

Отчёт о выполнении 2-го (заключительного) этапа работ по проекту

**«Механизмы массопереноса
в поликристаллическом литии»**

в рамках гранта Президента Российской Федерации № МК-3049.2022.1.3

руководитель проекта

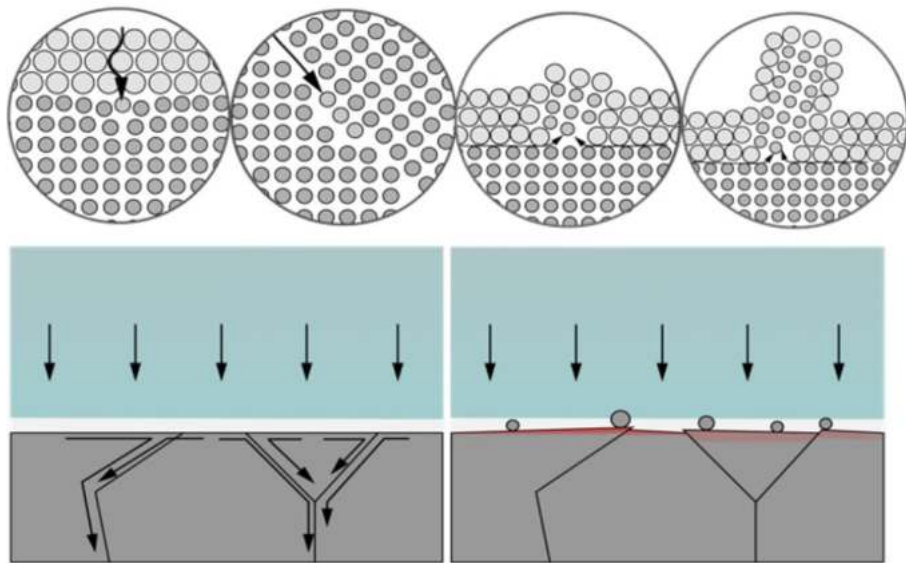
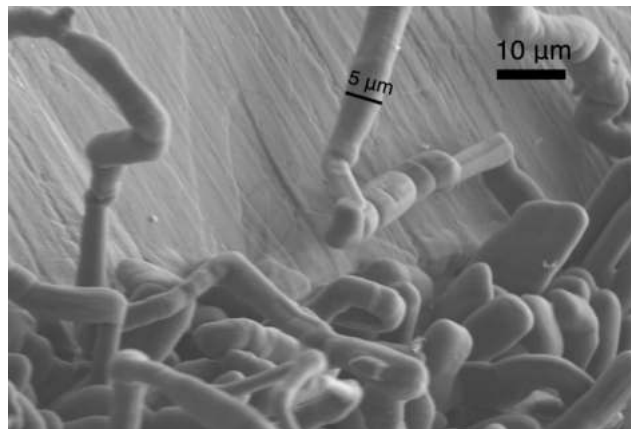
с.н.с. лаб. химических источников тока

к.ф.-м.н Сергеев Артём Вячеславович

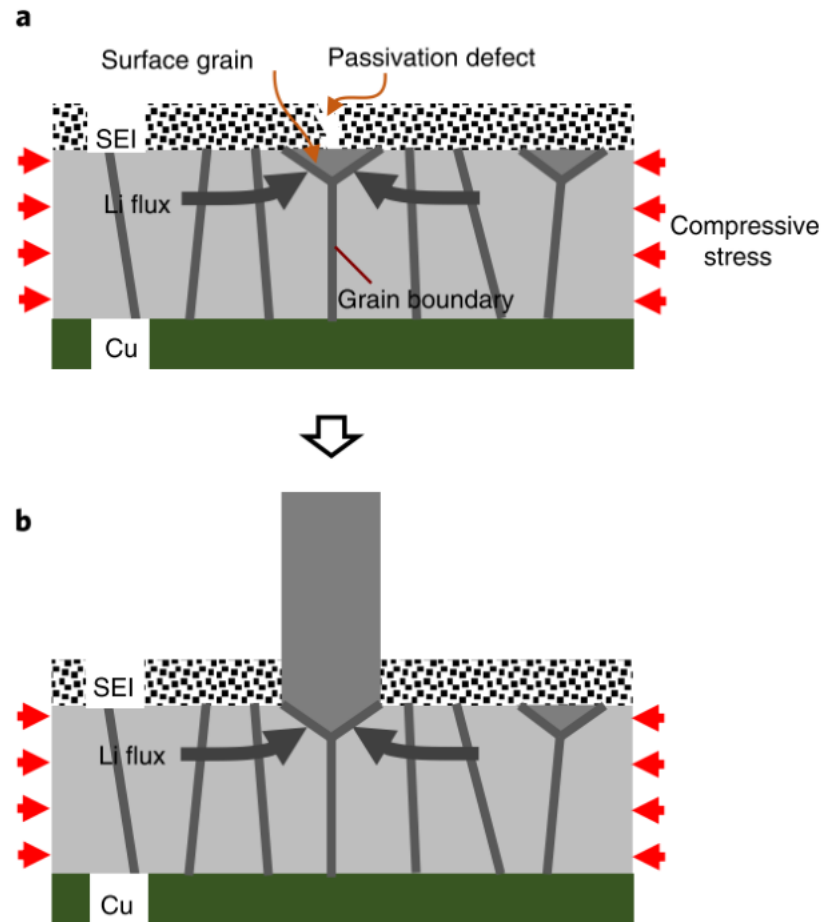
Москва, ФИЦ ХФ РАН

декабрь 2023 г.

Рост вискеров на литиевых анодах

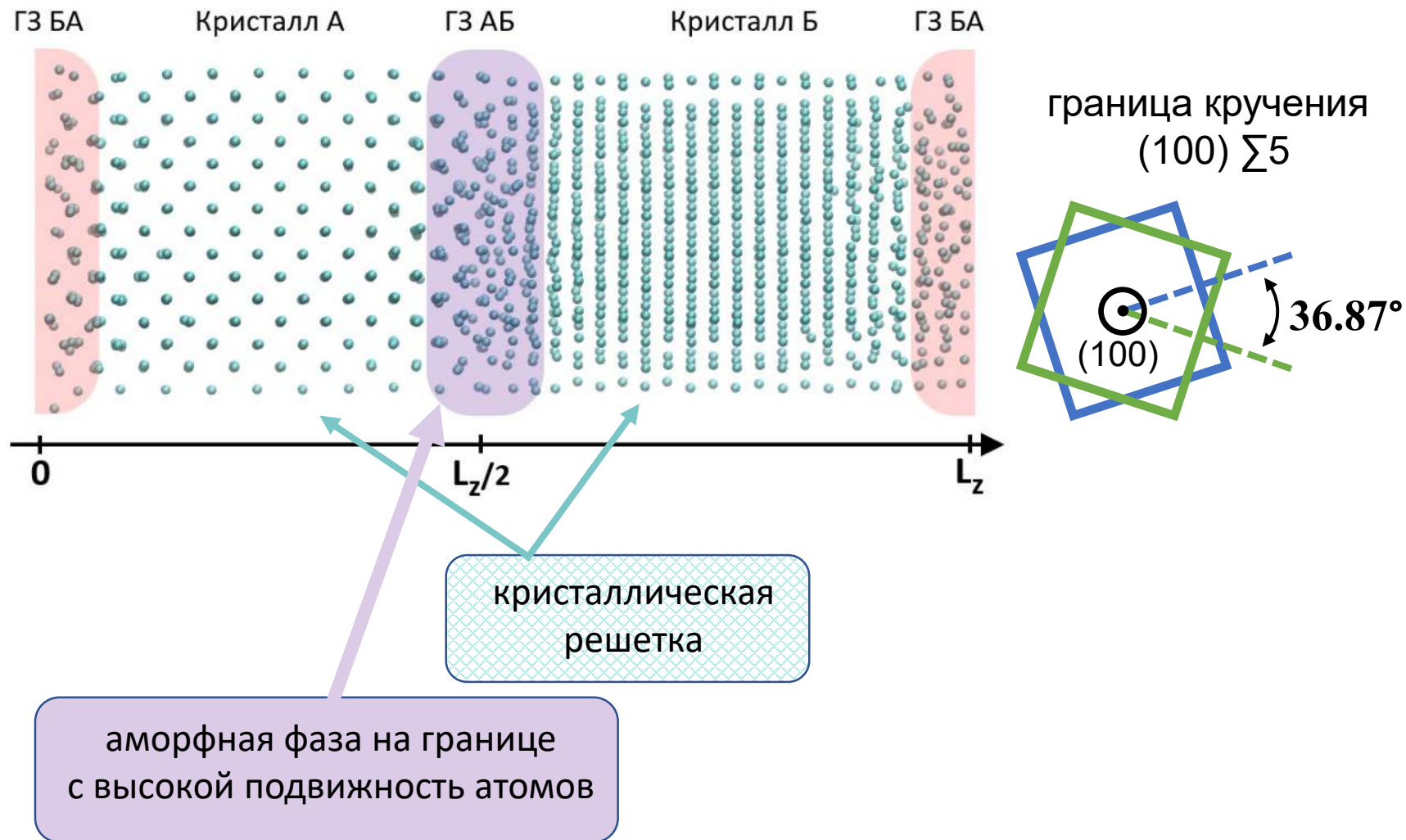


*Rulev A.A. et al. // J. Phys. Chem. Lett. 2020. Vol. 11, No 24. P. 10511–10518.



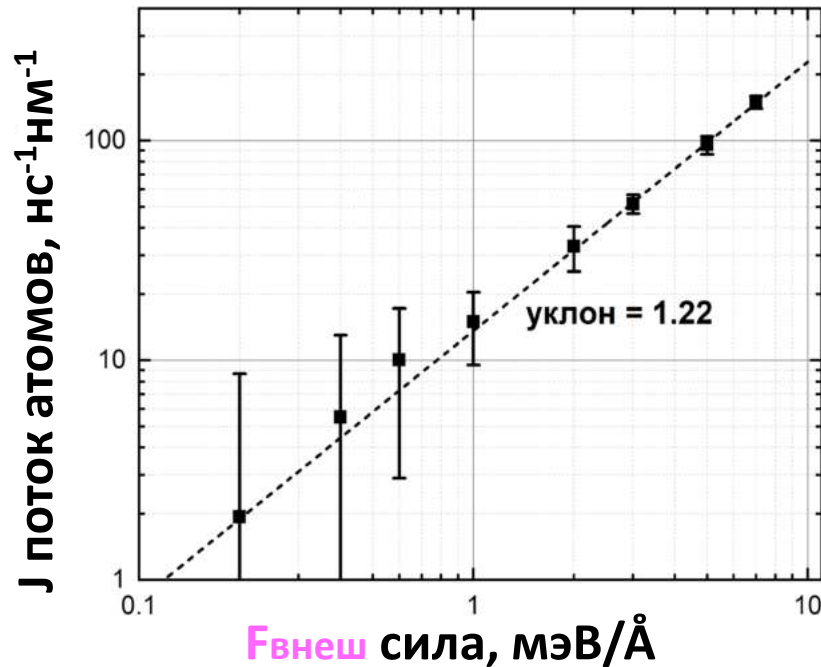
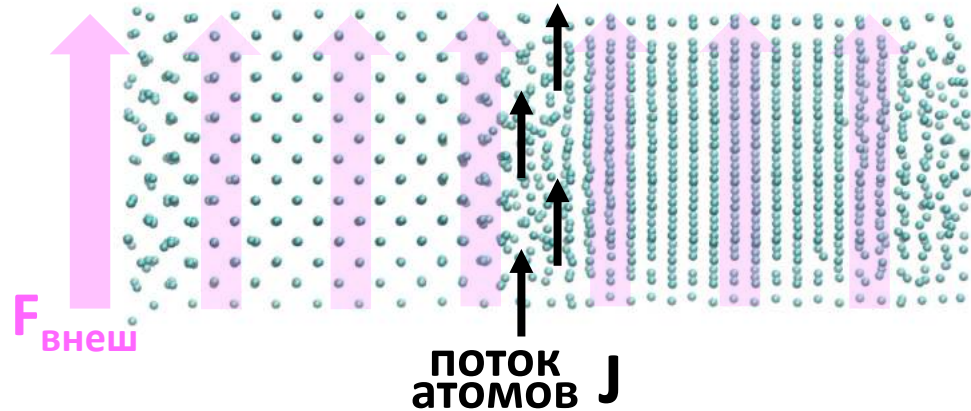
**Wang X. et al. // Nat. Energy. Springer US, 2018. Vol. 3, No 3. P. 227–235.

МД моделирование границы зерен



Расчёт потока атомов по границе зёрен

Наложение внешней силы вызывает упорядоченный поток атомов по границе



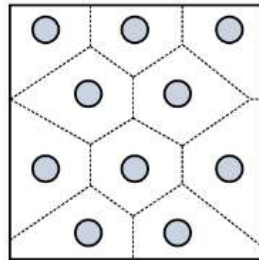
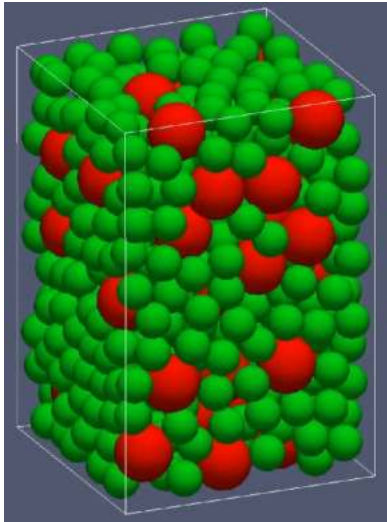
Поток почти линейно пропорционален градиенту свободной энергии



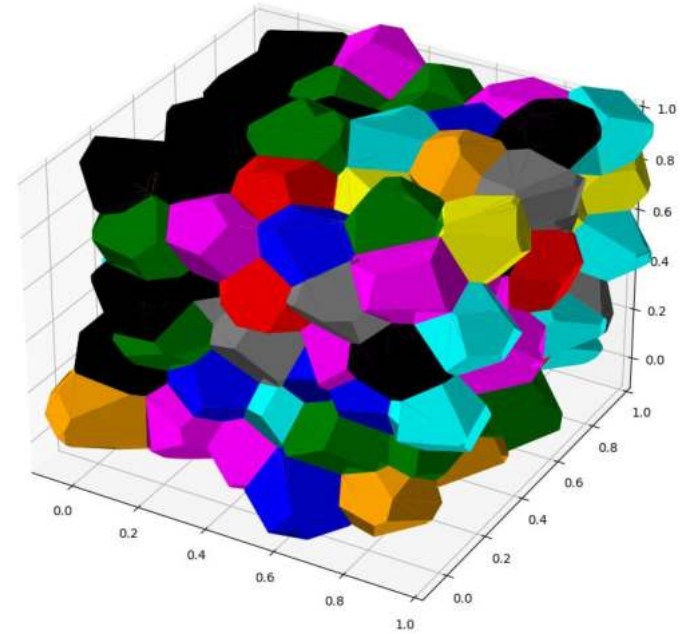
Аналогия с течением вязкой жидкости в плоской щели:

$$J \sim \frac{\partial P}{\partial x} \left(\frac{d^3}{\mu} \right)$$

Пропускная способность сетки границ зёрен



Разбиение Вороного



Модель структуры поликристалла



S - удельная площадь границ зёрен [$\text{м}^2/\text{м}^3$]

Случайная упаковка сфер
(метод дискретных элементов)

Проницаемость пористой среды $K_{\text{пор}}$

$$J_{\text{пор}} = K_{\text{пор}} \frac{\partial P}{\partial x} \frac{1}{\mu} \quad K_{\text{пор}} \sim d^3 S$$

$$\underline{J_{\text{пор}} \approx 1.1 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1} \text{ мм}^{-2}}$$

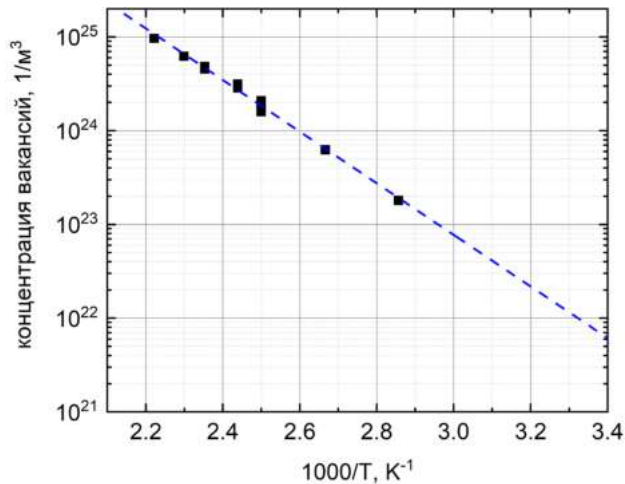
Массоперенос за счёт точечных дефектов

Вакансии

Коэффициент
диффузии D

$$2.84 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$$

Равновесная концентрация дефектов:

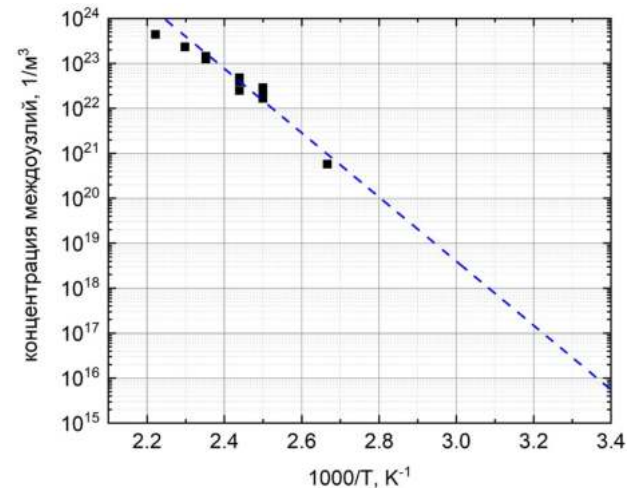


Оценка плотности потока:

$$7.8 \cdot 10^{17} \text{ с}^{-1}\text{мм}^{-2}$$

Междоузлия

$$1.69 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$$



$$6.5 \cdot 10^{19} \text{ с}^{-1}\text{мм}^{-2}$$

Выводы

- Разработана методология оценки вкладов границ зёрен и точечных дефектов в массоперенос в поликристалле
- Поток атомов по границе зёрен хорошо описывается моделью вязкого течения
- Вклад транспорта по границам зёрен на несколько порядков меньше, чем от точечных дефектов

Результаты 2-го года представлены на конференциях:

- 8-й Азиатский симпозиум по передовым материалам (ASAM-8, 03-07 июля 2023 г., Новосибирск)
- Всероссийская конференция по электрохимии с международным участием «Электрохимия-2023» (23-27 октября 2023г., Москва).