

Streszczenie

Promowanie technologii zrównoważonej energii świadomej klimatu i przyjaznej środowisku wymaga rosnącego zapotrzebowania na przenośne urządzenia magazynujące energię. Baterie litowo-jonowe (LIB) wyróżniają się wysoką gęstością energii (od 100 do 265 Wh/kg) i są kluczowymi materiałami dla efektywnego przechowywania energii z odnawialnych źródeł, takich jak energia słoneczna czy wiatrowa. Aby osiągnąć szybkie postępy w projektowaniu i tworzeniu ultrawydajnych akumulatorów, niezbędne jest połączenie wydajności i niezawodności w kategorii materiałów do magazynowania energii. Proces tworzenia się dendrytów na anodzie, choć badany od dziesięcioleci, wciąż pozostaje tajemnicą ze względu na ich skład, strukturę i sposób formowania. Dendryty litu są główną przyczyną problemów w bateriach, takich jak zwarcia, awarie czy pożary, a także prowadzą do degradacji elektrolitu i utraty aktywnego litu w akumulatorze. Aby całkowicie wyeliminować dendryty z interfejsów baterii, konieczne jest dokładne zrozumienie podstawowych mechanizmów ich ewolucji. Projekt badawczy pod tytułem **“Nauka Fizyki Wzrostu Dendrytów w Bateriach Litowo-Jonowych: Metoda Mechanizmu Uwagi w Kontekście Zapobiegania i Ograniczania (akronim: DENDRITEPHASE)”** proponuje wielowymiarowe podejście, łącząc relacje mikrostruktura-właściwość oraz proces-kinetyka w różnych fazach materiałów w bateriach elektrochemicznych. To podejście opiera się na zintegrowanych eksperymentach, obliczeniach i sztucznej inteligencji, mających na celu wyjaśnienie mechanizmów ewolucji dendrytów. W przypadku wariantów LIB, informacje dotyczące geometrii i cech morfologicznych będą monitorowane poprzez eksperymenty drukowania metodą osadzania topionego. Ta dynamiczna przestrzenna informacja na temat mikrostruktury interfejsów fazowych będzie następnie analizowana przy użyciu metod elementów skończonych. Model pola fazowego, oparty na symulacjach atomistycznych, pozwoli zrozumieć rolę anizotropii, kinetyki reakcji fazy pośredniej, transportu jonów i obciążenia mechanicznego w formowaniu dendrytów. Aby przyspieszyć identyfikację właściwości materiałów dla modelu pola fazowego, sieć uwagi grafów uzupełni obliczenia teorii funkcjonału gęstości (DFT) oraz symulacje dynamikę molekularną. Dane obliczeniowe dotyczące struktury, właściwości i zachowania materiałów akumulatorowych, w połączeniu z eksperymentalnymi danymi dotyczącymi temperatury, napięcia i innych parametrów fizycznych, zostaną wykorzystane do tworzenia modeli sztucznej inteligencji. Użycie wariacyjnych autoenkoderów (VAE) do rekonstrukcji mikrostruktury pozwoli odkryć materiały elektrod i/lub elektrolitów wykazujące nietypowe właściwości w zakresie zarodkowania dendrytów na granicy faz stałego elektrolitu (SEI). VAE zostanie zintegrowane z regresją procesu gaussowskiego w celu zlokalizowania optymalnych miejsc jąder w SEI, które odpowiadają supresji dendrytów. Dwa rodzaje modeli transformatorów - generatory składu i generatory struktury - będą wykorzystane do projektowania i odkrywania nowych materiałów akumulatorowych, które będą hamować wzrost dendrytów. Połączenie wszystkich modułów pozwoli na wykorzystanie różnorodnych cech DFT, danych eksperymentalnych i analizy elementów skończonych w ramach wspólnej puli cech, które zostaną zastosowane w mechanizmach uwagi opartych na VAE i transformatorach.