

Khảo sát độ bền điện hóa kết hợp với tính toán năng lượng oxy hóa khử của các chất lỏng ion làm chất điện giải cho pin sạc

Phùng Quán¹, Huỳnh Lê Thanh Nguyên², Lê Mỹ Loan Phụng^{1,2}

¹Bộ môn Hóa Lý, Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, ĐHQG-HCM

²Phòng thí nghiệm Hóa Lý Ứng dụng, Khoa Hóa học,

Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, ĐHQG-HCM

quanph@hcmus.edu.vn, hltnguyen@hcmus.edu.vn, lmlphung@hcmus.edu.vn

Tóm tắt

Trong nghiên cứu này, chúng tôi tìm hiểu tính chất điện hóa của các chất lỏng ion họ Ammonium tứ cấp ứng dụng làm dung dịch điện giải trong pin sạc lithium-ion. Tính toán các giá trị lý thuyết liên quan đến cation, anion và dạng chất lỏng ion như HOMO, LUMO, dạng hình học... nhằm phát hiện những yếu tố ảnh hưởng đến độ nhớt, độ bền oxy hóa khử của một số họ chất lỏng ion Ammonium tứ cấp. Kết hợp với các đo đạc trong hệ pin hoàn chỉnh với hệ điện giải trên vật liệu điện cực dương khác nhau (LiMn_2O_4 , LiCoO_2 và $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$), chúng tôi đề xuất các hệ điện giải có tính năng tốt, độ bền oxy hóa khử cao, tương thích tốt với các vật liệu điện cực, phù hợp cho các ứng dụng trong pin sạc Li-ion.

Từ khóa: Ammonium tứ cấp, dung dịch điện giải, độ bền điện hóa, phóng-sạc

Investigation of electrochemical stabilization and energy of the ionic liquids in electrolyte for rechargeable batteries

Phung Quan¹, Huynh Le Thanh Nguyen², Le My Loan Phung^{1,2}

¹Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry
University of Science, VNU-HCM

²Applied Physical Chemistry Laboratory, Faculty of Chemistry
University of Science, VNU-HCM

quanph@hcmus.edu.vn, hltnguyen@hcmus.edu.vn, lmlphung@hcmus.edu.vn

Abstract

This work aimed to investigate the electrochemical properties of ionic liquids based on the quaternary ammonium as electrolyte in lithium-ion batteries (LIBs). The theoretic calculation (HOMO, LUMO) of the quaternary ammonium ionic liquids reported the effect of viscosity, electrochemical stabilization. Combining the charge-discharge test in the cathode materials such as LiCoO_2 , LiMn_2O_4 and $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$, we suggest the electrolytes including ionic liquids and solvent (ethylene carbonate, propylene carbonate...) which are stable and compatible with the electrode materials.

Key words: quaternary Ammonium, electrolyte, ionic liquid, electrochemical stabilization charge-discharge test