

## PROGETTO DI RICERCA

Il candidato dovrà applicare metodi spettroscopici ed elettrochimici per lo studio operando ed ex-situ di nuovi materiali elettrodici per batterie al sodio. I materiali scelti appartengono alla classe degli ossidi ad alta entropia. Gli studi verteranno di diffrazione di raggi x ed assorbimento di raggi X. Sono previste analisi dei dati e analisi/implementazione dei vari setup sperimentali.

## PIANO DI LAVORO

Le batterie a base di sodio, e in particolare le batterie agli ioni di Na (SIB), sono tra i materiali emergenti alternativi ai tradizionali sistemi al litio (LIB). In questo contesto, gli ossidi ad alta entropia (HEO) stanno raccogliendo un costante interesse scientifico grazie alla loro unica struttura e nuove funzionalità nello stoccaggio e nella conversione dell'energia. Sono ossidi multicomponenti basati sul concetto di stabilizzazione di fase mediata dall'entropia.

Nanofibre di (MgCoNiCuZn) HEO sono state utilizzate con successo come materiale anodico per LIB, mostrando una buona ciclabilità a lungo termine (390 mAh g<sup>-1</sup> dopo 300 cicli a 0,5 A g<sup>-1</sup>). Infatti, grazie alla sua semplicità, versatilità, convenienza, scalabilità e idoneità alla produzione su scala industriale, l'elettrofilatura è una delle tecniche più ampiamente adottate per la produzione di nanostrutture ad elevata porosità per applicazioni nel campo della stoccaggio e conversione dell'energia.

Lo sviluppo di tali materiali attivi per le batterie richiede inoltre una profonda comprensione delle loro proprietà durante il funzionamento della batteria. In questo contesto, le tecniche spettroscopiche e di spettroscopia ex-situ come i metodi a raggi X rappresentano uno strumento prezioso, abbinato alle convenzionali analisi ex-situ, nello studio dei materiali delle batterie. In particolare, mentre la peculiare selettività della spettroscopia di assorbimento dei raggi X (XAS) per le specie atomiche consente il monitoraggio della loro struttura locale e lo stato di ossidazione, il dominio strutturale a lungo raggio può essere sondato mediante diffrazione di raggi X (XRD). Completano il quadro le informazioni morfologiche come il SEM.

## TITLE

Operando and ex situ characterisation of high entropy oxide for sodium batteries.

## RESEARCH PROJECT (summary)

Sodium-based batteries, and in particular Na-ion batteries (SIBs), are among the emerging chemistries, because of their low cost, similar chemistry with traditional lithium systems (LIBs), and precursor's abundance on the earth's crust. This emerging cell technology based on organic solvent or aqueous electrolytes can use existing Li-ion production lines and could reach energy densities close to current LIBs if high performance positive electrode materials can be identified.

In this context, high entropy oxides (HEOs) are gathering consistent scientific interest due to their unique structure, enhanced properties, novel functionalities, and potential for application in energy storage and conversion. They are multicomponent oxides based on the entropy-mediated phase-stabilization concept.

Spun nanofibers of (MgCoNiCuZn) HEO were successfully used as anode material for LIBs, showing good long-term cyclability (390 mAh g<sup>-1</sup> after 300 cycles at 0.5 A g<sup>-1</sup>). In fact, thanks to its simplicity, versatility,

cost-effectiveness, scalability and suitability for the manufacturing on an industrial scale, electrospinning is one of the most widely adopted techniques for the production of high porosity and aspect ratio nanostructures for applications in the field of energy storage and conversion.

Developing rational guidelines for technological advances in the field of active materials for batteries also requires a deep understanding of their evolving properties and chemistry during battery operation. In this context, operando and ex-situ spectroscopy techniques such as x-ray methods represent an invaluable tool, coupled to conventional ex-situ analyses, in the study of battery materials. In particular, while the strong selectivity of x-ray absorption spectroscopy (XAS) for atomic species allows monitoring their local structure and oxidation state, the long-range domain is monitored by x-ray diffraction (XRD) measurements. The picture is completed by the morphological and structural information conveyed by microscopical technique such as SEM.