**Захарченко, Татьяна Константиновна.**

## Влияние растворителя электролита на механизм процессов разряда литий-кислородного аккумулятора : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.21; 02.00.05 / Захарченко, Татьяна Константиновна; [Место защиты: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова]. - Москва, 2019. - 168 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Захарченко Татьяна Константиновна

Список условных обозначений

Введение

Глава 1. Обзор литературы

1.1. Литий-кислородные аккумуляторы

1.2. Реакции, протекающие при разряде ЛКА

1.2.1 Механизмы реакции восстановления кислорода

1.2.2. Влияние природы растворителя на механизм РВК в присутствии Li+

1.2.3. Пассивация поверхности электрода продуктами разряда ЛКА

1.2.4. Деградация растворов электролитов в процессе разряда ЛКА

1.3. Процессы осаждения пероксида лития в Li-O2 ячейках

1.3.1. Формы роста пероксида лития, образующегося в процессе разряда ЛКА

1.3.2. Механизмы формирования мезокристаллов Li2O2

1.3.3. Влияние различных параметров на процесс осаждения Li2O2 в ходе разряда

1.4. Процессы осаждения пероксида лития в пористом электроде. Влияние различных параметров на емкость ЛКА

1.5. Заключение

Глава 2. Методики, использованные в работе

2.1. Сборка ячеек и электрохимические измерения

2.1.1. Ячейки с дисковыми электродами

2.1.2. Ячейки для исследования морфологии продукта и емкости ЛКА

2.1.3. Ячейка для in situ РФЭС анализа

2.1.4. Ячейка для in situ рентгеновской дифракции

2.2. Синтез и исследование модельных соединений

2.2.1. Получение тонких слоев Li2O2 и KO2 в СВВ и их экспозиция в парах ацетонитрила

2.2.2. Получение пероксида лития химическим методом из KO2

2.2.3. Определение растворимости Li2O2

2.3. Инструментальные методы исследования

2.3.1. РФЭ-спектроскопия

2.3.2. Малоугловое рассеяние нейтронов

2.3.3. Рентгеновская дифракция

2.3.4. Электронная микроскопия

2.3.5. Спектрофотомерия в видимой области

2.3.6. Каппилярная конденсация азота при 77 К

2.3.7. Спектроскопия комбинационного рассеяния

2.4. Характеристики пористых углеродных катодных материалов

2.5. Квантово-химическое моделирование

2.6. Метод деконволюции для разделения различных вкладов в ток диска на ВДЭК

2.6.1. Теоретическая основа метода

2.6.2. Применение метода для анализа процессов на ВДЭК

2.6.3. Расчёт и корректировка импульсной характеристики

2.6.4. Фильтрация шума

2.6.5. Результаты модельных экспериментов

Глава 3. Результаты исследования реакций, протекающих при разряде ЛКА

3.1. Влияние растворителя на величину константы скорости первого электронного переноса в РВК

3.2. Относительная устойчивость надпероксидных частиц в электролите и энергия сольватации

3.3. Результаты определения коэффициентов диффузии надпероксида лития в различных растворителях

3.4. Исследование пассивации поверхности положительного электрода продуктами разряда при использовании различных растворителей

3.4.1. Учёт задержки между сигналами диска и кольца при определении коэффициента сбора

3.4.2. Оценка вклада прямого двухэлектронного восстановления кислорода

3.4.3. Влияние количества аккумулированного на поверхности электрода продукта реакции на скорость РВК

3.5. Влияние растворителя на скорость пассивации положительного электрода продуктами взаимодействия надпероксид-аниона с материалом электрода и электролитом

3.5.1. Исследование реакционной способности ацетонитрила по отношению к продуктам разряда ЛКА

3.5.2. Исследование динамики пассивации углеродного положительного электрода в различных растворителях

3.6. Заключение к главе

Глава 4. Выявление роли растворителя в процессах осаждения Ы2О2

4.1. Строение и условия образования мезокристаллов

4.1.1. Формы осадков пероксида лития

4.1.2. Строение иерархических структур и связь с равновесной формой

4.2. Влияние параметров разряда на морфологию осадков Li2O2

4.2.1. Плотность тока

4.2.2. Растворитель и содержание воды в нем

4.3. Механизм образования мезокристаллов

4.3.1. Нуклеация

4.3.2 Общая картина процесса кристаллизации

4.4. Влияние особенностей кристаллизации на разрядную емкость ЛКА

4.5. Заключение к главе

Глава 5. Распределение продукта разряда в пористом электроде

5.1. Использование МУРН для интегральной характеристики распределения продукта

5.2. Характеристика пористых электродов

5.3. Механизм заполнения пор при различных режимах осаждения Li2O2

5.4. Влияние содержания воды на процесс заполнения пор

5.5. Заключение к главе

Выводы

Список литературы