

Akumulatory litowo-jonowe (LIB) stały się kluczową technologią w dążeniu do bardziej ekologicznej i zrównoważonej przyszłości. Te rozwiązania do magazynowania energii zrewolucjonizowały różne branże, w tym pojazdy elektryczne, systemy energii odnawialnej i przenośną elektronikę. Rosnące zapotrzebowanie na czystsze źródła energii, w połączeniu z Europejskim Zielonym Ładem i zobowiązaniem Organizacji Narodów Zjednoczonych do ograniczenia wzrostu temperatury do 1,5 stopnia Celsjusza, przyczyniło się do szybkiego rozwoju rynku akumulatorów litowo-jonowych. Naukowcy i producenci starają się, aby ogniwa były wydajniejsze, tańsze i bezpieczniejsze.

Jednym z priorytetów ostatnich badań było ograniczenie zawartości kobaltu, ze względu na jego toksyczność, cenę oraz etyczne wątpliwości dotyczące jego wydobywania. Z powodu ich wysokiej pojemności dużą popularnością cieszą się materiały oparte na niklu. Jednakże ich niestabilność cykliczna oraz termiczna jest problemem, który należy rozwiązać. W związku z tym dąży się do zrozumienia zmian zachodzących podczas cykli ładowania i rozładowania ogniwa. Jest to bardzo złożony proces i wymaga wnikliwych badań wieloma metodami. Jedną z metod pomocnych w rozwikłaniu tego problemu jest spektroskopia Ramana. Wykorzystanie tej techniki *in situ* (podczas pracy ogniwa) może pokazać zmiany strukturalne takie jak przejścia fazowe i degradacje struktury zachodzące podczas interkalacji i deinterkalacji jonów litu w strukturze materiału. Jednak, aby w pełni przeanalizować powstałe widmo potrzebne są informacje dotyczące położenia poszczególnych pików występujących w widmie.

Głównym celem tego projektu jest analiza położenia pików odpowiadający za poszczególne wiązania w litowanym tlenku niklu manganu i kobaltu (NMC). Problem ten jak dotąd był poruszany także poprzez obliczenia metodami mechaniki kwantowej, ale jak dotąd uzyskane wyniki są obciążone dużym błędem. Proponowane rozwiązanie pozwoli to na uproszczenie analizy widm Ramana, a także na wyciągnięcie większej ilości informacji z w ten sposób wykonywanych badań. Aby osiągnąć zamierzony cel zostaną wykorzystane materiały o różnym stosunku niklu do manganu i na podstawie zmian w wyglądzie widm zostanie wyznaczone położenie poszczególnych pików. Podejście do rozwiązania tego problemu jest innowacyjne, a uzyskanie szukanych informacji będzie rewolucją w tej dziedzinie.