

⁷Li-NMR relaxációs módszerek alkalmazása lítium-levegő akkumulátorok határfelületeinek vizsgálatára.

Application of ⁷Li-NMR relaxation methods to study the interfaces of lithium-air batteries.

Nyul Dávid¹, Nagy Lajos¹, Kuki Ákos¹, Nagy Tibor¹, Bányai István²,
Zsuga Miklós¹, Kéki Sándor¹

¹Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar,
Alkalmazott Kémiai Tanszék,

²Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar,
Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1

ABSTRACT

One of the most pressing problems of the modern age is the storage of the generated energy, since without adequate storage capacity it is impossible to imagine an electrical network that operates purely with renewable energy sources. Among batteries with different chemistry, lithium-ion based cells have an exceptionally high specific and volumetric energy density. The lithium-air battery has the highest energy density.

NMR spectroscopy is a very rapidly developing and versatile family of structural analysis and imaging methods. Solid-phase NMR techniques have already been used to study the interaction between electrode materials and alkali metals, for example the behavior of sodium intercalated in porous carbon or lithium intercalated in graphite. On the other hand, the solid phase methods have a big disadvantage that they cannot examine these systems under real conditions. Liquid-phase NMR methods cannot provide direct information about a solid substance, but by examining the interactions between the surface and the liquid phase, we can obtain valuable additional information about the given system.

All alkali metals have NMR active isotopes and these isotopes are invariably quadrupole nuclei. The appearance of the quadrupole coupling is not possible in the solution phase, since the quadrupole interactions are averaged out due to the rapid movement and rotation of the alkali metal ions. If the alkali metal ion binds to a slowly moving particle or surface, its rotation slows down enough for quadrupole relaxation to be observed. Quadrupole or multi-quantum (MQ) relaxation paths can be detected using MQ filters or a TQTPPI (triple-quantum time-proportional phase increment) sequence.

Keywords: lithium, air, NMR, triple-quantum, relaxation

ÖSSZEFOGLALÓ

A modern kor egyik legégetőbb problémája a megtermelt energia tárolása, hiszen megfelelő tárolókapacitás nélkül nem képzelhető el olyan elektromos hálózat, ami tisztán megújuló energiaforrásokkal üzemel. A különböző kémiai akkumulátorok közt a lítium-ion alapú cellák kimagaslóan nagy fajlagos és volumetrikus energiasűrűséggel rendelkeznek. A legnagyobb energiasűrűséggel a lítium-levegő akkumulátor rendelkezik.

Az NMR spektroszkópia egy igen gyorsan fejlődő és sokoldalú szerkezetvizsgáló és képalkotó módszercsalád. Szilárd fázisú NMR technikákkal már vizsgálták az elektródanyagok és az alkálifémek kölcsönhatását, például porózus szénben interkalált nátrium vagy grafitban interkalált lítium viselkedését. A szilárd fázisú módszereknek viszont nagy hátránya, hogy nem tudják ezeket a rendszereket valós körülmények közt vizsgálni. A folyadék fázisú NMR módszerek közvetlen információt nem képesek szolgáltatni egy szilárd anyagról, de a felület és a folyadék fázis közti kölcsönhatások vizsgálatával értékes többletinformációt nyerhetünk az adott rendszerről.

Minden alkálifémnek van NMR aktív izotópja és ezek az izotópok kivétel nélkül kvadrupólus magok. A kvadrupólus csatolás megjelenése oldat fázisban nem lehetséges, hiszen az alkálifém ionok gyors mozgása és rotációja miatt a kvadrupólus kölcsönhatások kiátlagolódnak. Ha az alkálifém-ion egy lassan mozgó részecskéhez vagy egy felülethez kötődik, akkor a rotációja eléggé lelassul ahhoz, hogy kvadrupólus relaxáció is megfigyelhető legyen. A kvadrupólus vagy többkvantum (MQ) relaxációs útvonalak detektálása MQ szűrők segítségével vagy TQTPPI (triplakvantum időarányos fázistolás) szekvencia segítségével történhet.

Kulcsszavak: lítium, levegő, NMR, triplakvantum, relaxáció

Köszönetnyilvánítás

RRF-2.3.1-21-2022-00009, azonosítószámú, Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium megnevezésű projekt a Széchenyi Terv Plusz program keretében, az Európai Unió Helyreállítási és Ellenállóképességi Eszközének támogatásával valósul meg. Továbbá köszönjük a munka során nyújtott anyagi segítséget az FK-132385 pályázatnak.