سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
مطالعه و مدلسازی اثر نفوذ یون لیتیوم در کاتدهای با ساختار اکسید لایه ای 2 جزیی با روش دینامیک مولکولی MD

محل انتشار:
دومین همایش ملی علوم و فناوری های نوین ایران (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:
محسن نجفی - *پژوهشگر*

میلاد قربانزاده - *استاد راهنما*

خلاصه مقاله:
لیتیوم ، کبالت ، اکسید LiCoO2 لیتیوم منگنز اکسید LiMnO2 و لیتیوم نیکل اکسید LiNiO2 به عنوان اکسیدهای لایه ای لیتیوم برای استفاده در باتری های قابل شارژ یون لیتیوم به عنوان مواد کاتدی بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. درک نفوذ یون لیتیوم در این مواد در مقیاس مولکولی، برای بهینه سازی خواص آنها بسیار حایز اهمیت می باشد. روش شبیه سازی دینامیک مولکولی MD برای بررسی نفوذ یون لیتیوم در مقیاس مولکولی می تواند مورد استفاده قرار گیرد. در این پژوهش به منظور تعین ضریب نفوذ، با استفاده از روش شبیه سازی MD نفوذ بون لیتیوم درون مواد کاتدی LiNiO ، LiCoO2 و LiMnO2 شبیه سازی شده است. بر مبنای نتایج بدست آمده ضرایب نفوذ یون لیتیوم در موباد کاتدی از مرتبه 10 (-3) است همچنین نتایج حاکی ازاین بود که میزان ضریب نفوذ پس از گذشت زمان بسیار کم در حد نانو ثنیه ثابت شد مزان نفوذ در مواد کاتدی اکسید نیکل، منگنز و کبالت به ترتیب بیان شده کاهش یافت نتایج در نمودارهای انرژی پتانسیل و انرژی کل نشان می دهند که ساختار LiMnO2 داری سطح انرژی منفی تری است بنابرای این ساختار ساختار پایدارتری نسبت به سایرین برای نفوذ Li خواهد بود با مقایسه ی ضریب نفوذ یون لیتیوم در راستاهای گوناگون مشخصض گردید که حرکت یونهای لیتیوم در راستای عمود بر لایه های LiCoO2 به مقدار محسوسی دشوارت از نفوذ و جنبش یونهای لیتیوم در راستای موازی با لایه ها می باشد.

کلمات کلیدی:
باتری یون - لیتیوم، شبیه سازی دینامیک مولکولی، لیتیوم -نیکل ، کبالت، منگنز، اکسید، ضریب نفوذ

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/583471