

Ogniwa litowe są obecnie najszybciej rozwijającą się technologią magazynowania energii wykorzystywaną głównie do zasilania przenośnych urządzeń elektronicznych, samochodów hybrydowych i elektrycznych. Przewiduje się, że w najbliższej przyszłości zakres zastosowań ulegnie poszerzeniu i obejmie takie obszary jak magazynowanie energii odnawialnej, systemy awaryjnego zasilania linii produkcyjnych oraz inteligentne sieci energetyczne. Ważnym zagadnieniem związanym z wykorzystaniem ogniw Li-ion w motoryzacji jest bezpieczeństwo ich stosowania. Wymogi bezpieczeństwa są szczególnie ostre biorąc pod uwagę konieczność zgromadzenia znacznie większej ilości energii w porównaniu z ogniwami dla przenośnej elektroniki. Prowadzi to do potrzeby opracowania materiałów, w szczególności materiału katodowego, dla ogniw litowych o wyższej stabilności strukturalnej i elektrochemicznej, w porównaniu do związków stosowanych obecnie.

Ogniwa *Li-ion* wykorzystują zdolność związków metali przejściowych M_aX_b (M-metal przejściowy; X = O, S) o strukturze warstwowej lub szkieletowej do odwracalnego wbudowywania w ich strukturę jednego lub więcej moli litu na mol M_aX_b w temperaturze pokojowej bez zasadniczych zmian w strukturze krystalograficznej. Reakcję interkalacji/deinterkalacji litu do związków metali przejściowych M_aX_b , która zawsze przebiega jonowo-elektronowo można zapisać:



W procesie tym wykorzystuje się energię głębokich poziomów elektronów typu *d* w związkach metali przejściowych, które mając wartość kilku eV/atom stwarzają możliwość akumulacji wysokich gęstości energii rzędu kilkaset Wh/kg. Badania wskazują, że to katoda ogranicza najważniejsze parametry użytkowe ogniw litowych, takie jak gęstość energii i mocy, podczas gdy anoda grafitowa limituje głównie szybkość ładowania ogniwa. Gęstość prądu czerpanego z ogniwa jest uwarunkowana wielkością przewodnictwa jonowo-elektronowego materiału katodowego, podczas gdy liczba cykli ładowania/rozładowania istotnie zależy od zjawisk na granicy materiał elektrodowy/elektrolit. Bezpieczeństwo użytkowania akumulatorów wiąże się z termiczną i chemiczną stabilnością materiałów elektrodowych i elektrolitu.

W komercyjnych ogniwach Li-ion jako katody stosowane są głównie tlenki: $LiCoO_2$, $LiNi_{1-y}Co_yO_2$ i $LiMn_2O_4$. Wykazują one szereg wad, takich jak niska odwracalność procesu ładowania/rozładowania czy spadek napięcia ze wzrostem liczby cykli, związanych z ich niewystarczającą stabilnością strukturalną i elektrochemiczną. Kontrola nad procesami zachodzącymi w ogniwach litowych wymaga interdyscyplinarnego podejścia w zakresie fizyki, chemii i elektrochemii ciała stałego, inżynierii materiałowej, modelowania struktury elektronowej, modelowania stabilności strukturalnej i chemicznej materiałów katodowych oraz zastosowania zaawansowanych technik badawczych.

Celem projektu jest poszerzenie stanu wiedzy o czynnikach determinujących wydajność elektrochemiczną i stabilność katod dla ogniw litowych. Określenie związku pomiędzy strukturą krystaliczną i elektronową, stopniem utlenienia metali przejściowych, właściwościami transportowymi i elektrochemicznymi materiałów katodowych umożliwi kontrolę nad tymi właściwościami i pozwoli na projektowanie bezpiecznych funkcjonalnych materiałów katodowych dla ogniw litowych. Projekt przedstawia nowe podejście w projektowaniu funkcjonalnych właściwości warstwowych tlenków metali przejściowych dla ogniw litowych, bazujące na korelacji pomiędzy strukturą krystaliczną i elektronową a właściwościami elektrochemicznymi materiału katodowego (charakterem krzywej rozładowania, pojemnością, gęstością prądu, strukturalną i elektrochemiczną stabilnością). Podejście to może okazać się przełomowym w projektowaniu bezpiecznych materiałów dla *Li-ion batteries* o wysokich parametrach użytkowych.

Aby opracować kryterium stabilności strukturalnej i elektrochemicznej tlenkowych materiałów katodowych dla ogniw litowych, niezbędne są szeroko zakrojone badania: strukturalne, badania elektrochemiczne, pomiary stopnia utlenienia jonów metali przejściowych, badania właściwości transportowych, EPR, eksperymentalne metody badania struktury elektronowej – NEXAFS i badania elektronowego ciepła właściwego oraz obliczenia struktury elektronowej metodą DFT (KKR-CPA). Badania te będą prowadzone zarówno na materiałach wyjściowych (po syntezie) jak i w funkcji stopnia deinterkalacji litu. Pozwolą one na określenie relacji pomiędzy strukturą krystaliczną i elektronową a stabilnością strukturalną i elektrochemiczną materiału katodowego oraz ich wpływu na efektywność i odwracalność procesu interkalacji litu, co ma bezpośredni wpływ na parametry użytkowe ogniw Li-ion.