

РЕФЕРАТ

Отчет по преддипломной практике: 29 страниц, 7 рисунков, 1 таблица, 30 литературных источников.

Цель работы: Моделирование структур LiFePO_4 , оценка, на основе проведенных расчетов, возможности их дальнейшего применения в литиевых источниках тока.

Объект исследования: Система LiFePO_4 .

Методы исследования: Исследование осуществлялись с помощью квантово-химического моделирования в лицензионном программном пакете Virtual NanoLab в рамках метода функционала плотности (DFT).

Практическое значение: Полученная модель может быть использована при разработке новых катодных материалов для литиевых аккумуляторов.

Результаты и их новизна: Проведенные исследования свидетельствуют о том, что накопление лития на поверхности является причиной его медленной диффузии, а именно лимитирующей стадией перехода с поверхности в приповерхностных слоях. Результаты работы определяют направление дальнейших исследований в этой области.

LiFePO_4 , МОДЕЛИРОВАНИЕ, VIRTUAL NANOLAB, ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ, МЕТОД УПРУГОЙ ЛЕНТЫ, ДИФФУЗИЯ