

Trasformazioni chimiche in sistemi redox per l'accumulo di energia

Dr. Sergio Brutti

La natura chimica e morfologica dei materiali innovativi, cristallini o nanostrutturati, per applicazioni in campo energetico influenza in modo determinante le corrispondenti proprietà chimico fisiche e le prestazioni in dispositivi reali, come batterie aprotiche secondarie, celle a combustibile, supercapacitori o negli accumulatori di idrogeno gassoso. In tutti queste applicazioni le transizioni tra fasi e la reattività interfacciale guidano le proprietà funzionali attraverso una complessa interazione tra termodinamica di reazione e cinetica.

I meccanismi di incorporazione/estrazione di ioni litio/sodio in elettrodi in fasi solide per batterie aprotiche può variare dall'intercalazione alla conversione o all'accumulo pseudocapacitivo. Una analoga complessità chimico-fisica si riscontra anche nei processi redox anionici nei sistemi Li-O₂ o Li-S nei quali la reattività è mediata dalle solvatazioni in fase liquida e dal trasporto di cariche attraverso interfasi multiple (solido/liquido/gas).

Nel complesso lo studio della chimica allo stato solido e alle interfasi di materiali innovativi in dispositivi per applicazioni energetiche è un ambito di ricerca vasto e affascinante che necessita approcci investigativi multi-tecnica che comprendano metodi sperimentali (diffrazione di raggi X, spettroscopie vibrazionali, microscopia elettrochimica, spettroscopia di fotoelettroni, tecniche elettrochimiche), ex situ o in tempo reale, e metodi computazionali (teoria del funzionale densità, modellazione termodinamica). Questo approccio combinato sperimentale/computazionale è illustrato in due esempi: (a) l'interfasi litio metallico/elettrolita e (b) la reattività chimica/elettrochimica nei sistemi redox metalli alcalini-O₂.