

**СИСТЕМА НЕЙТРОННОГО OPERANDO МОНИТОРИНГА И ДИАГНОСТИКИ  
МАТЕРИАЛОВ И ИНТЕРФЕЙСОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ НАКОПИТЕЛЕЙ  
ЭНЕРГИИ НА ИЯУ ИБР-2**

**ЭЛХИМ\_НР / ELCHEM\_NS**

ШИФР ТЕМЫ

М.В.Авдеев, И.А.Бобриков, И.В.Гапон, А.И.Иваньков, В.И.Петренко, Д.В.Соловьев,  
С.В.Сумников, А.В.Томчук (ЛНФ ОИЯИ, Дубна)  
Д.М.Иткис (МГУ, Москва)  
Ф.С.Напольский (Университет «Дубна», Дубна)

рук. проекта            М.В. Авдеев

зам. рук. проекта    И.А.Бобриков, В.И.Петренко

ДАТА ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРОЕКТА В НОО \_\_\_\_\_

ДАТА НТС ЛАБОРАТОРИИ \_\_\_\_\_ НОМЕР ДОКУМЕНТА \_\_\_\_\_

ДАТА НАЧАЛА ПРОЕКТА \_\_\_\_\_

(ДЛЯ ПРОДЛЕНИЙ — ДАТА ПЕРВОГО УТВЕРЖДЕНИЯ ПРОЕКТА) \_\_\_\_\_

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЙ ПРОЕКТА

**СИСТЕМА НЕЙТРОННОГО OPERANDO МОНИТОРИНГА И ДИАГНОСТИКИ  
МАТЕРИАЛОВ И ИНТЕРФЕЙСОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ НАКОПИТЕЛЕЙ  
ЭНЕРГИИ НА ИЯУ ИБР-2**

**ЭЛХИМ\_НР / ELCHEM\_NS**

ШИФР ТЕМЫ

рук. проекта АВДЕЕВ МИХАИЛ ВАСИЛЬЕВИЧ

УТВЕРЖДЕН ДИРЕКТОРОМ ОИЯИ

СОГЛАСОВАНО

ВИЦЕ-ДИРЕКТОР ОИЯИ

ГЛАВНЫЙ УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ

ГЛАВНЫЙ ИНЖЕНЕР

НАЧАЛЬНИК НОО

ДИРЕКТОР ЛАБОРАТОРИИ

ГЛАВНЫЙ ИНЖЕНЕР ЛАБОРАТОРИИ

РУКОВОДИТЕЛЬ ПРОЕКТА

ЗАМ. РУКОВОДИТЕЛЯ ПРОЕКТА

ОДОБРЕН

ПКК ПО НАПРАВЛЕНИЮ

## ОГЛАВЛЕНИЕ

АННОТАЦИЯ.....	4
1. ВВЕДЕНИЕ .....	5
2. СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ ПО ЗАЯВЛЕННОЙ НАУЧНОЙ ПРОБЛЕМЕ.....	6
3. ОПИСАНИЕ ПРЕДЛАГАЕМОГО ИССЛЕДОВАНИЯ .....	8
3.1. <i>Физическое обоснование</i> .....	8
3.2. <i>Методическое обоснование</i> .....	8
3.3. <i>Ожидаемые результаты</i> .....	9
3.4. <i>Структура проекта</i> .....	10
3.5. <i>Задел</i> .....	11
4. ОЦЕНКА КАДРОВЫХ РЕСУРСОВ.....	12
5. ОЦЕНКА БЮДЖЕТА ПРОЕКТА .....	13
6. КРАТКИЙ ССВУ-АНАЛИЗ.....	15

## АННОТАЦИЯ

Эксплуатационные характеристики современных электрохимических накопителей энергии (энергоемкость, мощность, стабильность работы, срок эксплуатации) в значительной мере определяются процессами, происходящими на интерфейсах раздела зарядов и соответствующих химических реакциях, а также эволюцией структуры и химического состава электродов и электролитов. Проект направлен на разработку методик нейтронного рассеяния, которые бы позволили изучать структуру электрохимических интерфейсов и электродных материалов разных видов в процессе их функционирования (режим *operando*) и отслеживать влияние на нее различных факторов. Высокая проникающая способность нейтронов делает возможным исследование сложных систем, наиболее приближенных к условиям в реальных аккумуляторах, топливных элементах и других электрохимических ячейках. Эксперименты по нейтронному рассеянию требуют развития специализированных подходов и создания электрохимических ячеек для одновременного контроля напряжения/тока на исследуемом интерфейсе/электроде и организации нейтронного пучка, проходящего через интерфейс/электрод, с последующим детектированием и анализом рассеяния. При этом для разных видов интерфейсов/электродов и используемых методов рассеяния (дифракция, рефлектометрия, малоугловое рассеяние) можно выделить общие задачи, позволяющие в той или иной степени объединить подходы к их решению и таким образом повысить эффективность получения и масштаб структурной информации, изучая различные аспекты электрохимических процессов. Целью настоящего проекта является разработка подходов к эффективному использованию методов рассеяния нейтронов для различных видов электрохимических интерфейсов и электродов с последующим созданием специализированных экспериментальных ячеек и системы окружения образца для исследований в режиме *operando*.

Эксперименты по рассеянию нейтронов будут проводиться на реакторе ИБР-2 ЛНФ ОИЯИ на дифрактометрах ФДВР, RTD, рефлектометре ГРЭИНС, малоугловом дифрактометре ЮМО. При разработке ячеек будет использоваться многолетний опыт электрохимических исследований широкого круга интерфейсов на химическом факультете МГУ (Москва) и опыт дифракционных исследований электродов литий-ионных аккумуляторов на установке ФДВР ЛНФ ОИЯИ. Для электрохимического тестирования ячеек, а также исследований дополняющими методами (спектроскопия, микроскопия и пр.) будет привлекаться приборная база Университета «Дубна». Разрабатываемая в ходе проекта инфраструктура будет использована в рамках системы пользователей на реакторе ИБР-2 для широкого круга задач, связанных с материалами и интерфейсами для электрохимических накопителей энергии.

Команда участников проекта состоит из 10 человек. Стоимость проекта оценивается в сумму 450 k\$. Реализация проекта рассчитана на 3 года.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Производство и хранение энергии, получаемой с помощью электрохимических источников, играет исключительно важную роль для создания широкого спектра устройств, начиная с портативных телефонов, ноутбуков и электроинструментов, и заканчивая сложными машинами, такими как железнодорожные локомотивы и автомобили. Эксплуатационные характеристики электрохимических батарей и аккумуляторов в значительной мере определяются процессами, происходящими на интерфейсах раздела зарядов, в электродных материалах и соответствующих химических реакциях. Эволюция структуры, состава и химии электродов и электролитов влияет на все функциональные параметры устройства, включая удельный энергоемкость, мощность, стабильность работы и срок эксплуатации. Решение современных проблем электрохимии требует развития экспериментальных подходов, которые бы позволяли достоверно и надежно описывать структуру электродных материалов и интерфейсов во время их функционирования.

Настоящий проект направлен на разработку методик нейтронного рассеяния, которые бы позволили изучать структуру электрохимических интерфейсов и электродных материалов разных видов в процессе их функционирования (режим *operando*). Применение такого рода методик позволит на новом научном уровне отслеживать влияние на эволюцию электрохимических интерфейсов и материалов начальных характеристик поверхностей и параметров окружающей среды, состава электролитов, перенапряжения, плотности тока и других параметров. Высокая проникающая способность нейтронов делает возможным исследование сложных систем, наиболее приближенных к условиям в реальных аккумуляторах. Эксперименты по нейтронному рассеянию требуют развития специализированных подходов и создания электрохимических ячеек для одновременного контроля напряжения/тока на исследуемом интерфейсе/электроде и организации нейтронного пучка, проходящего через интерфейс/электрод, с последующим детектированием и анализом рассеяния. При этом для разных видов интерфейсов/электродов и различных используемых методов рассеяния можно выделить общие задачи, позволяющие в той или иной степени объединить подходы к их решению и таким образом повысить эффективность получения и масштаб структурной информации при изучении различных аспектов электрохимических процессов. Целью настоящего проекта является выделение перспективных (с точки зрения приложений к электрохимическим интерфейсам) методик нейтронного рассеяния, разработка подходов к их эффективному использованию для различных видов интерфейсов/электродов с последующим созданием специализированных экспериментальных ячеек и системы окружения образца для исследований в режиме *operando*. Проект включает в себя рассмотрение и расширенную адаптацию методов рассеяния тепловых нейтронов, включая дифракцию, рефлектометрию и малоугловое рассеяние, для решения проблем электрохимии. В частности, планируется создание специализированных электрохимических ячеек и систем окружения образца для изучения материалов и интерфейсов для работы с разными типами электрохимических накопителей энергии, использующих неводные электролиты и щелочные металлы, в частности литий. Работа с такими системами требует специального оборудования и инфраструктуры, которые должны быть внедрены в системы окружения образцов на установках по нейтронному рассеянию. Создание соответствующей системы нейтронного *operando* мониторинга и диагностики материалов и интерфейсов на ИЯУ ИБР-2 позволит на новом уровне проводить структурные исследования и существенно расширить круг решаемых задач в области электрохимии. В свою очередь, реализация данного проекта внесет значимый вклад в развитие политики пользователей на реакторе ИБР-2.

## 2. СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ ПО ЗАЯВЛЕННОЙ НАУЧНОЙ ПРОБЛЕМЕ

Самые распространенные сегодня литий-ионные аккумуляторы являются электрохимическими накопителями энергии с наивысшей среди других типов аккумуляторов накапливаемой удельной энергией (до 220 – 240 Вт ч/кг). Одним из наиболее привлекательных путей дальнейшего повышения удельной энергии аккумуляторов является переход к системам, использующим металлический литиевый электрод в качестве отрицательного электрода. К таким системам относятся и разрабатываемые сегодня литий-металлические аккумуляторы с положительными электродами интеркаляционного типа и новые электрохимические системы, как например «литий–сера» или «литий – кислород». Перспективными анодными материалами также являются наноструктурированный кремний и сплавы на его основе. Разработка перезаряжаемых и безопасных электродов с высокой емкостью для электрохимических батарей нового поколения на основе литийсодержащих электролитов требует глубокого понимания процессов, происходящих в окрестности внутренних границ раздела электрод-электролит при их функционировании. Это обуславливает сегодня большой интерес к разработке методов, позволяющих осуществлять эффективный мониторинг электрохимических интерфейсов, где происходит интеркаляция и электроосаждение лития. Сложность использования любых методов для этих целей связана с высокой химической активностью лития, что требует наличия специализированной инфраструктуры для работы с экспериментальными электрохимическими ячейками (как во время их сборки и подготовки к экспериментам, так и во время экспериментов).

Рассеяние тепловых нейтронов сегодня начинает активно использоваться в изучении литиевых накопителей энергии [1,2]. Это обусловлено высокой проникающей способностью данного вида излучения, что позволяет достаточно эффективно проводить эксперименты в режиме *operando*, и возможностями вариации контраста на основе изотопных замещений (прежде всего водород/дейтерий). Соответствующие направления исследований составляют: (i) отслеживание изменения структуры электродов в процессах заряда-разряда; (ii) мониторинг эволюции границ раздела между электродами и жидкими электролитами. Так, с помощью нейтронной дифракции (НД) активно отслеживают изменения в кристаллической структуре электродов в процессах внедрения/экстракции лития [3-5]. Нейтронная рефлектометрия (НР) позволяет отследить развитие осаждаемых в ходе электрохимических процессов тонких слоев (в частности переходные слои твердого электролита SEI) на границах раздела электродов с жидкими электролитами [6-10], и приповерхностное внедрение лития в электроды [11]. Наконец, малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) используется для определения структурных свойств осажденных продуктов разряда и побочных продуктов в пористых электродах [12].

В недавних обзорных работах участников проекта [1,2] показано, что:

- Методы рассеяние тепловых нейтронов позволяют исследовать «скрытые» структуры электродных материалов и интерфейсов в электрохимических накопителях энергии.
- Важная, с практической точки зрения, особенность рассеяния нейтронов – «усредненная» информация по объему или поверхности электродов, что позволяет избегать артефактов, связанных во многих методах исследований с локальностью информации и влиянию на нее различных факторов.
- Организация и проведение высококачественных экспериментов требует соответствующей «электрохимической инфраструктуры».

Последнее сдерживает проведение экспериментов в этом направлении на реакторах и, в частности, на ИБР-2. Проект направлен на решение этой проблемы за счет существенного улучшения экспериментальных возможностей по данной теме в результате создания специализированной системы нейтронного *operando* мониторинга и диагностики материалов и интерфейсов для электрохимических накопителей

энергии. Его реализация позволит существенно повысить конкурентоспособность реактора ИБР-2 как исследовательского источника нейтронов.

## Литература

- [1] A.M.Balagurov, I.A.Bobrikov, N.Y.Samoylova, O.A.Drozhdin, E.V.Antipov, Neutron scattering for analysis of processes in lithium-ion batteries, *Russ. Chem. Rev.* 83 (2014) 1120
- [2] D.M. Itkis, J.J. Velasco-Velez, A. Knop-Gericke, A. Vyalikh, M.V. Avdeev, L.V. Yashina, Probing of electrochemical interfaces by photons and neutrons in operando. Review. *ChemElectroChem* 2 (2015) 1427
- [3] A. Senyshyn et al., *J. Electrochem. Soc.* 160, A3198 (2013)
- [4] V. Zinth, C. von Lüdgers, M. Hofmann, J. Hattendorff, I. Buchberger, S. Erhard, J. Rebelo-Kornmeier, A. Jossen, R. Gilles, Lithium plating in lithium-ion batteries at sub-ambient temperatures investigated by in situ neutron diffraction, *Journal of Power Sources* 271 (2014) 152
- [5] Bobrikov I.A., Balagurov A.M., Chih-Wei Hu, Chih-Hao Lee, Sangaa Deleg, Structural evolution in LiFePO<sub>4</sub>-based battery materials: in-situ and ex-situ time-of-flight neutron diffraction study, *Journal of Power Sources* 258 (2014) 356-364
- [6] S. C. DeCaluwe, B. M. Dhar, L. Huang, Y. He, K. Yang, J. P. Owejan, Y. Zhao, A. A. Talin, J. A. Dura, H. Wang, Pore collapse and regrowth in silicon electrodes for rechargeable batteries, *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2015, 17, 11301
- [7] T. M. Fears, M. Doucet, J. F. Browning, J. K. S. Baldwin, J. G. Winiarz, H. Kaiser, H. Taub, R. L. Sacci, G. M. Veith, Evaluating the solid electrolyte interphase formed on silicon electrodes: a comparison of *ex situ* X-ray photoelectron spectroscopy and *in situ* neutron reflectometry, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 13927-13940
- [8] H. Kawaura, M. Harada, Y. Kondo, H. Kondo, Y. Suganuma, N. Takahashi, J. Sugiyama, Y. Seno, N. L. Yamada, Operando Measurement of Solid Electrolyte Interphase Formation at Working Electrode of Li-Ion Battery by Time-Slicing Neutron Reflectometry, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2016, 8 (15), pp 9540–9544
- [9] G. M. Veith, M. Doucet, J. K. Baldwin, R. L. Sacci, T. M. Fears, Y. Wang, J. F. Browning, Direct Determination of Solid-Electrolyte Interphase Thickness and Composition as a Function of State of Charge on a Silicon Anode, *J. Phys. Chem. C*, 2015, 119 (35), 20339–20349
- [10] Avdeev M.V., Rulev A.A., Bodnarchuk V.I., Ushakova E.E., Petrenko V.I., Gapon I.V., Tomchuk O.V., Matveev V.A., Pleshanov N.K., Kataev E.Yu., Yashina L.V., Itkis D.M. Monitoring of Lithium Plating by Neutron Reflectometry. *Applied Surface Science*, 2017, in press.
- [11] B.-K. Seidlhofer, B. Jerliu, M. Trapp, E. Hüger, S. Risse, R. Cubitt, H. Schmidt, R. Steitz, M. Ballauff, Lithiation of Crystalline Silicon As Analyzed by Operando Neutron Reflectivity, *ACS Nano*, 2016, 10 (8), 7458–7466
- [12] C. A. Bridges, X.-G. Sun, J. Zhao, M. P. Paranthaman, S. Dai, In Situ Observation of Solid Electrolyte Interphase Formation in Ordered Mesoporous Hard Carbon by Small-Angle Neutron Scattering, *J. Phys. Chem. C* 2012, 116, 7701–7711

### 3. ОПИСАНИЕ ПРЕДЛАГАЕМОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

#### 3.1. Физическое обоснование

Развитие в ходе проекта экспериментальной базы для электрохимических исследований на реакторе ИБР-2 будет проводиться по следующими направлениями современных исследований электрохимических накопителей энергии в режиме *operando*:

I. Эволюция кристаллической структуры электродов;

II. Эволюция плоских интерфейсов электрод – жидкий электролит;

III. Эволюция объемных интерфейсов пористый электрод – жидкий электролит;

По направлению I наиболее перспективным видится использование нейтронной дифракции. Соответствующий круг актуальных прикладных задач для данного метода включает в себя изучение: процессов интеркаляции/деинтеркаляции лития в электроды на основе новых перспективных материалов для повышения емкости разряда, таких как наноструктурированный кремний и сплавы на его основе, оксид ванадия  $V_2O_5$  и др.; деградации электродов на основе анализа эволюция микроструктуры электродных материалов как в процессе единичного рабочего цикла, так и при продолжительной эксплуатации. При этом можно ставить и более фундаментальные задачи, связанные с фазовыми переходами в материалах для электродов при электрохимическом циклировании.

Направление II связано с использованием нейтронной рефлектометрии. Круг задач по данному направлению включает в себя: создание и апробация сложных гетерогенных тонкопленочных электродов на основе металлов и кремния; анализ образования и эволюции пассивирующего слоя SEI на поверхности такого рода электродов; разработка методики вариации контраста на основе использования электролитов с дейтерированными растворителями; анализ появления и роста неоднородностей, включая образование нитевидных осадков («дендритов»), на интерфейсах с различными электролитами и развитие для этой цели методик зеркального отражения, диффузного рассеяния и малоуглового рассеяния под скользящими углами. Если оптические методы позволяют наблюдать дендритные формирования уже на их завершающейся стадии роста (микронный уровень), то нейтронная рефлектометрия чувствительно в нано-масштабе, т.е. появляется принципиальная возможность отследить начальный этап формирования дендритов, что позволит прояснить механизмы их появления и роста и даст возможность проверки влияния на эти процессы различных факторов в рамках изучения подавления данного паразитного для электрохимических накопителей энергии явления.

В рамках направления III применяется малоугловое рассеяние нейтронов для решения актуальных задач: изучение осаждения продуктов разряда в пористых положительных электродах для литий-воздушных и литий-серных аккумуляторов; разработка методик анализа заполнения пор в электроде продуктами электрохимических процессов; разработка методики вариации контраста на основе использования электролитов с дейтерированными растворителями.

Эффективное применение вышеуказанных методик рассеяния нейтронов (дифракция, рефлектометрия, малоугловое рассеяние) для решения обозначенных задач требует создание и апробация специализированных электрохимических ячеек и систем окружения образца для *operando* исследований.

#### 3.2. Методическое обоснование

Методическая база проекта охватывает следующие направления:

- Разработка общих подходов к эффективному использованию методов рассеяния нейтронов (дифракция, рефлектометрия, малоугловое рассеяние) в анализе эволюции структуры различных видов электродов и интерфейсов для

электрохимических накопителей энергии в процессе их функционирования (режим *operando*).

- Создание и совершенствование специализированных электрохимических ячеек и систем окружения образца для исследований в режиме *operando* в экспериментах по нейтронному рассеянию.

При этом для разрабатываемых методик ставятся следующие задачи.

#### Дифракция нейтронов

- Оптимизация существующих электрохимических ячеек для дифракционного эксперимента
- Установка специализированной системы коллимирования входящего и рассеянного нейтронного пучка
- Развитие системы окружения образца, включая линию подготовки электродов, для электрохимических исследований

#### Рефлектометрия нейтронов

- Оптимизация нейтронного эксперимента в отношении выбора состава электрода и электролита в сочетании с изучаемыми электрохимическими характеристиками интерфейсов.
- Оптимизация рефлектометрических ячеек и системы окружения образца
- Организация синтеза сложных гетерогенных пленочных электродов
- Диагностика дендритных формирований после экспериментов по рассеянию нейтронов
- Организация хранения и обработки кристаллических подложек после экспериментов по рассеянию нейтронов

#### Малоугловое рассеяние нейтронов

- Разработка электрохимической ячейки для нейтронного эксперимента
- Разработка системы окружения образца для *in-situ* нейтронного эксперимента

Эксперименты по рассеянию нейтронов будут проводиться на реакторе ИБР-2 ЛНФ ОИЯИ на дифрактометрах ФДВР, ДН-2 (RTD), рефлектометре ГРЭИНС, малоугловом дифрактометре ЮМО. При разработке ячеек будет учтен многолетний опыт электрохимических исследований широкого круга материалов и интерфейсов на химическом факультете МГУ (Москва) и опыт дифракционных исследований электродов литий-ионных аккумуляторов на установке ФДВР. Для сборки и электрохимического тестирования ячеек будет использована приборная база Университета «Дубна», где в настоящее время действует электрохимическая лаборатория самого высокого мирового уровня, а также оборудование химической поддержки, уже имеющееся в наличии в ЛНФ ОИЯИ (аргоновый бокс, миксеры для приготовления электродов и т.д.). Близость расположения экспериментальной площадки ОИЯИ и Университета «Дубна» позволит осуществлять с высокой эффективностью работу по разработке и апробации электрохимических ячеек для нейтронных экспериментов. Получаемые результаты напрямую востребованы электрохимическими лабораториями вовлеченных учебных заведений, где данные по нейтронному рассеянию также могут быть дополнены разнообразными лабораторными методами (спектроскопия, микроскопия и пр.)

### *3.3. Ожидаемые результаты*

#### Нейтронная дифракция

Создание и апробация специализированных электрохимических ячеек и системы окружения образца для *operando* исследований процессов интеркаляции/деинтеркаляции лития в электроды на основе новых перспективных

материалов для повышения энергоемкости литий-ионных аккумуляторов. Совершенствование ячеек в отношении использования при многократных циклах “разряд-заряд”.

#### Рефлектометрия нейтронов.

Создание и апробация специализированных электрохимических ячеек и системы окружения образца для изучения электроосаждения лития на плоские интерфейсы на основе металлических и сложных гетерогенных тонкопленочных электродов в режиме *operando*. Оптимизация нейтронного эксперимента в отношении выбора состава электрода и электролита в сочетании с изучаемыми электрохимическими характеристиками интерфейсов. Анализ появления и роста неоднородностей, включая образование нитевидных осадков, на интерфейсах с различными электролитами. Развитие для этой цели методик зеркального отражения, диффузного рассеяния и малоуглового рассеяния под углами скольжения. Разработка методики вариации контраста на основе использования электролитов с дейтерированными растворителями.

#### Малоугловое рассеяние нейтронов

Создание специализированных электрохимических ячеек и системы окружения образца для изучения осаждения продуктов электрохимического циклирования в пористых положительных электродах литий-воздушных и литий-серных аккумуляторов в режиме *operando*. Разработка и создание системы окружения образца для *in-situ* экспериментов.

Разработка методик анализа заполнения пор в электроде продуктами электрохимических процессов. Разработка методики вариации контраста на основе использования электролитов с дейтерированными растворителями. Совершенствование ячеек для проведения долговременных экспериментов с многократными циклами “разряд-заряд”.

Как основной результат, будет создана общая система мониторинга структуры электрохимических интерфейсов в отношении электродов и их границ раздела с жидкими электролитами. Данная система позволит проводить для одних и тех же электрохимических ячеек эксперименты с разными методами нейтронного рассеяния. Разрабатываемая в ходе проекта инфраструктура будет использована в рамках системы пользователей на реакторе ИБР-2 для широкого круга задач, связанных с материалами и интерфейсами для электрохимических накопителей энергии. Данная тематика активно развивается в настоящее время в рамках системы пользователей: количество предложений на эксперимент по ней составляет ~10 в год. Среди научных центров, вовлеченных в эксперименты по электрохимии: Московский государственный университет, Саратовский Госуниверситет, Институт физики металлов УрО РАН, Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт», Китайский институт атомной энергии, Университет Китайской академии наук, Тайваньский Тсин-Хуа университет, Сколтех. Целью проекта ставится увеличение количества заявок на более качественные эксперименты, использующее более комплексные подходы, и, как следствие, увеличение числа вовлеченных научных центров в эксперименты по данной тематике на реакторе ИБР-2.

#### *3.4. Структура проекта*

В проект вовлечены исследовательские группы Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ, Химического факультета и факультета наук о материалах МГУ, естественно-научный факультет Университета «Дубна» и его Инжиниринговый центр. Перед группами ставятся следующие задачи.

## ЛНФ ОИЯИ

Изготовление:

- электрохимических ячеек для нейтронного рассеяния;
- систем окружения образца для *in-situ* экспериментов по нейтронному рассеянию.

Организация и поддержка R&D линии для напыления и шлифовки кристаллических подложек;

Организация и проведение нейтронных экспериментов на ИЯИ ИБР-2;

Диагностика и хранение образцов в специальных условиях после проведения экспериментов.

## МГУ

Дизайн и эскизные проекты:

- электрохимических ячеек для нейтронного рассеяния;
- систем окружения образца для *in-situ* экспериментов по нейтронному рассеянию.

Научно-исследовательская поддержка проекта.

## Университет «Дубна»/Инжиниринговый центр

Тестовая сборка и электрохимические измерения ячеек и систем окружения образца для нейтронных экспериментов;

Электрохимическая поддержка проведения нейтронных экспериментов.

### **3.5. Задел**

К настоящему моменту в ЛНФ проведено несколько серий экспериментов по исследованию интеркаляции и деинтеркаляции лития в электродные материалы в режиме *operando* методом нейтронной дифракции. В результате создана основа по созданию инфраструктуры для электрохимических исследований на реакторе ИБР-2, включая специализированные боксы для работы с ячейками. Как результат, накоплен определенный опыт по созданию электрохимических ячеек для этой цели, который может быть использован при проектировании и изготовлении нового класса ячеек и общей системы мониторинга новых перспективных электродных материалов.

В отношении плоских интерфейсов с тонкопленочными металлическими электродами в контакте с жидким литийсодержащим электролитом проведены первые пробные эксперименты по нейтронной рефлектометрии в режиме *operando*. Рассмотрены возможности схемы с компенсированием рассеяния на электроде посредством использования дейтерированных электролитов. Определена чувствительность метода в отношении толщины, шероховатости и плотности осаждаемого слоя. Полученный опыт позволяет реализовать цели проекта по созданию системы окружения образца в рефлектометрическом эксперименте со сложными электрохимическими интерфейсами в режиме *operando* в полном масштабе за сравнительно короткий срок.

Малоугловое рассеяние нейтронов использовалось в пробных экспериментах по отслеживанию осаждения пероксида лития в литий-воздушных электрохимических ячейках на основе в углеродных пористых матрицах, пропитанных жидким литийсодержащим электролитом. Эксперименты проведены в *ex-situ* режиме. Показаны возможности и чувствительность метода в отношении степени заполнения нанопор (интервал размеров 1 – 100 нм) продуктами взаимодействия лития с электролитом при разрядке ячеек. Полученный опыт дает предпосылки для успешной реализации проекта в отношении создания *in-situ* ячеек для метода малоуглового рассеяния нейтронов и последующей системы окружения образца для исследований в режиме *operando*.

#### 4. ОЦЕНКА КАДРОВЫХ РЕСУРСОВ

##### ЛНФ ОИЯИ

М.В.Авдеев, В.И.Петренко, А.В.Томчук, И.В.Гапон,  
И.А.Бобриков, С.В.Сумников, А.М.Балагуров, О.Ю.Иваньшина, Н.Ю. Самойлова,  
Д.В.Соловьев, А.И.Иваньков  
Доля времени в проекте 65%.

##### МГУ, Москва

Д.М.Иткис, Э.Б.Катаев, А.А.Рулев, Т.К.Захарченко, О.О.Капитанова, Л.В.Яшина  
Доля времени в проекте 15%

##### Университет «Дубна», Дубна

Ф.С.Напольский, Е.Е.Ушакова, М.Ердаулетов, В.А.Кривченко  
Доля времени в проекте 20%

## 5. ОЦЕНКА БЮДЖЕТА ПРОЕКТА

Форма № 26

**Предлагаемый план-график и необходимые ресурсы для осуществления  
проекта СИСТЕМА НЕЙТРОННОГО OPERANDO МОНИТОРИНГА И ДИАГНОСТИКИ  
МАТЕРИАЛОВ И ИНТЕРФЕЙСОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ НАКОПИТЕЛЕЙ  
ЭНЕРГИИ НА ИЯУ ИБР-2**

Наименования затрат, ресурсов, источников финансирования		Стоимость (тыс. долл.). Потребности в ресурсах	Предложение лаборатории по распределению финансирования и ресурсов		
			1 год	2 год	3 год
Затраты	Основные узлы оборудования, работы по его обновлению, наладке и т.п.	240			
	Строительство/ремонт помещений	0			
	Материалы	95			
Необходимые ресурсы	Нормо-час Ресурсы – конструкторского бюро лаборатории, – опытного производства ОИЯИ, – опытного производства лаборатории, – ускорителя, – реактора, – ЭВМ. Эксплуатационные расходы	3840			
Источники финансирования	Бюджетные средства Затраты из бюджета, в том числе инвалютные средства	150			
	Внебюджетные средства Вклады коллаборантов. Средства по грантам. Вклады спонсоров. Средства по договорам. Другие источники финансирования и т.д.	0			

РУКОВОДИТЕЛЬ ПРОЕКТА

**Смета затрат по проекту СИСТЕМА НЕЙТРОННОГО OPERANDO МОНИТОРИНГА И ДИАГНОСТИКИ МАТЕРИАЛОВ И ИНТЕРФЕЙСОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ НАКОПИТЕЛЕЙ ЭНЕРГИИ НА ИЯУ ИБР-2**

NN пп	Наименование статей затрат	Полная стоимость	1 год	2 год	3 год и далее
	Прямые расходы на Проект				
1.	Ускоритель, реактор	1440 час.	480	480	480
2.	ЭВМ	0 час.			
3.	Компьютерная связь	0 тыс. долл.			
4.	Конструкторское бюро	600 нормо-час	200	200	200
5.	Опытное производство	1800 нормо-час	600	600	600
6.	Материалы	95 тыс. долл.	35	35	25
7.	Оборудование	240 тыс. долл.	80	80	80
8.	Строительство/ремонт помещений	тыс. долл.			
9.	Оплата НИР, выполняемых по договорам	100 тыс. долл.	30	30	40
10.	Командировочные расходы, в т.ч.	15 тыс. долл.	5	5	5
	а) в страны нерублевой зоны	9			
	б) в города стран рублевой зоны	6	3	3	3
	в) по протоколам		2	2	2
	Итого по прямым расходам:	450	150	150	150

РУКОВОДИТЕЛЬ ПРОЕКТА

ДИРЕКТОР ЛАБОРАТОРИИ

ВЕДУЩИЙ ИНЖЕНЕР-ЭКОНОМИСТ ЛАБОРАТОРИИ

## 6. КРАТКИЙ ССВУ<sup>1</sup>-АНАЛИЗ

### Сильные внутренние стороны:

- Имеется стабильно работающий высокопоточный импульсный источник нейтронов.
- Сбалансированный и достаточно опытный коллектив для решения приборно-методических задач с достаточно высоким уровнем понимания физических проблем, на решение которых направлено создание нового оборудования.
- Близость и мобильность персонала электрохимических лабораторий к источнику нейтронов.
- Хороший задел по данной теме у всех участвующих в проекте групп.
- Участие достаточно большого числа молодых специалистов, подготовленных по данной тематике, которые непосредственно могут сразу без дополнительной подготовки приступить к выполнению конкретных задач проекта.

### Слабые внутренние стороны:

- Ограниченная работа источника нейтронов по времени.
- Большая загруженность приборной базы реактора в целом.
- Вероятность нерегулярного финансирования.
- Дороговизна экспериментов

### Сильные внешние стороны:

- Актуальность тематики и гигантский интерес к экспериментам по затрагиваемой тематике со стороны мирового научного сообщества.
- Перспективы финансирования последующих исследований на разрабатываемом в проекте оборудовании различными научными и бизнес-фондами.

### Слабые внешние стороны:

- Конкуренция по отдельным направлениям со стороны мировых нейтронных центров.

---

<sup>1</sup> ССВУ (англ. SWOT) — сильные, слабые стороны, возможности, угрозы