



Tytuł pracy doktorskiej:

Struktura elektronowa nowych materiałów na ogniwa jonowe

Promotor: prof. dr hab. inż. Janusz Tobała (email: tobola@ftj.agh.edu.pl)

Ogniwa galwaniczne znane są ponad 200 lat, ale dopiero w ostatnich 30 latach tradycyjne baterie chemiczne mogły być zastąpione przez nowoczesne ogniwa oparte na stałych przewodnikach litowych, bez których trudno sobie wyobrazić funkcjonowanie współczesnych urządzeń mobilnych. Elektroдами tych akumulatorów są materiały oparte przede wszystkim na tlenkach metali przejściowych, w których Li jest słabo chemicznie związany (np. LiFeS_2 , LiCoO_2 czy LiFePO_4), co umożliwia efektywną interkalację lub deinterkalację jonów Li^+ podczas procesów ładowania lub rozładowania. Intensywne prace teoretyczne w ostatnim czasie pokazały, że siła elektromotoryczna (SEM) i charakter jej zmian zmierzona dla takiego ogniwa jonowego, silnie zależy nie tylko od własności strukturalnych elektrody (pojawianie się przejść fazowe przy zmianie zawartości Li w układzie), defektów struktury krystalicznej, ale też bezpośrednio od własności elektronowych (np. wielkość przerwy zabronionej, energii układu, rola korelacji elektronowych, kształt funkcji gęstości stanów). Zrozumienia mechanizmów odpowiedzialnych za charakter krzywych ładowania/rozładowania takich układów można się spodziewać na podstawie obliczeń „z pierwszych zasad”, jeśli w sposób realistyczny weźmie się pod uwagę nieporządek chemiczny w układzie (np. nieporządek na pozycji Li lub wakacje na pozycjach O). Dodajmy, że niedoskonałości struktury silnie wpływają na stany elektronowe w pobliżu energii Fermiego. Okazuje się, że charakter energetycznych zmian położenia potencjału chemicznego na krzywych gęstości stanów elektronowych można do pewnego stopnia skorelować z charakterem obserwowanych krzywych ładowania/rozładowania baterii. To dość odkrywcze stwierdzenie spowodowało, że obliczenia struktury elektronowej stają się skutecznym narzędziem poszukiwania układów (nie tylko z zawartością Li) o spodziewanych charakterystykach SEM na ogniwa jonowe - co byłoby głównym celem pracy doktorskiej. Prace teoretyczno-obliczeniowe prowadzone będą w bliskiej współpracy z grupą eksperymentalną z WEP AGH.