

Głównym celem tego projektu jest poszerzenie obecnego stanu wiedzy na temat tzw. tlenków wysokoentropowych (HEOx, ang. *High-Entropy Oxides*) w aspekcie opracowania skutecznie działających materiałów anodowych do akumulatorów litowo-jonowych. Ogólna idea HEOx polega na stabilizacji prostych struktur roztworów stałych poprzez wpływ wysokiej entropii konfiguracyjnej. Można tego dokonać przez zmieszanie kilku składników (co najmniej pięciu) w proporcjach równomolowych lub bliskich równomolowym. Takie podejście do projektowania materiałów jest całkowicie odmienne od konwencjonalnego i pozwala uzyskać niezwykle właściwości. Na dzień dzisiejszy, tylko jeden skład z dużej grupy materiałów HEOx został zastosowany i przebadany jako anoda w akumulatorach litowo-jonowych. Co więcej, udokumentowano, że wydajność elektrochemiczna ogniw w dużej mierze zależy od morfologii (kształtu i rozmiarów) zsyntetyzowanego materiału aktywnego. Jak dotąd tylko jedna grupa badawcza studiowała optymalizację tego parametru dla anody wysokoentropowej. Oczekuje się, że kompleksowa charakterystyka struktury i właściwości fizykochemicznych HEOx typu spinelu pozwoli wybrać najlepszego kandydata na materiał anodowy, a zastosowanie zaawansowanych metod wytwarzania pozwoli uzyskać materiał aktywny o pożądanej nano- i mikrostrukturze. Dzięki połączonej optymalizacji składu chemicznego i morfologii, opracowane anody zapewnią wyjątkową wydajność elektrochemiczną. W związku z tym, w niniejszym wniosku zostaną połączone trzy podstawowe aspekty, w celu osiągnięcia głównego celu projektu: 1) tlenki spinelowe zapewnią wysoką pojemność teoretyczną akumulatora litowo-jonowego; 2) podejście wysokoentropowe umożliwi uzyskanie nowych kompozycji HEOx poprzez stabilizację struktury krystalicznej, co powinno być korzystne pod względem wydajności elektrochemicznej; 3) zaawansowane metody syntezy pozwolą uzyskać pożądaną morfologię aktywnych związków HEOx, która jest niezbędna do optymalizacji wydajności opracowanych materiałów anodowych.

W dzisiejszych czasach zapotrzebowanie na energię na całym świecie znacząco wzrasta. Istotne jest opracowanie nowoczesnych technologii pozyskiwania energii elektrycznej oraz systemów elektrycznych w celu magazynowania otrzymanej energii. Obecnie jednym z najlepszych rozwiązań są akumulatory litowo-jonowe. Najlepszym dowodem ich wpływu na dzisiejszą technologię jest przyznanie Nagrody Nobla 2019 w dziedzinie chemii „za rozwój akumulatorów litowo-jonowych”. Nadal jednak istnieje pilna potrzeba zaprojektowania i wyprodukowania ogniw litowo-jonowych o większej pojemności, gęstości energii, zwiększonym bezpieczeństwie i dłuższej żywotności. Klasyczna, komercyjna technologia litowo-jonowa oparta na katodzie litowo-tlenkowej, np. $\text{LiNi}_{1-x-y}\text{Co}_x\text{Mn}_y\text{O}_2$, i anodzie grafitowej osiągnęła już swoje teoretyczne granice. Wśród alternatywnych materiałów anodowych zaproponowane zostały nanostrukturalne tlenki metali. Chociaż dla różnych badanych związków możliwe było uzyskanie wysokiej pojemności, wiele poważnych problemów (szczególnie znaczne zanikanie pojemności podczas używania baterii) wciąż nie zostało rozwiązanych. Materiały badane w proponowanym projekcie - tlenki o wysokiej entropii - są świetnymi kandydatami do przezwyciężenia tych ograniczeń.

Zadania badawcze zaproponowane w projekcie zostały starannie zaplanowane, aby zrealizować przedstawione cele. Metodologia badań obejmuje syntezę materiałów metodą reakcji w stanie stałym, a także tzw. metodami chemii mokrej. Produkty zostaną zbadane pod kątem składu chemicznego, struktury, mikrostruktury oraz stabilności. Jedną z najważniejszych części badań będzie polegać na pomiarach właściwości elektrycznych, w celu wyselekcjonowania najlepszych możliwych kompozycji. Wybrane HEOx zostaną zastosowane w rzeczywistych ogniwach, aby ustalić ich wydajność elektrochemiczną, co będzie kluczowym etapem całego planu pracy. Pozwoli to wybrać najbardziej optymalne wysokoentropowe materiały anodowe dla technologii litowo-jonowej. Dodatkowo w projekcie zbadane zostaną mechanizmy zachodzące na anodzie podczas pracy baterii. W przypadku najbardziej obiecujących kompozycji zostanie podjęta próba przeniesienia tych rozwiązań na większą skalę.

Wyniki uzyskane podczas przeprowadzonych badań wstępnych wskazują, że przedstawiony plan pracy jest odpowiedni i umożliwi efektywne wykorzystanie proponowanych anod w ogniwach, co prowadzi do obiecujących wyników elektrochemicznych. Ponieważ rozważany w tej propozycji problem naukowy dotyczy pierwszego zastosowania tlenków wysokoentropowych o strukturze spinelu jako anod w technologii litowo-jonowej, otworzy nowe ścieżki dla dalszej poprawy wydajności HEOx, stąd użytecznych parametrów komórek. Realizacja planowanych badań nie tylko znacznie zwiększy obecną wiedzę na temat wysokoentropowych materiałów anodowych, ale również doprowadzi do postępu w całej dziedzinie akumulatorów litowo-jonowych.