

Nasze społeczeństwo szeroko wykorzystuje urządzenia do magazynowania energii, począwszy od ich zastosowań w smartfonach i laptopach po środki komunikacji (samochody) i różnorodne zastosowania przemysłowe. Rozwój układów magazynowania energii jest obecnie bardzo ważnym zagadnieniem inżynierii materiałowej, ponieważ układy takie są kluczem do technologii umożliwiających wykorzystanie odnawialnych źródeł energii. Wraz ze wzrostem produkcji energii odnawialnej, rośnie zapotrzebowanie na wydajne systemy jej magazynowania, prowadząc do intensywnego rozwoju badań dotyczących technologii baterii. Bezpieczeństwo proponowanych rozwiązań technologicznych stało się pierwszoplanowym zagadnieniem. W tym kontekście baterie wykorzystujące nieorganiczne, stałociałowe elektrolity zamiast łatwopalnych organicznych ciekłych elektrolitów stanowią niezwykle obiecujące rozwiązanie. Elektrolity stałociałowe oferują szereg zalet w porównaniu z technologią opartą na elektrolitach ciekłych, w tym stabilność, wydajność i bezpieczeństwo.

Niestety większość super-jonowych materiałów nieorganicznych wykazuje dyfuzję jonową na poziomie typowych ciał stałych. W konsekwencji, tylko niewielka liczba spośród tysięcy takich materiałów jest rozważana jako potencjalne elektrolity - przykładami takich związków są: $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$, $\text{Li}_7\text{P}_3\text{S}_{11}$, $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{11}$, Li_3PS_4 lub LiBH_4 . Intrygujące jest to, że tych kilka materiałów wykazuje niezwykle szybką dyfuzję i wysoką przewodność - wyższą o kilka rzędów wielkości w porównaniu do standardowych ciał stałych i porównywalną z dyfuzją jonową w ciekłych elektrolitach. Przyczyna tego efektu nie została wyjaśniona. Brak wiedzy odnośnie mechanizmów dyfuzji jest konsekwencją dość niefortunnej tendencji w nauce o elektrolitach - większość badań poświęcona jest tylko syntezie nowych związków oraz ich charakterystyce elektrochemicznej, bez zadawania pytań o fizyczne przyczyny obserwowanych efektów. Z drugiej strony społeczność naukowa coraz bardziej uświadamia sobie, że dalszy postęp w technologii elektrolitów wymaga gruntownego zrozumienia mechanizmów dyfuzji jonowej na poziomie jonowym.

Świadomość ta przejawia się w coraz bardziej intensywnych próbach modelowania mechanizmów dyfuzji w ciałach stałych za pomocą metod obliczeniowych. Zasadniczo dyfuzję jonową w ciałach stałych można rozpatrywać jako sekwencję „skoków” poszczególnych jonów między dostępnymi miejscami sieci. Struktura krystaliczna materiału determinuje drogi dyfuzji i wartość energii potrzebnej do pokonania jej fragmentów (odcinków). Maksimum tej energii tworzy barierę (zaporę) dla ruchu jonów. Obliczenia z wykorzystaniem metod Dynamiki Molekularnej wskazują, że kluczem do szybkiej dyfuzji jest stymulowanie korelacji w ruchu jonowym - tj. tworzenie sytuacji, w której wiele jonów jednocześnie (w ciągu ps) przeskakuje do najbliższych dostępnych miejsc sieci. Chociaż to wyjaśnienie jest bardzo oryginalne i interesujące, jak dotąd opiera się wyłącznie na wynikach symulacji. Sugeruje się również, że ograniczenie wymiarowości dostępnych ścieżek dyfuzji może być przyczyną szybkiego ruchu translacyjnego jonów. Należy jednak pamiętać, że w przypadku wielu materiałów nie ma jednego mechanizmu dyfuzji, ale wiele procesów przebiega równolegle.

Wyjaśnienie mechanizmów dyfuzji jonowej wymaga unikalnych narzędzi eksperymentalnych i teoretycznych. Narzędziem takim jest relaksometria Magnetycznego Rezonansu Jądrowego (MRJ) w połączeniu z komplementarnymi metodami MRJ: dyfuzjometrią i spektroskopią oraz spektroskopią dielektryczną. Standardowe eksperymenty relaksacji MRJ są przeprowadzane dla pojedynczego pola magnetycznego (częstotliwości rezonansowej) w funkcji temperatury. W ramach tego projektu zostaną wykonane eksperymenty relaksacji MRJ w niezwykle szerokim zakresie pól magnetycznych obejmujących pięć rzędów wielkości: od około $30\mu\text{T}$ do 3T (odpowiada do przedziałowi częstości rezonansowych od 1 kHz do 120 MHz, w odniesieniu do ^1H) w zależności od temperatury i ciśnienia. Analiza wyników eksperymentów relaksacji MRJ prowadzonych w funkcji pola magnetycznego dostarcza unikalnych informacji o mechanizmach ruchu jonów i charakterze procesów dyfuzji. Informacje takie nie są możliwe do uzyskania innymi metodami. Ponieważ relaksacja spinowa jest zjawiskiem kwantowo-mechanicznym, aby wykorzystać ten unikalny potencjał eksperymentalny, konieczny jest równoległy rozwój modeli teoretycznych procesów relaksacji spinowej w stałociałowych elektrolitach. Niestety można przytoczyć liczne przykłady błędnych wniosków wyciągniętych z eksperymentów relaksacji MRJ interpretowanych w oparciu o niepoprawne modele teoretyczne. Sytuacja ta jest częstym powodem typowego rozczarowania wynikającego z niezrozumienia, że w klasycznych eksperymentach relaksacyjnych wykonywanych dla jednej (wysokiej) wartości pola magnetycznego nie jest możliwa obserwacja ruchu translacyjnego dalekiego zasięgu, w ten sposób zaobserwować można jedynie lokalną, szybką dynamikę niezwiązaną z przewodnością - szybki ruch lokalny nie jest zapowiedzią wysokiej przewodności. Wysoce oryginalnym elementem projektu są eksperymenty relaksacji MRJ w funkcji ciśnienia. Wysokie ciśnienie powoduje zmiany odległości między-jonowych. Skorelowany ruch z udziałem wielu jonów wymaga dużej dostępnej objętości - oznacza to, że efekty korelacji można „wygasić” stosując wysokie ciśnienia. W ten sposób po raz pierwszy będziemy mogli bezpośrednio zweryfikować koncepcję sugerującą, że skorelowana dynamika jonów jest przyczyną wysokiej przewodności. Przedstawiony projekt dotyczy jednego z fundamentalnych zagadnień naukowych - mechanizmu ruchu jonowego w ciałach stałych – mającego jednocześnie duże znaczenia technologiczne. Planowane badania łączą unikalną metodologię eksperymentalną z zaawansowanym modelowaniem teoretycznym.