

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОИСК НОВЫХ ТВЕРДЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ ДЛЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ И ПОСТ- ЛИТИЕВЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Вероятным способом дальнейшего повышения удельной емкости хранения энергии в литий-ионных аккумуляторах является использование металлического анода и твердого электролита (ТЭ), то есть переход к полностью твердотельным аккумуляторам. Кроме того, актуальна задача поиска ТЭ для так называемых пост-литиевых аккумуляторов, к которым прежде всего относятся аккумуляторы с щелочными ионами: натрием и калием. Переход к твердотельным аккумуляторам также повысит безопасность, однако подбор подходящих материалов твердого электролита является сложной задачей.

Современные теоретические методы позволяют эффективно находить материалы с требуемыми свойствами. В данной работе мы представляем краткий обзор таких методов, которые включают в себя анализ свободного кристаллического пространства, метод валентных усилий связи и кинетическое Монте-Карло моделирование, расчеты методом теории функционала плотности [1]. Также мы покажем примеры прогнозирования энергии активации диффузии с помощью машинного обучения.

В частности, с помощью указанных теоретических методов была проанализирована база данных ICSD с целью поиска халькогенидов с натрий-ионной проводимостью [2], а также исследованы нитриты щелочных металлов, которые представляют интерес в качестве нового класса ТЭ.

Исследование нитритов щелочных металлов выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-20115, <https://rscf.ru/project/25-73-20115>

ЛИТЕРАТУРА

1. Kabanov, A.A., Computational design of materials for metal-ion batteries / A.A. Kabanov, Y.A. Morkhova, I.A. Bezuglov, V.A. Blatov // In Comprehensive Inorganic Chemistry III – 2023. – С. 404-429.

2. Morkhova Y.A., A set of new promising solid chalcogenides for Na-ion batteries: yield from the crystal chemical, Monte-Carlo and quantum-chemical calculations / Y.A. Morkhova, A.V. Antonyuk, A.A. Kabanov, V.A. Blatov // ChemPhysChem. – 2024. – 25, 18. – e202400067.