

Povzetek

Povečana potreba po shranjevanju energije in s tem razvoj Li- in Na-ionskih akumulatorjev zahteva kontinuirno iskanje novih katodnih elektrodnih materialov, ki imajo višjo energijsko gostoto in so obenem varne za uporabo ter iz široko dostopnih elementov. V ta namen smo preučevali spojine na osnovi boratov, ki lahko reverzibilno izmenjujejo Li ali Na ione s klasično vgradnjo/izgradnjo v/iz strukture ali pa z konverzijsko elektrokemijsko reakcijo. Raziskave smo usmerili v identifikacijo materialov z poliboratnim anionom (B_xO_y , kjer je $x > 1$), od katerih se pričakuje višji redoks potencial glede na spojine, ki imajo BO_3 skupino v strukturi. Z uporabo $Li_6CuB_4O_{10}$ kot modelne spojine smo pokazali, da je mogoče doseči redoks potencial 4.2 in 3.9 V glede na Li^+/Li^0 za α - in β -polimorf. Redoks aktivnost bakra smo dodatno dokazali z EPR spektroskopijo in DFT izračuni. Nadalje smo preučevali odvisnost sinteznih pogojev in strukture dveh polimorfov, kjer smo pokazali, da ima α - $Li_6CuB_4O_{10}$ pri $500^\circ C$ prevodnost $1.4 \text{ mS}\cdot\text{cm}^{-1}$. Dodatno smo pripravili dve novi natrijivi spojini na osnovi prehodne kovine in pentaborata $Na_3MB_5O_{10}$ ($M = Fe, Co$). Za $M=Fe$ smo izmerili reverzibilno insercijo natrija pri napetosti 2.5 V glede na Na^+/Na^0 , medtem ko se je izkazalo, da je $Na_3CoB_5O_{10}$ elektrokemijsko neaktiven. Z iskanjem novih aktivnih poliboratnih spojin smo zapustili klasične materiale v katere se alkalne kovine vgrajujejo in smo se odločili za študij elektrokemijskega mehanizma konverzije $Bi_4B_2O_9$ glede na Li^+/Li^0 v povezavi z XRD in TEM meritvami. Spojino je mogoče reverzibilno galvanostatsko ciklati med 1.7 in 3.5V s povprečno napetostjo 2.3 V glede na Li^+/Li^0 pri čemer smo uporabili samo 5wt% ogljika, obenem pa smo dobili zelo majhno polarizacijo $\sim 300 \text{ mV}$. Glede na kompleksnost boratne kemije z 3d prehodnimi kovinami s katerimi smo se ukvarjali tekom tega doktorata, so šanse, da bi imeli boratne spojine, kot katode za Li-ionske akumulatorje za naslednjo generacijo zelo majhne.