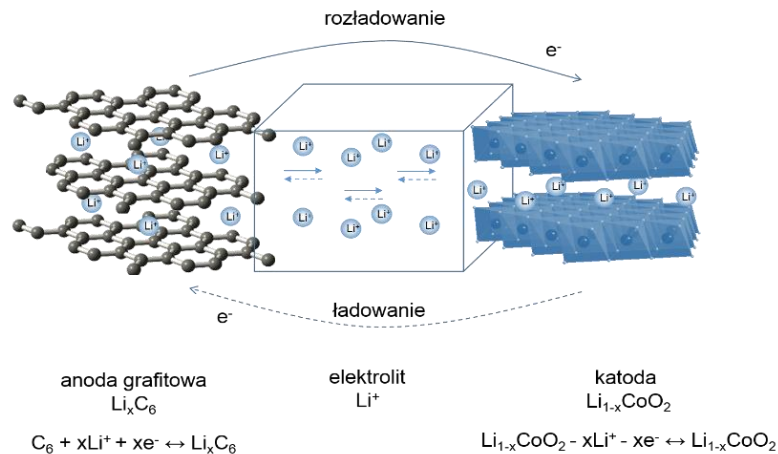


Technologie ogniw litowych są obecnie najdynamiczniej rozwijającym się obszarem związanym z magazynowaniem i przetwarzaniem energii elektrycznej dla potrzeb urządzeń mobilnych, samochodów elektrycznych i hybrydowych, magazynowania energii ze źródeł odnawialnych oraz inteligentnych sieci „smart grids”. Obserwuje się również powrót zainteresowania technologią ogniw Na-ion, z uwagi na powszechną dostępność i niską cenę sodu. Ogniwa Li-ion (Na-ion) wykorzystują zdolność związków metali przejściowych M_aX_b (M-metal przejściowy; X= O, S, polianion PO_4) o strukturze warstwowej lub szkieletowej do odwracalnego wbudowywania w ich strukturę jednego lub więcej moli litu lub sodu na mol M_aX_b w temperaturze pokojowej bez zasadniczych zmian w strukturze krystalograficznej. Reakcję interkalacji litu (sodu) do związków metali przejściowych M_aX_b , która przebiega jonowo-elektronowo przedstawia reakcja: $xLi^+ + xe^- + M_aX_b \leftrightarrow Li_xM_aX_b$. W reakcji tej wykorzystuje się energię głębokich poziomów elektronowych typu *d*, które mając wartość kilku eV/atom stwarzają możliwość akumulacji energii rzędu kilkuset Wh/kg. Rys. 1. przedstawia schematycznie mechanizm pracy komercyjnego akumulatora typu $Li_xC_6/Li^+/Li_{1-x}CoO_2$.



Rys.1 Schemat pracy akumulatora $Li_xC_6/Li^+/Li_{1-x}CoO_2$.

Badania wskazują, że to katoda ogranicza najważniejsze parametry użytkowe ogniw litowych i sodowych, takie jak gęstość energii i mocy. 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 ogniw wiąże się z termiczną i chemiczną stabilnością materiałów elektrodowych i elektrolitu.

Kontrola nad procesami zachodzącymi w ogniwach Li-ion i Na-ion 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.

Projekt przedstawia nowe podejście w projektowaniu funkcjonalnych właściwości warstwowych tlenków metali przejściowych dla ogniw Na-ion, bazujące na korelacji pomiędzy strukturą elektronową a właściwościami elektrochemicznymi materiału katodowego (charakterem krzywej rozładowania, pojemnością, gęstością prądu, strukturalną i elektrochemiczną stabilnością również silnie uzależnioną od struktury elektronowej). Podejście to może okazać się przełomowym w projektowaniu bezpiecznych materiałów dla Na-ion batteries o wysokich parametrach użytkowych. Potwierdzenie stawianej hipotezy wymaga kompleksowych szeroko zakrojonych badań interdyscyplinarnych obejmujących fizykę, chemię i elektrochemię ciała stałego, a także modelowanie komputerowe. W celu wykazania korelacji pomiędzy parametrami struktury elektronowej materiału katodowego a właściwościami elektrochemicznymi (parametrami ogniw) zostaną przeprowadzone precyzyjne badania materiału katodowego a mianowicie badania strukturalne, badania właściwości transportowych, optycznych i magnetycznych, badania elektronowego ciepła właściwego, spektroskopii Moessbauera, NEXAFS oraz obliczenia struktury elektronowej. Badania te zostaną przeprowadzone na wyjściowym materiale katodowym (po syntezie) oraz w funkcji stopnia interkalacji sodu, w charakterystycznych punktach krzywej rozładowania. Do badań wytypowano następujące serie tlenków metali przejściowych o strukturze warstwowej: $Na_xCo_{1-z}Mn_zO_{2-y}$, $Na_xCo_{1-z}Fe_zO_{2-y}$, $Na_xFe_{1-z}Mn_zO_2$, $Na_xCo_{1/3}Ni_{1/3}Mn_{1/3}O_{2-y}$, $Na_xFe_{1-z-d}Ni_zMn_dO_{2-y}$ oraz $Na_xNi_{1/3}Mn_{2/3-w}Ti_wO_{2-y}$ $0 < x \leq 1$, $0 \leq z \leq 1$, $0,1 \leq d \leq 0,9$, $0 \leq w \leq 2/3$.