

Raziskovalni projekt J7-70264

Razvoj rentgenske emisijske spektroskopije za laboratorijsko karakterizacijo litij-žveplovih baterij naslednje generacije

Developing laboratory tender X-ray emission spectroscopy to characterize next-generation lithium-sulfur batteries

ERC področje PE4 - Fizikalna in analizna kemija

Trajanje projekta: od 1.3.2026 do 28.2.2029

Projektna skupina

Vodja projekta: izr. prof. dr. Matjaž Kavčič

Sodelujoče raziskovalne organizacije: [Kemijski inštitut, Laboratorij za moderne baterijske sisteme](#)

Sestava projektne skupine: [Povezava na SICRIS](#)

Vsebinski opis projekta

Rentgenska emisijska spektroskopija (XES), ki temelji na sevalnih prehodih iz zasedenih valenčnih elektronskih stanj, omogoča preučevanje lokalne elektronske zgradbe in kemijske vezave atomov v različnih razsežnih materialih. Medtem ko se spektroskopija XES v spektralnem področju trde rentgenske svetlobe intenzivno uporablja na sinhrotronih, je področje nežne rentgenske svetlobe bistveno manj raziskano zaradi številnih tehničnih omejitev. Z uporabo ustreznega spektrometra v kombinaciji z laboratorijskim virom ionizirajočega sevanja, spektroskopija XES načeloma omogoča preučevanje lokalne elektronske zgradbe razsežnih materialov (v trdni in tekoči obliki) z energijami emisijskih črt v spektralnem področju nežne rentgenske svetlobe. S tem spektroskopija XES analizo prinaša s sinhrotronov tudi v manjše laboratorije in potencialno tudi v industrijske laboratorije. V predlaganem projektu bomo poskusili razviti in uveljaviti spektroskopijo XES kot analitično orodje za laboratorijsko analizo kemijskega stanja žvepla v katodah baterij kovina-žveplo, ki omogočajo izredno visoko energijsko gostoto.

Baterije, ki temeljijo na uporabi katode iz žvepla, teoretično omogočajo povečanje energijske gostote za velikostni red v primerjavi z litij ionskim baterijami in so zato eden izmed najbolj obetavnih sistemov za aplikacije, ki zahtevajo veliko energijsko gostoto. Da bi dosegli kapacitete, ki so potrebne za komercialno uporabo, je potrebno izboljšati osnovno razumevanje mehanizma elektrokemijske pretvorbe žvepla. Bistveno vlogo pri tem igrajo analitske tehnike, ki omogočajo nedestruktivno analizo katodnih materialov med delovanjem baterije (metode operando). Trenutno se pri karakterizaciji elektrokemijskih procesov v žveplovih katodi najbolj pogosto uporablja rentgenska absorpcijska spektroskopija z uporabo sinhrotronske svetlobe. Omejen dostop do velikih eksperimentalnih naprav, predstavlja ozko grlo za bolj rutinsko analizo elektrokemijske pretvorbe žvepla. V predlaganem projektu bomo razvili laboratorijsko analitsko metodo in jo uporabili za karakterizacijo elektrokemijske pretvorbe žvepla v nekaterih novih tipih baterij kovina-žveplo, ki omogočajo povečanje energijske gostote in kapacitete.

Cilji projekta

- Razvoj namenske instrumentacije za učinkovito izvedbo rentgenske emisijske spektroskopije v energijskem območju mehkih rentgenskih žarkov (optimizacija spektrometra, konstrukcija operando celice) in eksperimentalna validacija metodologije za meritve žveplovih baterij v načinu operando.

- Uporaba računskih orodij na osnovi teorije gostotnih funkcionalov za modeliranje izmerjenih emisijskih spektrov.
- Spektroskopska karakterizacija različnih sistemov žveplovih baterij naslednje generacije: baterije Li-S s karbonatnimi elektroliti in ultramikroporoznimi ogljikovo-žveplovimi katodnimi kompoziti, baterije Mg-S z uporabo dekoracije ogljika s CuO za izboljšanje elektrokemijske učinkovitosti.

Bibliografske reference

Povezave

- SICRIS: [Povezava na podatke v sistemu SICRIS](#),
- Projekt financira [ARIS](#) - Javna agencija za znanstvenoraziskovalno in inovacijsko dejavnost Republike Slovenije:

