

Nr umowy: UMO-2015/17/B/ST3/02478

Tytuł: Dodekaboranowe przewodniki superjonowe

Cel projektu

Celem badań proponowanych w projekcie jest zrozumienie mechanizmu przewodnictwa jonowego niedawno odkrytego w closo dodekaboranach jako przewodnikach superjonowych. W szczególności związek $\text{Na}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ wykazuje przewodnictwo jonowe porównywalne do tego z znanych najlepszych przewodników sodu opartych na tlenku glinu. Poszukiwanie nowych przewodników superjonowych jest istotne dla rozwoju nowych sposobów magazynowania energii elektrycznej w przyszłych akumulatorach. W tradycyjnych materiałach wykazujących przewodnictwo jonowe, zjawisko to powiązane jest z właściwościami defektów. Jest ono stosunkowo dobrze rozumiane. W dodekaboranach mechanizm przewodnictwa związany jest ze sprzężeniem rotacyjno – translacyjnym ruchu jonów, jednak w skali atomowej mechanizm ten pozostaje niewyjaśniony. Niniejszy projekt jest poświęcony zrozumieniu zjawiska transportu jonów z closo – dodekaboranach $\text{M}(\text{B}_{12}\text{H}_{12})$ i obejmuje następujące problemy poznawcze: (1) termodynamiczna/elektrochemiczna/ mechaniczna stabilność tych związków; (2) mechanizm przewodnictwa kationów w skali atomowej; (3) możliwość modyfikacji przewodnictwa za pomocą podstawiania jonów. W projekcie przeprowadzimy obliczenia własności materiałów oparte o metody mechaniki kwantowej. W ostatnich latach podejście takie stało się wiarygodną metodą projektowania materiałów in silico.