

**Исследование влияния морфологии углеродной поверхности на кинетику  
гетерогенных процессов в Li-воздушных аккумуляторах**

С.В. Павлов<sup>1,2</sup>, С.А. Кисленко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Рост использования устройств, обладающих высоким энергопотреблением, требует разработки новых аккумуляторов с улучшенными характеристиками. Li-воздушные аккумуляторы вызывают особый интерес в виду их высокой теоретически достижимой удельной энергоемкости, составляющей 1700 Вт ч/кг против 170 Вт ч/кг для наиболее востребованных сегодня Li-ионных аккумуляторов [1, 2]. Однако существует ряд проблем, препятствующих созданию прототипов с такими высокими характеристиками. В частности, остается малоизученным вклад морфологии поверхности катода на кинетику гетерогенных процессов, происходящих в подобных системах.

В настоящей работе методом классической молекулярной динамики исследовалась структура межфазной границы электрод/электролит вблизи следующих модельных катодов: графит с параллельной и перпендикулярной ориентацией базальных плоскостей относительно межфазной границы и нанополоска графена. В качестве растворителя исследовался ацетонитрил. Получены распределения массовой плотности ацетонитрила вблизи модельных катодов, а также распределения плотности заряда. Исследована ориентационная упорядоченность растворителя. Установлено качественное влияние морфологии углеродного катода на структуру межфазной границы, и как следствие на распределение реагентов реакции восстановления кислорода  $\text{Li}^+$  и  $\text{O}_2$ . Получены профили свободной энергии  $\text{Li}^+$  и  $\text{O}_2$  вблизи моделируемых катодов. Обнаружено увеличение концентрации реагентов реакции восстановления кислорода вблизи края графена по сравнению с плоскостью графена, а также ускоренная кинетика их адсорбции, что может объяснять повышенное образование продуктов реакции на краях графенов при разрядке Li-воздушных аккумуляторов, наблюдаемое в экспериментах.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-50-00124 «Фундаментальные основы энергетики будущего»

Литература:

1. *Zheng J.P. et al.* Theoretical Energy Density of Li–Air Batteries // Journal of The Electrochemical Society. 2008. V. 155, N 6. P. A432-A437
2. *Girishkumar G. et al.* Lithium–Air Battery: Promise and Challenges // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2010. V. 1, N 14. P. 2193-2203