

Квантово-механический расчет характеристик силицевого анода для Na-ионных батарей

© Галашев*⁺ Александр Евгеньевич и Воробьев Алексей Станиславович

Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук.
ул. Академическая, 20. г. Екатеринбург, 620990. Россия. Тел.: (343) 362-31-43. E-mail: galashev@ihte.uran.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: теория функционала плотности, силицен, натрий.

Аннотация

По мере того, как производство и потребительский спрос на электромобили набирает обороты, литий становится в значительной степени дефицитным металлом, следовательно, еще более дорогим. Na-ионные батареи являются перспективными кандидатами на замену литий-ионных батарей в крупномасштабных применениях из-за преимуществ в природном изобилии и стоимости Na. Натриевые аккумуляторы имеют значительно более длинный срок службы по сравнению с литиевыми и оказываются более стабильными. В частности, можно подвергнуть натрий-ионный аккумулятор глубокой разрядке, существенно не повредив его. Натриевое электрохимическое устройство в отличие от литиевого не является пожароопасным. Переход от литий-ионных к натриевым батареям приведет к увеличению мощности электрохимических источников тока и скорости их зарядки. Натрий-ионные элементы могут обеспечивать более высокий заряд и разрядный ток, что является явным преимуществом для применения в электрических транспортных средствах. Силицен имеет большой потенциал для использования в качестве анода как в литий-ионных батареях, так и в натрий-ионных источниках тока, но до сих пор не получил внимания в отношении ионных аккумуляторов. На основе первых принципов теории функционала плотности изучено взаимодействие атомов Na и Li с автономным силиценом. Такие расчеты позволяют сравнивать поведение ионов Na или Li на кремниевых пленках. Сначала мы определили наиболее устойчивые места адсорбции и их соответствующие энергии связи для одного Na или Li атома на рассматриваемых мембранах. Затем мы постепенно увеличиваем концентрацию этих атомов до достижения полного насыщения поверхностей. Помимо энергии адсорбции рассчитаны также длины связей Si-Na для разных местоположений адсорбированных атомов щелочного металла. Вычислен спектр плотности электронных состояний для каждой рассматриваемой системы. Интегрирование по энергии этой функции дает число электронов, содержащихся в области, приписываемой атому. В приближении обобщенного градиента рассчитывается зонная структура системы «силицен/Na». Металлическая проводимость возникает в результате полной односторонней адсорбции атомов Na на силицене.