

有机金属卤化物钙钛矿型锂离子电池保护层锂离子输运机制研究

华广斌

北京航空航天大学

北京航空航天大学

本科毕业设计（论文）任务书

I、毕业设计（论文）题目：

有机金属卤化物钙钛矿型锂金属电极保护层锂离子输运机制研究

II、毕业设计（论文）使用的原始资料（数据）及设计技术要求：

1. 模拟锂离子嵌入氯锡甲胺类钙钛矿；
2. 模拟锂离子在氯锡甲胺类钙钛矿中迁移；
3. 揭示锂离子在氯锡甲胺类钙钛矿中迁移机制。

III、毕业设计（论文）工作内容：

1. 实现并验证了适用于 VASP 软件计算结果的氢键强度估计方法。
2. 建立并计算锂离子嵌入模型，阐明相关现象。
3. 建立并计算锂离子迁移模型，揭示相关机制。

IV、主要参考资料：

1. 华广斌, 樊晏辰, 张千帆. 计算模拟在锂金属负极研究中的应用[J]. 物理化学学报, 2021, 37(2): 2008089.

2. Yin Yi-Chen, Wang Qian, Yang Jing-Tian, et al. Metal chloride perovskite thin film based interfacial layer for shielding lithium metal from liquid electrolyte[J]. Nature Communications, 2020, 11(1):1761.

3. Emamian Saeedreza, Lu Tian, Kruse Holger, et al. Exploring Nature and Predicting Strength of Hydrogen Bonds: A Correlation Analysis Between Atoms-in-Molecules Descriptors, Binding Energies, and Energy Components of Symmetry-Adapted Perturbation Theory[J]. Journal of Computational Chemistry, 2019, 40(32):2868-2881.

材料科学与工程 学院 材料科学与工程 专业类 180112 班
学生 华广斌

毕业设计（论文）时间：2022 年 3 月 1 日至 2022 年 5 月 26 日

答辩时间：2021 年 6 月 日

成 绩：_____

指导教师：张千帆

兼职教师或答疑教师（并指出所负责部分）：

系（教研室） 主任（签字）：_____

