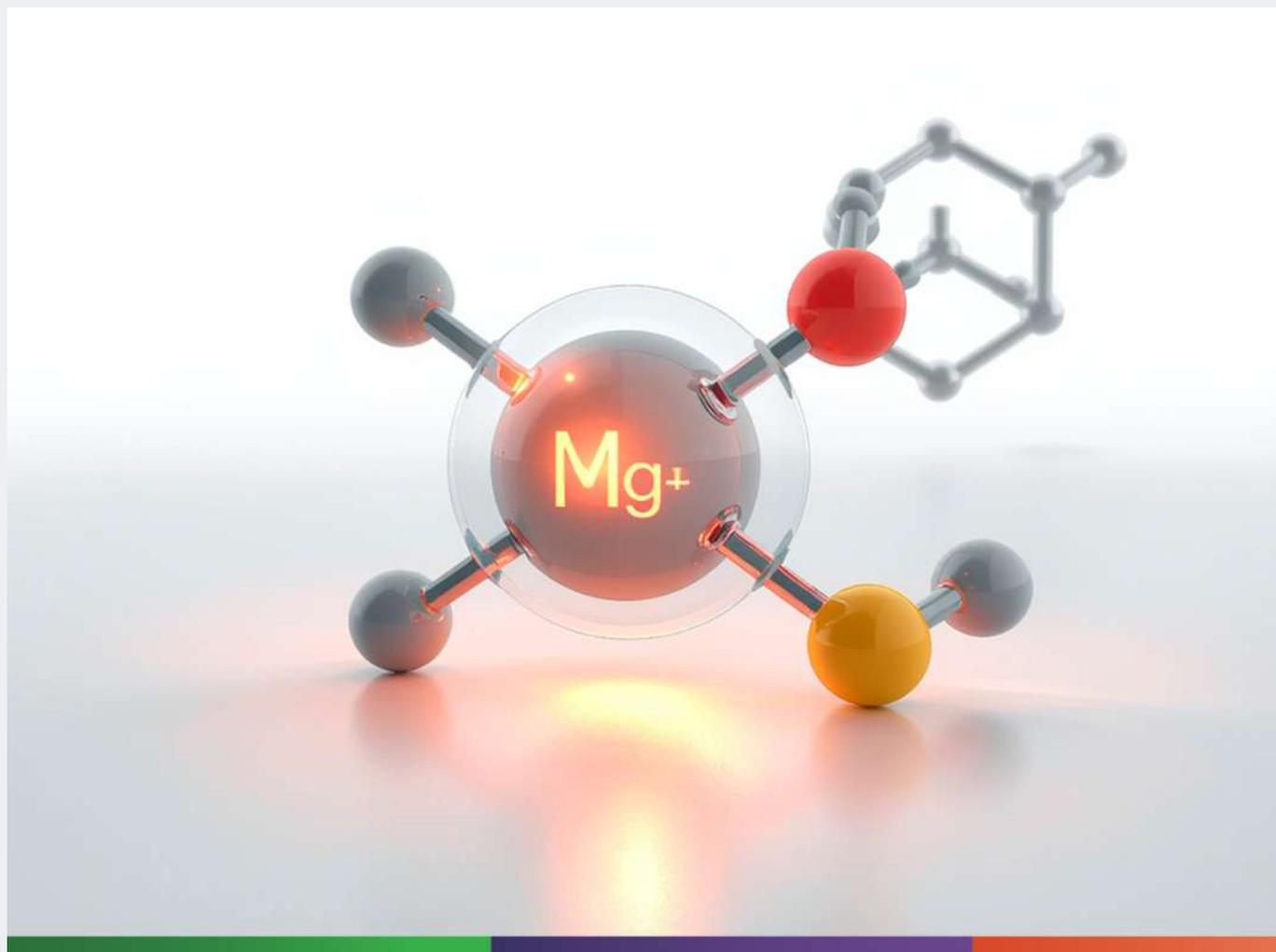


Координационные предпочтения в электролите для магниевых батарей



В исследовании, опубликованном в авторитетном журнале *Materials Chemistry and Physics*, научный коллектив под руководством доцента Высшей школы высоковольтной энергетики СПбПУ Надежды Андреевой представил результаты изучения конкурентного взаимодействия компонентов в смешанном электролите для магниевых аккумуляторов.

В центре внимания — система, содержащая соль (трифлат магния), координирующий растворитель (диглим) и некоординирующий соразтворитель (гидрофторэфир). Подобные смеси рассматриваются как один из подходов к улучшению стабильности электролитов для магниевых батарей, где ключевым вопросом остается эффективная сольватация двухзарядного катиона Mg^{2+} .

Авторы использовали комбинацию методов: поиск глобальных минимумов конфигурационной энергии с помощью полуэмпирического моделирования (PM7) и последующее уточнение структур и термодинамических параметров на уровне теории функционала плотности (M11/def2-TZVP) с учетом поляризуемой модели среды.

В работе показано, что относительная способность к координации иона магния убывает в ряду: трифлат-анион > диглим > гидрофторэфир. В наиболее энергетически выгодных конфигурациях первую координационную сферу Mg^{2+} образуют два аниона трифлата и две молекулы диглима. Каждая из двух молекул диглима участвует в координации двумя атомами кислорода, обеспечивая заполнение шести координационных мест. Гидрофторэфир в первой сфере катиона не обнаружен.

Рассчитанные значения свободной энергии Гиббса для процессов сольватации составили $-181,46$ кДж/моль для диглима и $+17,83$ кДж/моль для гидрофторэфира. Авторы отмечают, что полученные структурные и термодинамические данные согласуются с ранее опубликованными экспериментальными результатами.

Оригинал статьи: [REDACTED]