

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИЛИЦЕН-ГРАФИТОВОГО АНОДА, ПОДВЕРГНУТОГО НЕЙТРОННОМУ ТРАНСМУТАЦИОННОМУ ЛЕГИРОВАНИЮ

Галашев А.Е.^(1,2), Иваничкина К.А.^(1,2)

⁽¹⁾ Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН
620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

⁽²⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

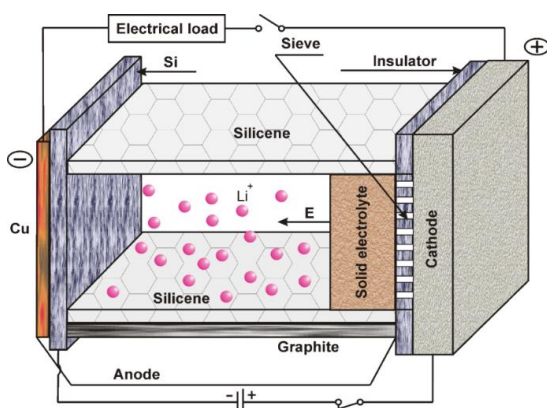
Силицен - двумерная аллотропная модификация кремния, имеющая подобно графену, гексагональную ячеистую структуру. В отличие от объемного кремния, двумерный силицен не деградирует в процессе циклов литизации/делитизации.

Нами была предложена конструкция анода ЛИА, выполненного из силицен-графитового композита, подвергнутого нейтронно-трансмутационному легированию (НТЛ). Реакция, с последующим формированием донорной примеси (фосфора) в силиценовом образце выглядит как



Вместе с тем, при нейтронном облучении в графитовой подложке по аналогичному механизму образуется легирующая добавка – азот.

В данной работе методом классической молекулярной динамики (МД) были исследованы процессы интеркаляции /деинтеркаляции лития в силиценовом канале, находящемся на графитовой подложке, при условии, что предварительно композит был подвергнут НТЛ. Конструкция рассматриваемой нами электрохимической ячейки схематично представлена на рисунке.



Схематичное представление ЛИА с анодом на основе силицена

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 16 – 13 – 00061).