

Dynamika rozwoju branży akumulatorów na świecie nie ma sobie równych. Spodziewany jest gigantyczny wzrost rynku baterii litowych – 1000% wzrost w obszarze samochodów elektrycznych, spory wzrost także w obszarze stacjonarnych magazynów energii. Ogromne zapotrzebowanie na baterie Li-ion wynika z faktu, że charakteryzują się one największą grawimetryczną i objętościową gęstością energii w porównaniu z innymi dostępnymi na rynku elektrochemicznymi źródłami energii. Baterie o dużej pojemności mogą odegrać znaczącą rolę w przyszłej gospodarce opartej na odnawialnych źródłach energii. Produkcja energii elektrycznej z odnawialnych źródeł energii w elektrowniach słonecznych lub wiatrowych jest w dużym stopniu uzależniona od zmieniających się warunków pogodowych. Skutkuje to niestabilnością parametrów energii oraz problemami z przyłączeniem do sieci, wahaniami częstotliwości i jakością prądu.

Ograniczone światowe zasoby litu wydają się już niewystarczające dla szybko rozwijającego się rynku baterii litowych, stąd szybkie poszukiwania alternatywnych technologii magazynowania energii elektrycznej w odwracalnych elektrochemicznych bateriach sodowych. Baterie sodowe nie są zupełnie nową alternatywą. Badania prowadzone były równoległe z ogniwami litowymi, jednak ze względu na fakt, że w latach 90' ubiegłego stulecia lit był stosunkowo tani, a materiały litowe wykazywały lepsze parametry elektrochemiczne – nastąpił szybki rozwój materiałów litowych, co doprowadziło do komercjalizacji baterii Li-ion. Obecnie następuje szybki powrót do badań nad bateriami sodowymi, ze względu na obfite zasoby sodu i jego niską cenę. Baterie Na-ion są predestynowane do magazynowania energii na dużą skalę, szczególnie z odnawialnych źródeł energii. Zwraca się także uwagę na znaczne zmniejszenie zawartości kobaltu w materiałach elektrodowych, który stał się pierwiastkiem krytycznym.

W ostatnim czasie błękit pruski $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ i jego analogi uznawane są za najbardziej obiecujący materiał katodowy do baterii Na-ion o wysokiej gęstości energii ze względu na jego niską cenę, dostępność substratów, proces produkcyjny charakteryzujący się niskimi kosztami zużycia energii oraz brakiem negatywnego wpływu na środowisko. Jednakże analogi błękitu pruskiego charakteryzują się niewystarczającą żywotnością cykli ładowania/rozładowania, dlatego ich dalszy rozwój w zakresie poprawy parametrów baterii wymaga intensywnych badań interdyscyplinarnych.

Analogi błękitu pruskiego charakteryzują się stabilną strukturą krystaliczną z dużą liczbą obszernych pozycji międzywęzłowych dla jonów Na^+ połączonych szerokimi kanałami, które stanowią drogi szybkiej dyfuzji dla jonów sodu, co pozwala na odwracalną deinterkalację/interkalację 2 moli jonów Na^+ na mol $\text{Na}_2\text{Fe}[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ i dają wysoką pojemność teoretyczną wynoszącą 170 mAh/g, znacznie przewyższającą pojemność tlenków, siarczanów i fosforanów metali przejściowych.

Warunki syntezy w roztworze powszechnie stosowane do wytwarzania analogów błękitu pruskiego sprzyjają powstawaniu różnego rodzaju defektów, z których większość pogarsza ich właściwości elektrochemiczne. Woda krystaliczna pojawiająca się podczas wzrostu kryształów występuje jako woda koordynacyjna i woda międzywęzłowa zajmująca pozycje jonów sodu. Oba rodzaje wody krystalicznej blokują drogi szybkiej dyfuzji jonów sodu i zmniejszają wydajność baterii. Analogi błękitu pruskiego mają jeszcze jedną poważną wadę – bardzo niskie przewodnictwo elektronowe. Zakładamy, iż częściowe zastąpienie żelaza innymi jonami metali 3d może poprawić właściwości transportowe materiału. Planujemy również wytwarzanie kompozytów węglowych analogów błękitu pruskiego z nanorurkami węglowymi, grafenem oraz ze zredukowanym tlenkiem grafenu w celu poprawy makroskopowego przewodnictwa elektronowego materiału katodowego i zwiększenia wydajności elektrochemicznej akumulatorów Na-ion.

Ze względu na decydującą rolę materiału katodowego na bazie analogów błękitu pruskiego w akumulatorach Na-ion przeprowadzone zostaną kompleksowe, interdyscyplinarne badania obejmujące skład chemiczny, strukturę kryształu, strukturę elektronową, efekty nanoskali, wartościowość jonów metali przejściowych, właściwości transportowe, stabilność chemiczną oraz właściwości elektrochemiczne. Duży nacisk zostanie położony na opracowanie metody syntezy umożliwiającej otrzymanie materiału katodowego z możliwie najmniejszą liczbą defektów. W ramach projektu *NaBat* zaprezentowane zostanie synergistyczne podejście oparte na inżynierii defektów, inżynierii stanów elektronowych oraz inżynierii mikrostruktury dla opracowania materiału katodowego na bazie błękitu pruskiego do ogniw Na-ion o wysokiej gęstości energii, opartych na tanich i dostępnych surowcach. Niezależnie od istotnego aspektu aplikacyjnego projektu, jego realizacja w znaczący sposób przyczyni się do poszerzenia istniejącego stanu wiedzy w zakresie korelacji pomiędzy naturą wiązań chemicznych, strukturą krystaliczną i elektronową, strukturą defektów a reaktywnością ciał stałych, co jest wciąż otwartym problemem w inżynierii materiałowej.