

Stale zwiększająca się ilość otaczającej nas elektroniki, rosnące światowe zapotrzebowanie na energię, oraz postępujący kryzys klimatyczny wymuszają na nas ciągły rozwój nowych materiałów funkcjonalnych, charakteryzujących się wszechstronnymi właściwościami, przy równoczesnej możliwości ich dalszej optymalizacji pod kątem konkretnych wymagań technologicznych. Przykładem takich materiałów mogą być tlenkowe materiały o strukturze spinelu, których zastosowanie obejmuje szeroki zakres technologii, od codziennych urządzeń elektronicznych, poprzez katalizę, po nisko-emisyjne technologie transportu i konwersji energii. Powód ich popularności leży bezpośrednio w ich strukturze atomowej, umożliwiającej liczne interakcje pomiędzy pierwiastkami, prowadzące do generowania się interesujących właściwości, wynikających z synergii pomiędzy poszczególnymi składnikami. Jednak mimo tego, nieustające zapotrzebowanie na nowe, lepsze materiały, jest powodem dalszych poszukiwań innowacyjnych metod udoskonalania i kontrolowania ich właściwości użytkowych. Jedną z najnowszych koncepcji, mającą znaczący potencjał w tym zakresie, jest zastosowanie tzw. wysokoentropowego podejścia do projektowania materiałów, które szczególnie potęguje synergii pomiędzy elementami składowymi układu. Główną ideą tej koncepcji jest wykorzystanie relatywnie wysokiej liczby składników (>5), w stosunkach równomolowych lub do nich zbliżonych, co drastycznie zwiększa liczbę możliwych interakcji między nimi. Jednocześnie poprawiona zostaje stabilność takich układów poprzez zwiększenie wartości tzw. entropii konfiguracyjnej, parametru opisującego poziom nieuporządkowania struktury. Pomimo iż pierwsze tlenkowe materiały bazujące na tej strategii zostały otrzymane zaledwie 6 lat temu, w 2015 roku, zdążyły one udowodnić swój potencjał w obrębie licznych zastosowań, w tym w roli materiałów magnetycznych, katalizatorów, czy w technologiach konwersji energii takich jak stałotlenkowe ogniwa paliwowe (ang. *Solid-oxide fuel cells*, *SOFCs*) oraz baterie *Li-ion*. Niestety, pomimo często spektakularnych wyników, nasza wiedza na temat pochodzenia niezwykłych właściwości tych związków pozostaje bardzo ograniczona, co w dużej mierze wynika z niemal całkowitego braku danych dotyczących struktury atomowej tych materiałów. Głównym celem projektu jest rozwiązanie tego problemu poprzez zastosowanie wszechstronnego, multidyscyplinarnego podejścia, łączącego zaawansowaną charakterystykę eksperymentalną starannie dobranych spineli o wysokiej entropii z teoretycznym opisem tych układów, bazującym na kwantowej teorii funkcjonału gęstości (DFT).

Aby osiągnąć założone cele, projekt będzie się skupiał na staranie wybranych wysokoentropowych układach tlenkowych o strukturze spinelu, zaprojektowanych w celu podkreślenia różnych możliwych efektów w zakresie obsadzenia sieci krystalicznej. Po wnikliwej ocenie mikrostruktury i jednorodności materiałów, ich budowa na poziomie atomowym zostanie zbadana z wykorzystaniem szeregu metod spektroskopowych, wrażliwych na czynniki związane z magnetyzmem, walencyjnością i symetrią materiałów, takich jak: pomiary namagnesowania w technice VSM (ang. *vibrating-sample magnetometry*), pomiary zmiennoprądowej podatności magnetycznej (ang. *alternating-current (AC) susceptibility*), spektroskopie Mössbaueraowska i Ramana, XPS (ang. *X-ray photoelectron spectroscopy*), a także z wykorzystaniem metod synchrotronowych XAS (ang. *X-ray absorption spectroscopy*) oraz XMCD (ang. *X-ray magnetic circular dichroism*). Ich zastosowanie umożliwi szczegółowy opis stanu magnetycznego i walencyjnego poszczególnych jonów, a także dostarczy informacji o ich wzajemnym położeniu w strukturze. Dodatkowe wsparcie w zakresie interpretacji danych eksperymentalnych dostarczą obliczenia typu *ab-initio* DFT, które będą jednocześnie kluczem do uogólnienia wyników, dostarczając narzędzia o mocy predykcyjnej umożliwiającej świadome projektowanie materiałów, charakteryzujących się pożądanymi zestawami właściwości. Biorąc pod uwagę różnorodność możliwych zastosowań, a także stale rosnącą popularność materiałów o wysokiej entropii, można oczekiwać, że zebrane dane będą miały znaczący wpływ na szereg różnych dziedzin nauki, od elektroniki po technologie konwersji energii, przyczyniając się do dalszego rozwoju nowej generacji materiałów funkcjonalnych.