

Proponowany projekt ma na celu wyjaśnienie na poziomie atomowym mechanizmów złożonych procesów dynamicznych w układach jonowych. Najprostszym przykładem układów jonowych są ciecze jonowe w warunkach swobodnych i poddane różnego rodzaju ograniczeniom geometrycznym („confined”). Ciecze jonowe to materiały o temperaturze topnienia poniżej 100°C i składające się ze zdysocjowanych (bez użycia rozpuszczalnika) kationów i anionów.

Bardziej złożonym (i wyrafinowanym) przykładem układów jonowych są tak zwane nanociecze tj. ciecze jonowe zawierające nanoobiekty o różnym wymiarze i właściwościach. Nanociecze składają się z cieczy bazowej, w której zamieszczono nanoobiekty – nanocząstki traktowane jako obiekty 0D, nanorurki – 1D, czy też warstwy grafenowe – 2D. Ze względu na silne oddziaływania między jonami własności dynamiczne takich układów znacznie różnią się od właściwości "konwencjonalnych" cieczy molekularnych. To jest ogólne stwierdzenie, podczas gdy my poszukujemy wyjaśnienia szeregu specyficznych efektów dynamicznych obserwowanych w układach jonowych w różnych warunkach. Stanowi to pierwszy cel projektu – chcemy zrozumieć np. jaki mechanizm odpowiada za to, że ciecze jonowe zamknięte w nanorurkach podlegają szybszej dyfuzji niż w warunkach swobodnych, dlaczego nanociecze wykazują specyficzne własności reologiczne, czy też dlaczego w mieszaninach cieczy jonowych przewodnictwo jonowe nie wykazuje związku z dyfuzją jonową. Zadajemy też inne pytania – np. czy jony tego samego znaku mogą tworzyć klastry; jest to raczej abstrakcyjna idea. W celu odpowiedzi na te pytania należy poznać dynamikę pojedynczych jonów, poziom korelacji procesów dynamicznych oraz mechanizmy oddziaływań jonów z otaczającymi powierzchniami. Wykorzystujemy w tym celu specyficzną metodę nazywaną Relaksometrią Magnetycznego Rezonansu Jądrowego. W dużym skrócie – metoda ta pozwala uzyskać informacje o skali czasowej i mechanizmie ruchów na podstawie szybkości ewolucji namagnesowania próbki przy zmianie zewnętrznego pola magnetycznego.

Potrzeba efektywnych baterii i układów magazynujących energię jest oczywista - nasze społeczeństwo użytkuje je permanentnie począwszy od smartfonów i laptopów do pojazdów i szeroko rozumianych przemysłowych zastosowań, a ich parametry są ciągle niewystarczające. Rozwój systemów magazynowania energii jest bardzo ważnym zagadnieniem nauki i technologii materiałów, ponieważ jest to klucz do technologii umożliwiającej przejście z kopalnych na odnawialne energie. Wraz ze zwiększeniem produkcji energii ze źródeł odnawialnych (energia słoneczna, energia wiatrowa) potrzeba wydajnych systemów magazynowania energii prowadzi do intensywnych badań naukowych w zakresie poprawienia sprawności i wydajności baterii i tak zwanych super-kondensatorów. Zdecydowana większość badań w tej dziedzinie polega na syntezie nowych materiałów (elektrolitów i elektrod) i ich elektrochemicznej charakterystyce. Na obecnym etapie stało się jasne, że dalszy postęp w dziedzinie układów magazynujących energię jest uwarunkowany zrozumieniem i wyjaśnieniem procesów transportu jonów w powiązaniu z mechanizmami procesów dynamicznych zachodzących w układach jonowych. Z tego powodu, drugi cel projektu związany jest z układami jonowymi o znaczeniu aplikacyjnym: żelami i membranami jonowymi, których przykładem są matryce SiO₂ i sieci polimerowe zawierające mieszaniny cieczy jonowych i soli litu. Analogicznie do pierwszej części projektu, poszukujemy odpowiedzi na szereg pytań związanych z dynamiką takich układów – dla przykładu w jaki sposób zachować mobilność jonów i w konsekwencji przewodnictwo jonowe na poziomie odpowiadającym cieczom w warunkach swobodnych. By odpowiedzieć na takie pytania konieczne jest Dobrym przykładem są tu żele jonowe – by być w stanie zachować, konieczne jest daleko posunięte zrozumienie wpływu ograniczeń geometrycznych oddziaływań jonów z powierzchniami porów matrycy na zdolność tych jonów do możliwie niezakłóconego procesu dyfuzji.