

Ионный и молекулярный транспорт в электролитах для литиевых источников тока

Слесаренко Никита Андреевич, Черняк А.В., Волков В.И., Ярмоленко О.В.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии

РАН, г. Черноголовка, пр-т акад. Н.Н. Семенова, д. 1

e-mail: n.slesarenko@icp.ac.ru

Литиевые источники питания используются для автономного электропитания широкого спектра устройств, от портативной электроники (ноутбуков, мобильных телефонов, цифровых видеокамер) до высокотехнологичных отраслей промышленности, включая автомобильную, космическую и авиационную технику, а также судостроение.

Использование полимерных электролитов (ПЭ) в литий-ионных аккумуляторах радикально решает проблему безопасности, поскольку использование жидких электролитов может быть связано с самовозгоранием и даже взрывом. Твердые ПЭ полимерно-солевого состава в большинстве случаев не обладают приемлемой проводимостью 10^{-3} С/см при комнатной температуре, поэтому в настоящее время особенно часто проводятся исследования полимерных гелевых электролитов, а также нанокompозитов на их основе. В качестве важного компонента часто используются ионные жидкости.

Целенаправленное создание высокоэффективных материалов требует фундаментального изучения механизмов ионного и молекулярного транспорта. На сегодняшний день проведены обширные исследования макроскопических процессов электро- и массопереноса. Однако для понимания механизмов селективного транспорта необходимо изучать процессы диффузии катионов, анионов и молекул растворителя на микроуровне. Такую информацию может предоставить метод ЯМР, в частности, ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля (ЯМР ИГМП) [1-4]. Метод ЯМР ИГМП позволяет избирательно измерять коэффициенты самодиффузии катионов и анионов, в отличие от электрохимической импедансной спектроскопии, которая характеризует интегральную ионную проводимость.

В работе представлены результаты исследований, проведенных на ядрах ^1H , ^7Li , ^{11}B , ^{13}C , ^{19}F с использованием ЯМР-спектроскопии (включая методы ЯМР высокого разрешения, ЯМР релаксации и ЯМР ИГМП) в ЯМР-лаборатории. В лаборатории электрохимической динамики и электролитных систем (О.В. Ярмоленко) были синтезированы полимерные электролиты на основе полимера полиэтиленгликольдиакрилата (ПЭГДА) с различными растворителями, сольватирующими катион Li^+ : 1,3-диоксолан (ДОЛ), диглим (G2), тетраглим (G4) и этиленкарбонат (ЭК), с добавлением соли LiBF_4 , ионной жидкости (ИЖ) 1-этил-3-метилимидазолия тетрафторбората (EMIBF_4) и нанодисперсных добавок SiO_2 и TiO_2 [5,6].

Структура ионных комплексов была установлена путем сравнения данных ЯМР-спектроскопии с квантово-химическими расчетами. Был изучен детальный механизм ионного транспорта, что позволило выявить на его основе природу ионной проводимости.

Это позволило предложить оптимальные составы высокоэффективных полимерных электролитов.

Измерения выполнены с использованием оборудования Аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН и Центра коллективного пользования НЦЧ ИФТТ РАН, г. Черноголовка. Работа выполнена по теме государственного задания, № госрегистрации 124013000743-3 (FFSG-2024-0008).

Литература:

- [1] V.I. Volkov, A.A. Marinin // Russ. Chem. Rev. 2013. V. 82. P. 248–272.
- [2] V.I. Volkov, O.V. Yarmolenko, A.V. Chernyak, N.A. Slesarenko, I.A. Avilova, G.R. Baymuratova, A.V. Yudina // Membranes. 2022. V. 12. P. 416.
- [3] A.V. Chernyak, N.A. Slesarenko, A.A. Slesarenko, G.R. Baymuratova, G.Z. Tulibaeva, A.V. Yudina, V.I. Volkov, A.F. Shestakov, O.V. Yarmolenko // Membranes. 2022. V. 12. P. 1111-1126.
- [4] V.I. Volkov, A.V. Chernyak, N.A. Slesarenko, I.A. Avilova // Int. J. Mol. Sci. 2022. V. 23. P. 5011.
- [5] K.G. Khatmullina, N.A. Slesarenko, A.V. Chernyak, G.R. Baymuratova, A.V. Yudina, M.P. Berezin, G.Z. Tulibaeva, A.A. Slesarenko, A.F. Shestakov, O.V. Yarmolenko // Membranes. 2023. V. 13(6). P. 548
- [6] N.A. Slesarenko, A.V. Chernyak, K.G. Khatmullina, G.R. Baymuratova, A.V. Yudina, G.Z. Tulibaeva, A.F. Shestakov, V.I. Volkov, O.V. Yarmolenko // Membranes. 2023. V. 13(9). P. 776.