

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИГОДНОСТИ СИЛИЦЕНА НА ПОДЛОЖКАХ Cu(111) И Al(111) В КАЧЕСТВЕ МАТЕРИАЛА АНОДА ДЛЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Иваничкина К.А., Галашев А.Е.

*Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук,
620990, Екатеринбург, Академическая 20
e-mail: ivanichkina@ihte.uran.ru*

Силицен – двумерный материал, аналогично графену имеет сотовую структуру с атомами кремния в узлах гексагональной элементарной ячейки. Способность кремния удерживать большое количество лития делает силицен перспективным материалом анода для литий-ионных батарей (LIB)¹.

В работе методом молекулярной динамики моделируется процесс интеркаляции и деинтеркаляции Li^+ в двухслойном силицене на подложках Cu(111) и Al(111). Оцениваются коэффициенты самодиффузии лития, внутренняя энергия систем, механическая прочность. Детальная структура силицена исследуется методом построения многогранников Вороного. Возникающие в силицене напряжения σ_{zz} ни для одной из систем не превышают предела прочности материала ($\sim 15 \text{ ГПа}^2$).

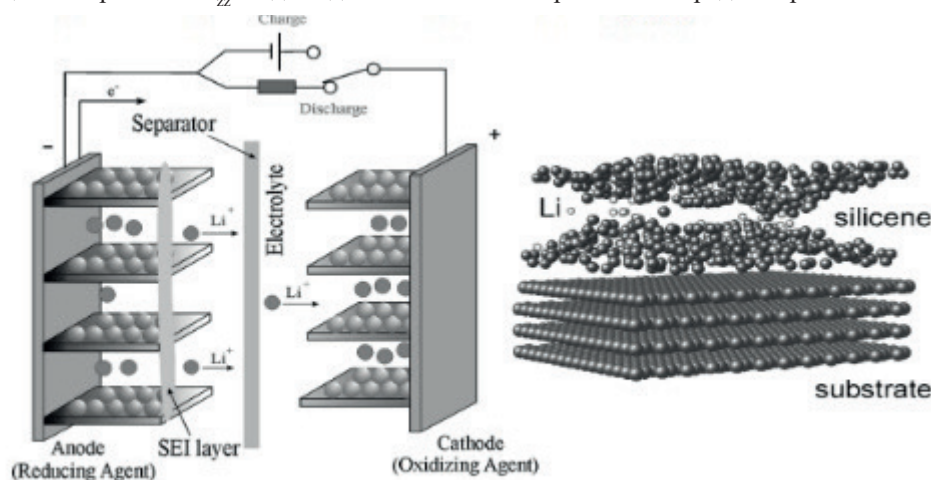


Рисунок 1. Схематичное представление принципа действия LIB (слева), моделируемая система: часть анода LIB (справа).

Литература

1. Tritsaris G., Kaxiras E., Meng Sh., Wang E. Nano Letters, 2013, 13, 2258.
2. Chavez-Castillo M. R., Rodriguez-Mezab M.A., Meza-Montes L., RSC Advances, 2015, 5, 96052.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 16-13-00061.