

Ogniwa elektrochemiczne z elektrolitem stałym posiadają większą gęstość energii i mocy oraz są bezpieczniejsze od najlepszych stosowanych obecnie ogniw litowo-jonowych, które zawierają łatwopalny elektrolit ciekły.

W ostatnich latach stworzono rozmaite przewodniki superjonowe, między innymi wnioskodawcy zaproponowali nową klasę materiałów: borowodory. Te elektrolity stałe posiadają przewodność jonową konkurencyjną dla najlepszych materiałów tlenkowych lub siarczkowych. Pokazano, iż można zbudować akumulator sodowy o napięciu 3 V zawierający materiał $\text{Na}_4(\text{B}_{12}\text{H}_{12})\text{O}(\text{B}_{10}\text{H}_{10})$. W przeciwieństwie do tlenków czy siarczków, borowodorowy przewodnik jonowy jest stabilny w połączeniu z metalicznym sodem, a z anodą sodową o dużej pojemności może pracować przy gęstości prądu $0.1 \text{ mA cm}^{-1}(\text{C}/5)$ w temperaturze 60°C . Praca przy wyższych prądach lub niższej temperaturze prowadzi to zniszczenia ogniwa poprzez jego zwarcie. W ogólności kombinacja dużej gęstości energii (metaliczna anoda) wraz z dużymi gęstościami mocy (wysoki prąd) pozostaje wyzwaniem dla ogniw z elektrolitem stałym.

Niniejszy wniosek projektowy dotyczy podstawowych własności nowych materiałów borowodorowych, które stanowią słabo poznana klasę przewodników superjonowych o potencjalnym zastosowaniu w ogniwach elektrochemicznych. W szczególności problemy związane z (i) rolą jaką odgrywa sam przewodnik w procesie zwierania ogniwa, (ii) produktami elektrochemicznego rozkładu elektrolitu oraz (iii) tworzeniem stabilnej warstwy na złączu elektrolit-elektroda (jak to ma miejsce w obecnie stosowanych ogniwach litowo-jonowych) są nieznane i wymagają badań podstawowych.

Celem odpowiedzi na te pytanie zidentyfikowaliśmy stabilność powierzchni/złącza jako kluczowy czynnik wymagający badań. W przypadku borowodorów badania ich powierzchni praktycznie nie istnieją, a ten projekt ma na celu wypełnienie tej luki w wiedzy. Łącząc badania eksperymentalne i teoretyczne podejmiemy się dociekania chemicznej i elektrochemicznej kompatybilności pomiędzy elektrolitem i elektrodą, włączając w to identyfikacje produktów powstałych na granicy stabilności oraz wpływu efektów zależnych od gęstości prądu i temperatury na długotrwałe działanie ogniwa. W tym celu połączymy metody elektrochemicznej charakteryzacji układu z metodami analizy temperaturowej, mikroskopią, badaniami dyfrakcyjnymi prowadzonymi w trakcie działania ogniwa (*in operando*). Badania teoretyczne własności struktury, stabilności powierzchni i złącza będą stanowiły podstawę zrozumienia i wyjaśnienia zjawisk.

Centralnymi aspektami projektu są:

1. eksperymentalne i teoretyczne badania nowych, nie do końca poznanych przewodników superjonowych, które w chwili obecnej spełniają więcej kryteriów zastosowania w ogniwach stałych niż jakiegokolwiek inne materiały.
2. Zrozumienie procesów zachodzących w borowodorowych przewodnikach superjonowych począwszy od własności powierzchniowych związków i pierwiastków je tworzących oraz własności złącz.
3. Innowacyjne podejście eksperymentalne badania stabilności elektrolitów borowodorowych oraz ich kompatybilności z anodami metalicznymi obejmujące metody badania rozpraszania promieni X *in situ*.

Badania eksperymentalne prowadzone będą w Laboratorium Materiałów i Konwersji Energii w ośrodku Empa, gdzie badania nad ogniwami elektrochemicznymi stanowią centrum działalności oraz w Laboratorium Krystalografii na Uniwersytecie w Genewie kierowanym przez prof. Radovan'a Černý, który jest partnerem projektu. Polski wnioskodawca projektu prof. Zbigniew Łodziana z Zakładu Badań Strukturalnych IFJ-PAN w Krakowie dostarczy teoretycznej ekspertyzy badawczej w zakresie termodynamiki, elektrochemii oraz własności złącz i powierzchni borowodorów z wykorzystaniem metod funkcjonału gęstości (DFT).