

W ciągu ostatnich dwu dekad baterie litowe odniosły rynkowy sukces stając się zaawansowanym technologicznie produktem i znajdując liczne zastosowania. Rozwój urządzeń do przechowywania energii jest jednym z kluczowych elementów dla zrównoważonego rozwoju energetyki. Rosnące zapotrzebowanie na ogniwa jonowe, zwłaszcza w świetle wzrastającego popytu na samochody z napędem elektrycznym, stwarza obawy o dostępność surowców. Zasoby soli litu są rozmieszczone nierównomiernie a większość komercyjnie wykorzystywanych złóż znajduje się w Ameryce Południowej. W początku XXI wieku nastąpił znaczny wzrost cen związków litu. Z drugiej strony, sód i magnez są jednymi z pierwiastków najbardziej rozpowszechnionych w skorupie ziemskiej i praktycznie wszędzie są tanio dostępne. Spowodowało to wzrost zainteresowania ogniwami sodowymi lub magnezowymi. Nielitowe baterie jawią się jako jeden z możliwych sposobów stawienia czoła wyzwaniu rosnącego popytu w świecie ograniczonych zasobów i mają potencjał by stać się innowacyjną technologią przyszłości.

Metody chemii obliczeniowej były i są szeroko stosowane do badania materii na poziomie atomowym i przyczyniają się do sukcesu badań doświadczalnych przez lepsze zrozumienie oraz interpretację fizycznych przyczyn obserwowanych zjawisk. Celem modelowania jest nie tylko wyjaśnienie, ale także przewidywanie eksperymentu.

Rozwojowi ogniw litowo-jonowych także towarzyszyło wsparcie ze strony chemii teoretycznej. Mimo iż badania doświadczalne nad bateriami nielitowymi rozwijają się bardzo dynamicznie, jedynie stosunkowo niewiele prac obliczeniowych jest poświęconych temu zagadnieniu. Niniejszy projekt ma wnieść wkład w rozwój nielitowych źródeł zasilania poprzez kompleksowe badania elektrolitów wykorzystywanych w tych urządzeniach.

Elektrolit przewodzący jony jest jednym z podstawowych elementów ogniwa i typowo składa się z soli metalu rozpuszczonej w rozpuszczalniku. W projekcie planujemy zbadanie elektrolitów opartych na solach sodu, magnezu i cynku w rozpuszczalnikach organicznych, cieczach jonowych i polimerach. Obliczenia kwantowochemiczne zostaną wykorzystane do uzyskania danych o strukturze i sile oddziaływań w małych agregatach jon-rozpuszczalnik. Symulacje dynamiki molekularnej dostarczą informacji o strukturze makroskopowego elektrolitu i jego przewodności. Wyniki będą analizowane w celu znalezienia zależności pomiędzy oddziaływaniami w skali cząsteczkowej a własnościami układu jako całości.

Metody chemii teoretycznej mogą się zasadniczo różnić pod względem niezbędnego czasu obliczeniowego. Dzięki wzrostowi możliwości współczesnych komputerów będziemy mogli wykorzystać szereg zaawansowanych technik. Porównane zostaną różne metody w celu znalezienia techniki dającej najlepszą dokładność przy umiarkowanym koszcie.

Wynikiem projektu będzie lepsze zrozumienie podstaw zjawisk zachodzących w elektrolitach dla ogniw nielitowych i znalezienie relacji między oddziaływaniami w skali atomowej a obserwowanymi własnościami układu. Wiedza ta będzie przydatna dla poszerzonej interpretacji wyników doświadczalnych oraz dla świadomego planowania nowych układów. W ten sposób wsparte zostanie tworzenie obiecującej technologii dla zrównoważonego rozwoju. Z kolei wyniki osiągnięte w ramach oceny różnych metodologii obliczeniowych użyteczne będą nie tylko w przyszłych badaniach elektrolitów nielitowych, ale także w modelowaniu podobnych układów w roztworach.