

陈翥¹, 沈忠慧¹

¹清华大学

Abstract

COMSOL在研究锂金属固态电池负极界面问题的应用

陈翥[1] 沈忠慧[1]

[1] 清华大学, 北京, 中国

锂金属固态电池中, 枝晶生长刺穿电解质导致电池短路是电池失效的重要因素之一。研究表明在 Poly(vinylidene difluoride) (PVDF)-based 固态电解质和锂负极界面会形成稳定非均一纳米界面层, 起到高电流密度下自开路作用, 从而避免过流引起的安全问题。

通过飞行时间二次离子质谱(TOF-SIMS), X射线光电子能谱分析(XPS), 俄歇电子能谱(AES) 确定出PVDF-LiFSI|Li界面层是由Li₂CO₃, LiF, Li₂O和硫化物形成的非均匀马赛克结构。这种多相结构以Li₂CO₃为基, 存在Li₂CO₃-LiF, Li₂CO₃-Li₂S和LiF-Li₂S三种界面。为了对这种多相非均匀结构的离子电导率和电子电导率进行模拟, 设计出了一种二维砖块近似结构, 目的是为了能够涵盖单相和相界面性质。再提供单相和两相界面的电导率性质从而可以预测多相界面层的可能导电性质。这一模型和实验协同解释了在锂金属聚合物固态电池负极侧界面的自保护原因。

图1 负极界面层模拟模型

参考文献

[1] Zhang X, Wang S, Xue C, et al. Self-Suppression of Lithium Dendrite in All-Solid-State Lithium Metal Batteries with Poly(vinylidene difluoride)-Based Solid Electrolytes[J]. Advanced Materials, 2019.

Figures used in the abstract

Figure 1: 图1 负极界面层模拟模型