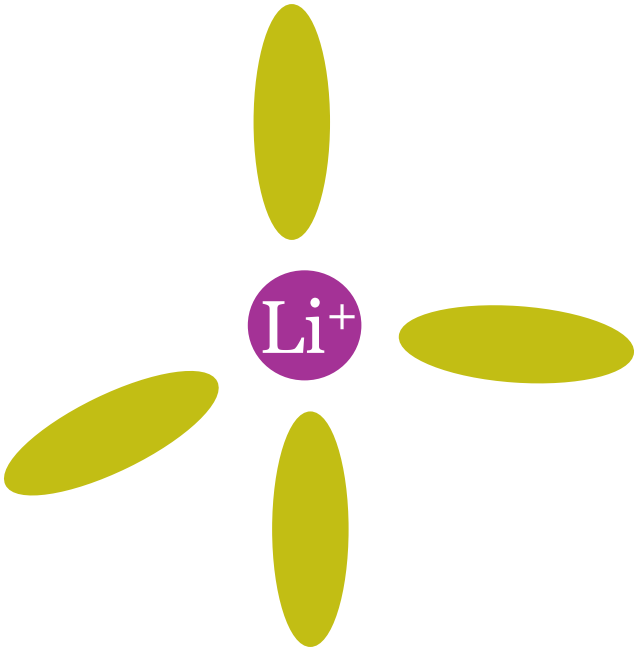


Теоретично моделиране на реакции на солватация/десолватация

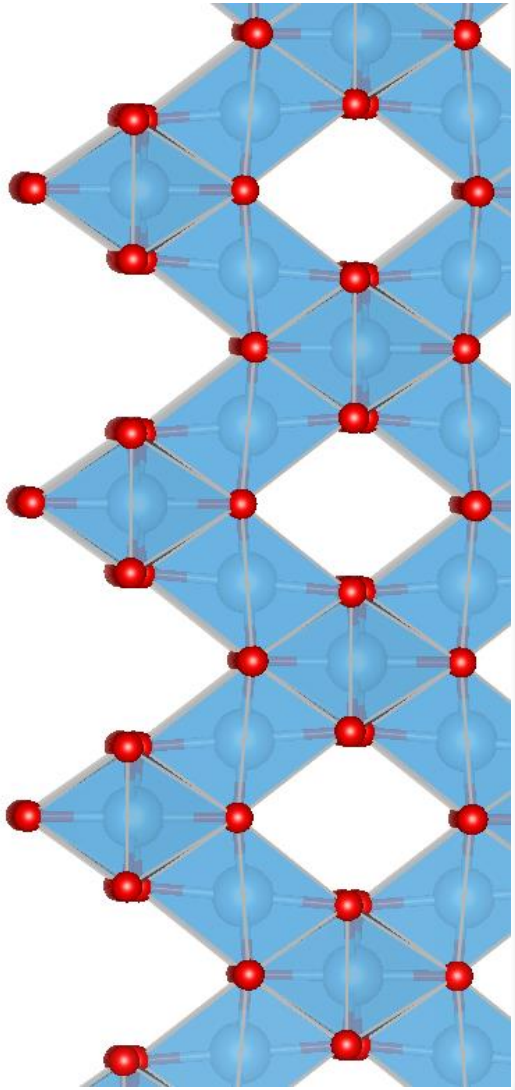


Теоретично моделиране на реакции на солватация/десолватация

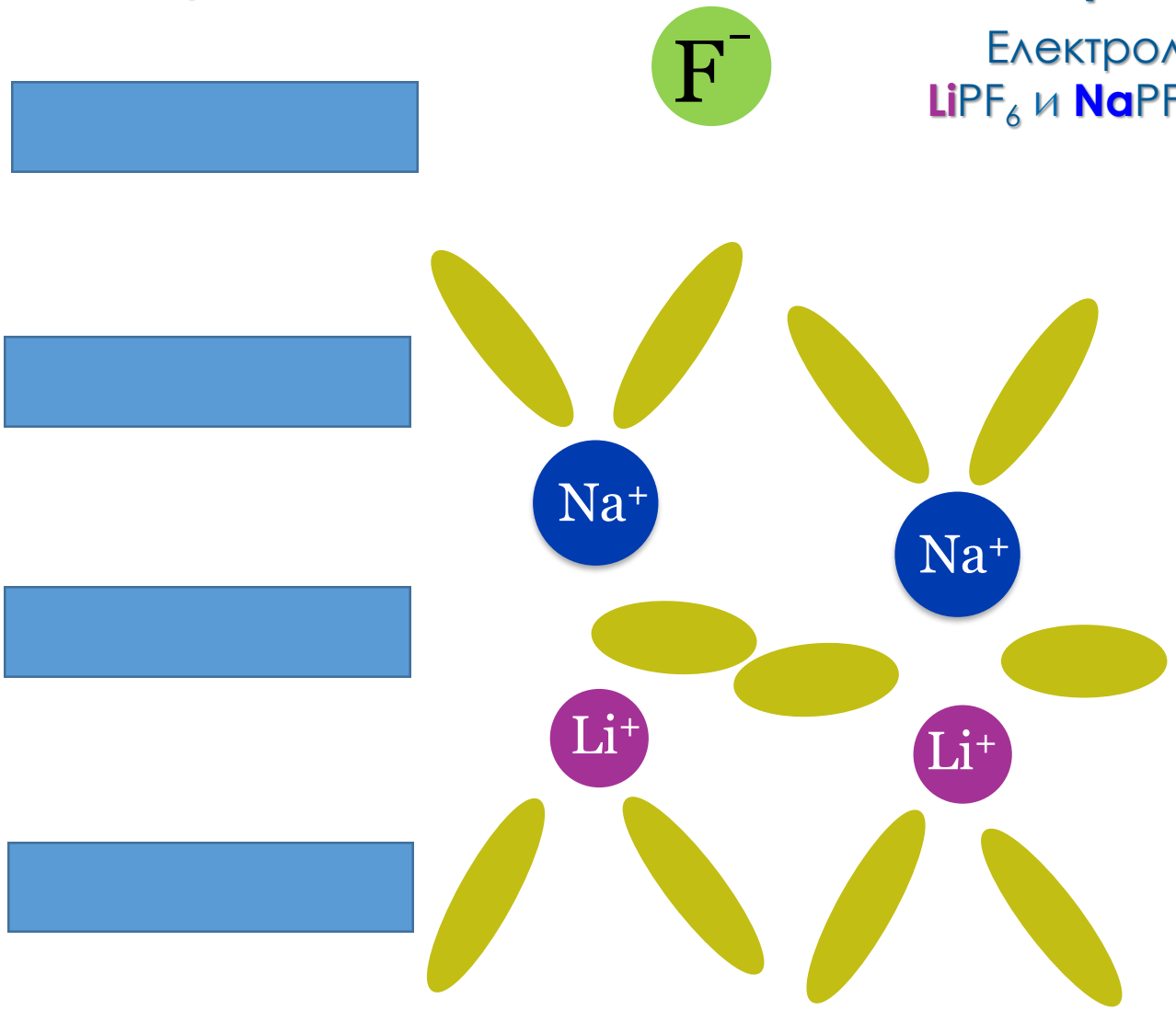






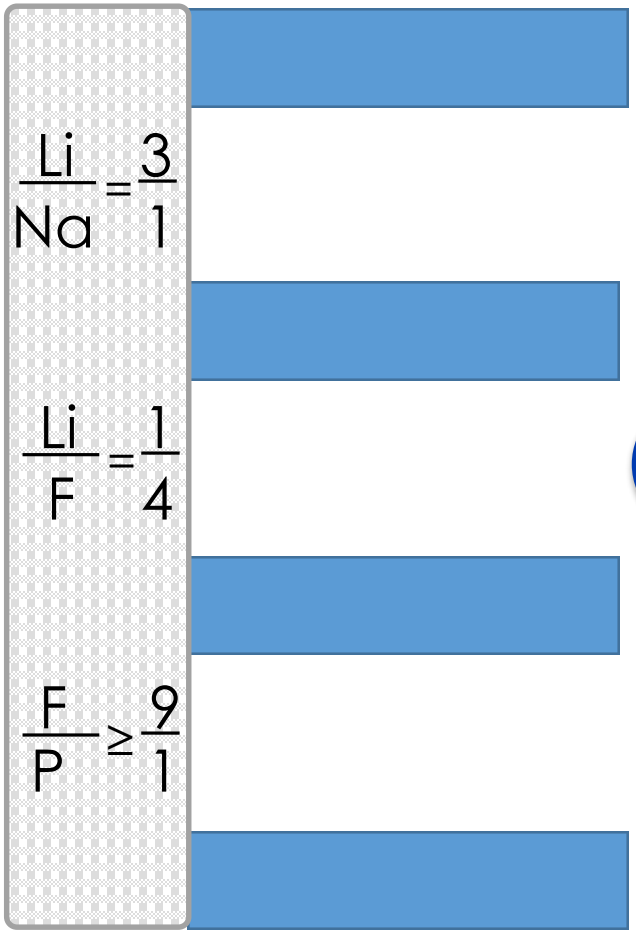


Солватация/десолватация в смесени електролити

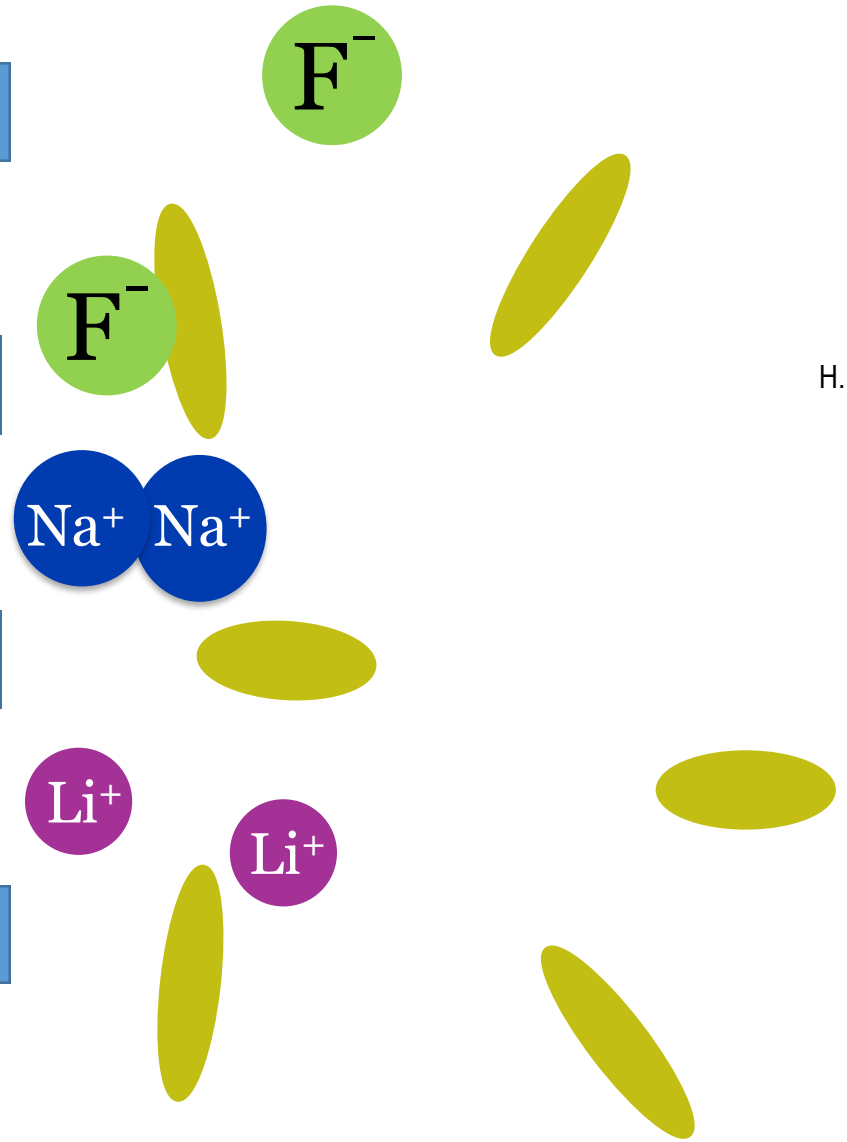


Alterions

Рентгенова фотоелектронна спектроскопия



< 5 nm

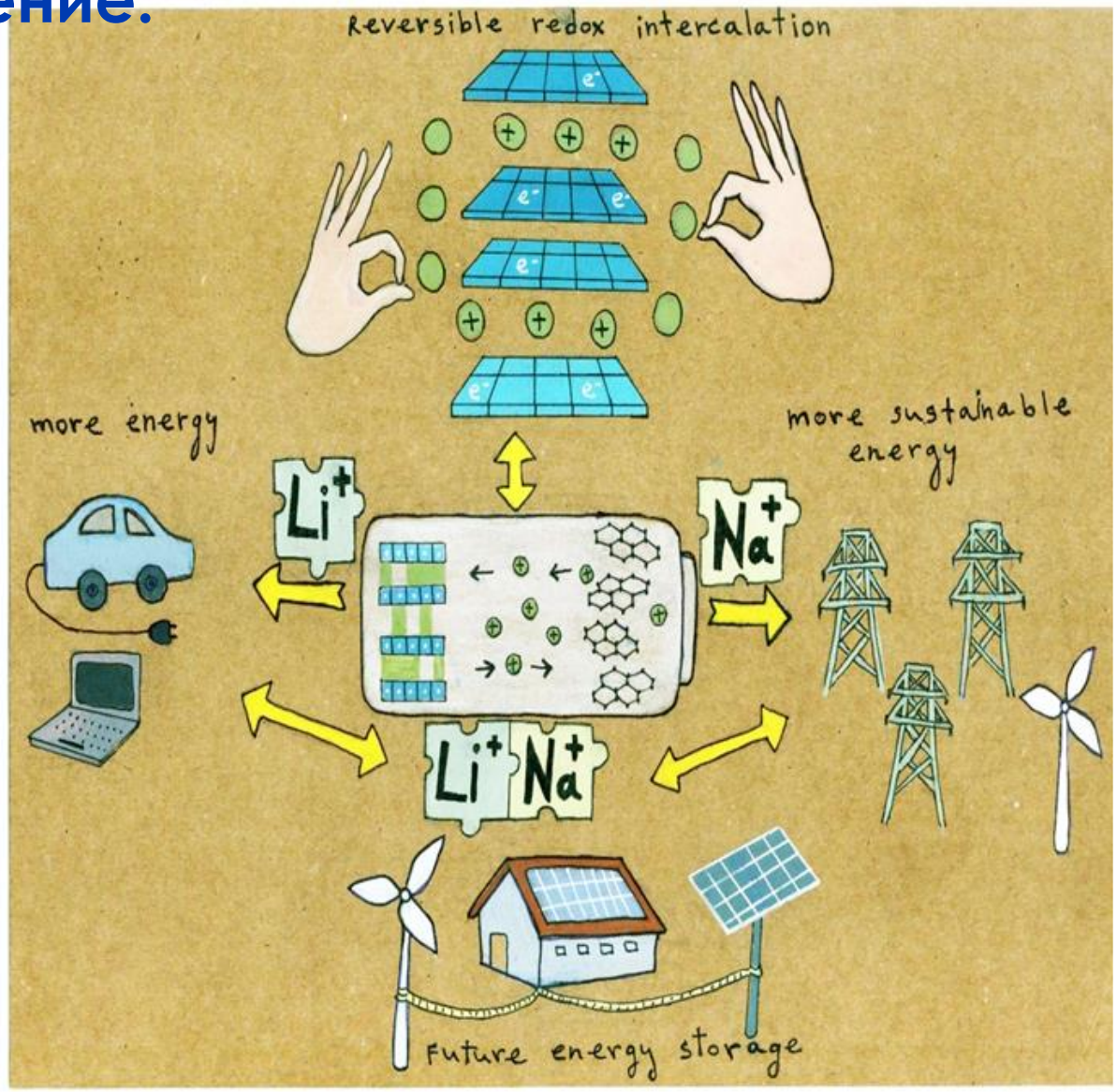




Х. Рашеев

H. Rasheev, submitted

Заключение:



Елена Стумбова