

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ СКРИНИНГ РАСТВОРИТЕЛЕЙ ДЛЯ ЛИТИЙ ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

*Орехов М. А.*

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

*mo2411@mail.ru*

Редокс-потенциал раствора электролита играет ключевую роль в работе литий-ионных батарей, влияя на реакции на поверхности электрода и формирование межфазной границы (SEI).

Был выполнен вычислительный скрининг редокс-потенциалов для 300 потенциальных растворителей с использованием подхода, основанного на теории функционала плотности (DFT). Этот метод объединяет constrained DFT с кластерно-континуальной моделью для оценки поведения растворителей при реакции восстановления.

Исследование показывает, что молекулы можно разделить на две группы: с редокс-потенциалами выше потенциала литиевого электрода и ниже его. Эти категории соответствуют электрохимически стабильным и нестабильным молекулам. Для малых молекул наблюдается сильная корреляция между редокс-потенциалом и деформацией молекулы при восстановлении, тогда как для больших молекул эта корреляция выражена слабее.

Кроме того, DFT моделирование было дополнено расчетами классической молекулярной динамики для оценки диэлектрической проницаемости растворителей. Результаты показали, что большинство электрохимически стабильных растворителей обладают низкой диэлектрической проницаемостью.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-00170, <https://rscf.ru/project/24-79-00170/>