



The effect of tortuosity parameter on lithium deposition inside carbon nanofibers in half-cell mode

Seyed Ali Hoseini¹

¹Department of electrical and computer engineering, University of Tehran, Tehran, Iran

Key words:

*Battery
Scaffold
Lithium-ion
Simulation
Insulating-
materials
Anode*

Abstract

The study of important and influential parameters of the lithium-ion batteries' performance is of great importance. Modeling and simulation of the structures requires a deep understanding of the relationships governing the performance of these batteries. One of the most effective and influential parameters in the performance of batteries is the tortuosity parameter and the preferential accumulation of lithium in conductive structures. For this purpose, three types of carbon nanofiber scaffolds with different structural tortuosity were modeled, and for the first time, the tortuosity parameter in these structures was calculated through simulation. Then, for all of these three structures, the configuration of the lithium-ion half-cell was modeled, and the dispersion of lithiation in these structures was discussed and examined. The simulation results revealed that increasing the structural tortuosity will cause a non-uniform distribution of lithium in carbon nanofibers, and the lower the tortuosity parameter, the more uniformly lithium is distributed in the conductive structures.



تأثیر پارامتر پیچش بر نشست لیتیوم درون نانوفیبرهای کربنی در حالت نیم سلول

سید علی حسینی^{*۱}

^۱ مدرس دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه تهران، تهران، ایران

*Corresponding Author's E-mail : ali.hoseini@ut.ac.ir

چکیده

واژگان کلیدی

بررسی پارامترهای مهم و تاثیرگذار بر روی عملکرد باتری های لیتیوم یون از اهمیت بسیار ویژه ای برخوردار است. مدل سازی و شبیه سازی ساختارهای مورد استفاده مستلزم شناخت عمیق از روابط حاکم بر عملکرد این باتری ها است. یکی از پارامترهای بسیار موثر و تاثیر گذار در عملکرد باتری ها پارامتر پیچش و تجمع ترجیحی لیتیوم در ساختارهای رسانا است. بدین منظور سه نوع داربست از جنس نانوفیبرهای کربنی با پیچش ساختاری متفاوت مدل سازی شد و برای اولین بار پارامتر پیچش در این ساختارها از طریق شبیه سازی محاسبه گردید. سپس برای هر سه این ساختار ها پیکربندی نیم سلول لیتیوم یونی مورد مدل سازی قرار گرفت و میزان پراکندگی نشست لیتیوم در این ساختارها بحث و بررسی شد. نتایج شبیه سازی آشکار کرد که افزایش پیچش ساختاری سبب توزیع غیر یکنواخت لیتیوم در نانوفیبرهای کربنی خواهد شد و هر چه پارامتر پیچش مقدار کمتری داشته باشد لیتیوم به صورت یکنواخت تری در ساختارهای رسانا توزیع می گردد.

باتری
داربست
لیتیوم-یون
شبیه سازی
مواد عایق
آند

در سمت آند، فلز لیتیوم با ظرفیت ۳۸۶۳ mAh/g [۹]، [۱۰] بالاترین ظرفیت را در مقایسه با مواد آندی معمولی مانند گرافیت (۱۰ برابر بیشتر) دارد. علاوه بر این، لیتیوم فلزی دارای کمترین پتانسیل اکسیداسیون و کاهش الکتروشیمیایی است (۳/۰۴۷ در مقایسه با الکترواستاندارد هیدروژن) [۱۱]. علیرغم افزایش ظرفیت و در نتیجه افزایش چگالی انرژی الکترو، لیتیوم فلزی معایب خاص خود را دارد [۱۲]. از جمله این ایرادات می توان به رشد دندریت های لیتیومی و احتمال اتصال کوتاه به دلیل سوراخ شدن جداکننده، و در نتیجه بازده کولمبیک پایین و کاهش ظرفیت اشاره کرد [۱۳]. از آنجایی که در سمت کاتد، بیشتر مواد فعال رایج مورد استفاده اکسیدهای فلزی هستند که اغلب دارای رسانایی الکتریکی پایینی هستند. استفاده از روش های مرسوم ساخت الکترو، باعث کاهش چگالی توان الکترو می شود. در چنین روش هایی برای تهیه الکترو، مواد فعال، بایندهای پلیمری و افزودنی های رسانا

۱- مقدمه

با استفاده روز افزون از وسایل نقلیه الکتریکی، تجهیزات الکترونیکی قابل حمل، اینترنت اشیا، هواپیماهای بدون سرنشین و غیره، نیاز به دستگاه های ذخیره انرژی با کارایی بالا و عمر طولانی [۱]–[۳] و چگالی انرژی بالا به خوبی تشخیص داده شده است. با پیشرفت تکنولوژی، شدت و اهمیت این نیاز بیش از پیش آشکار می شود. در میان دستگاه های ذخیره سازی انرژی، باتری های لیتیوم یونی یکی از کارآمدترین گروه ها هستند که ظرفیت بالا و عملکرد طولانی مدت را نشان می دهند. یکی از تنگناها برای دستیابی به باتری هایی با چگالی انرژی بالا [۴]، عمر طولانی [۵] و ایمنی مناسب، طراحی الکترودهای کاتد و آند کارآمد و استفاده از مواد با کارایی بالا است [۶]–[۸].

که در آن τ پارامتر پیچ خوردگی است، $\langle Lg \rangle$ طول مسیر متوسط و L_s مسیر خط مستقیم در طول محیط است. در تحقیقی که توسط چن و همکاران انجام شد [۲۰]، سه نوع الکتروود با پیچ خوردگی متفاوت با استفاده از نانوصفات اکسید گرافن ایجاد شد و میزان تجمع ترجیحی لیتیوم در سطح بالای ساختار الکتروود مورد بررسی قرار گرفت. مطابق نتایج این تحقیق با افزایش پیچش در داربست های رسانا میزان بالانشینی ترجیحی لیتیوم که یک پدیده مضر است افزایش می یافت.

ما در این مطالعه در ابتدا سه نوع داربست از جنس نانو فیبرهای کربنی با پیچ خوردگی متفاوت را در نرم افزار شبیه سازی کامسول^۷ ایجاد کرده و اثر پارامتر پیچ خوردگی بر توزیع میدان های الکتریکی، فلاکس یونی لیتیوم و یکنواختی نشست لیتیوم در این داربست ها را مورد بررسی قرار دادیم.

با حل معادله لاپلاس (رابطه ۲) و در نظر گرفتن شرایط مرزی دیریکله^۸ برای هر سه داربست متخلخل شامل نانو فیبرهای کربنی کاملاً الاین، نیمه الاین و درهم تنیده (غیر الاین) ابتدا شار لاپلاسی^۹ محاسبه شد. شکل (۱) هندسه هر سه داربست را در حالت بدون شار و همراه با شار نشان می دهد. به وضوح قابل مشاهده است که با تغییر مورفولوژی از داربست کاملاً الاین به نیمه الاین و درهم تنیده، پیچیدگی مسیر عبور یون ها افزایش یافته و به تبع آن سطح پیچ خوردگی نیز افزایش می یابد. برای انجام این شبیه سازی و محاسبه شار لاپلاسی^{۱۰} از فیزیک مربوط به معادلات ریاضی^{۱۱}، زیر شاخه معادلات لاپلاس^{۱۱} استفاده شده است.

رابطه ۲ معادله لاپلاس را نشان می دهد که برای هر سه ساختار متخلخل حل شد تا پارامتر شار موثر یا به عبارتی F_{eff} به دست آید. با انتگرال گیری از شار بر روی جمع کننده جریان و با استفاده از رابطه ۳، مقدار شار موثر (F_{eff}) برای هر سه داربست استخراج شد. از آنجایی که پارامتر شار موثر مطابق با رابطه ۴ برابر است با تخلخل (ϵ) تقسیم بر پیچ خوردگی (τ) و با توجه به اینکه میزان تخلخل برای هر سه داربست مشخص است می توان برای هر سه داربست، میزان پارامتر پیچ خوردگی را نیز محاسبه نمود.

همگی به صورت دوغاب^۱ در می آیند و با آرایش تصادفی و فشرده روی جمع کننده جریان^۲ پوشانده می شوند که مسیری پرپیچ و خم و با پیچ خوردگی^۳ بالا برای یون ها و الکترون ها ایجاد می کند. کاهش سرعت یون ها و الکترون ها و افزایش طول دیفیوژن^۴ آنها در ساختار الکتروود، چگالی توان الکتروود را بدتر می کند [۱۴]. یکی از راه حل های موثر برای غلبه بر این مشکلات، استفاده از داربست های سه بعدی در ساختار الکتروود است که می توانند رسانا [۱۵]، [۱۶] و یا غیر رسانا [۱۷] باشند. به طور کلی در داربست های سه بعدی به دلیل وجود تخلخل^۵، یک ساختار شبکه ای سه بعدی پر از الکتروولیت و به صورت به هم پیوسته تشکیل می شود که منجر به انتقال سریع یون ها و افزایش نفوذ آنها می شود. در این صورت الکترون ها نیز مسیر کوتاهتر و با مقاومت کمتری از محل واکنش تا جمع کننده جریان خواهند داشت. علاوه بر این، یکپارچگی داربست و عدم وجود مواد افزودنی رسانا و بایندره های پلیمری باعث بهبود طول عمر الکتروود می شود. در سمت آند، توزیع غیر یکنواخت میدان الکتریکی در داخل الکتروود باعث رشد ناخواسته دندریت های لیتیومی می شود و استفاده از داربست های رسانا می تواند باعث توزیع یکنواخت تر میدان الکتریکی در داخل الکتروود و کاهش رشد دندریت های لیتیوم شود. برای اینکه بتوانیم به الکتروودهای با کارایی بالا دست یابیم، درک پارامترهای مؤثر بر کارایی الکتروود مهم است [۱۵]. یکی از مهمترین پارامترهایی که بر عملکرد الکتروودها تأثیر می گذارد، میزان پیچ خوردگی است که پیچیدگی مسیر یون و انتقال جرم در ساختارهای متخلخل را نشان می دهد. هر چه پیچ خوردگی مسیر بیشتر باشد، میزان پیچ و خم آن بالاتر خواهد بود. در نتیجه، به نظر می رسد که معماری ریزساختارها و مورفولوژی نانو ساختارهای الکتروود تأثیر زیادی بر این پارامتر داشته باشد.

۲- محاسبه پارامتر پیچش در داربست های رسانا

به طور کلی وقتی یک فاز جامد در محیط متخلخل وجود دارد، مسیر جریان را از حالت مستقیم منحرف می کند [۱۸]. پیچ خوردگی هندسی^۶ به عنوان نسبت بین متوسط طول مسیرهای هندسی به فاصله خط مستقیم بین این مسیرها تعریف می شود [۱۹] (رابطه ۱).

$$\tau = \frac{\langle Lg \rangle}{L_s} \quad (1)$$

7. COMSOL
8. Dirichlet boundary condition
9. Laplacian flux
10. Mathematics
11. Laplace's equation

1. Slurry
2. Current collector
3. Tortuosity
4. diffusion length
5. Porosity
6. Geometric tortuosity

تأثیر پارامتر پیچش بر نشست لیتیوم درون نانوفیبرهای کربنی در حالت نیم سلول، سید علی حسینی

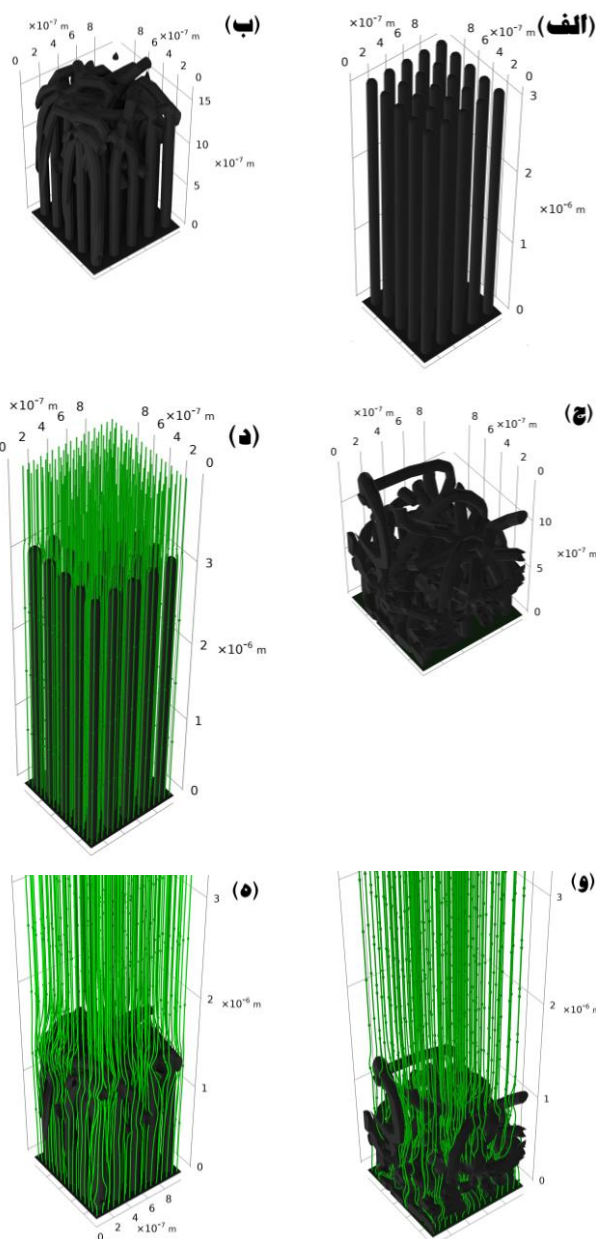
$$F_{eff} = L_{elec} \oint_A -\nabla u \cdot n \, dA \quad \text{رابطه (۳)}$$

$$F_{eff} = \frac{\varepsilon}{\tau} \quad \text{رابطه (۴)}$$

مقدار پارامتر پیچ خوردگی برای داربست کاملاً الاین برابر $\tau = 1/0.1$ محاسبه شد که نشان‌دهنده یک مسیر تقریباً بدون مانع برای رسیدن یون‌ها به عمق الکتروود و سایت‌های فعال واکنش است. برای داربست نیمه الاین، مقدار پیچ خوردگی $1/11$ محاسبه شد که نسبت به داربست کاملاً الاین افزایش یافته است و نشان‌دهنده افزایش پیچیدگی مسیر عبور یون‌ها می‌باشد. برای داربست درهم تنیده نیز، مقدار پیچ خوردگی $1/47$ محاسبه شد. همانطور که انتظار می‌رفت بیشترین مقدار پیچ خوردگی برای داربست درهم تنیده است. پارامتر پیچ خوردگی محاسبه شده به شدت به مورفولوژی سازه‌ها وابسته است. نتایج شبیه‌سازی ساختار سازه‌ها و محاسبه میزان پیچ خوردگی در آنها نشان می‌دهد که با تغییر ساختار از داربست کاملاً الاین به نیمه الاین و درهم تنیده پارامتر پیچ خوردگی در آنها افزایش می‌یابد.

۳- مدل سازی باتری نیم سلول

برای هر سه داربست، مدل سازی نیم سلول انجام شد که در آن نانو فیبرهای کربنی در پایین به عنوان میزبان لیتیوم (کاتد) و فویل فلزی لیتیوم به عنوان آند در بالای سلول قرار گرفتند. برای الکترولیت از محلول یک مولار نمک LiPF₆ در حلال آلی حاوی اتیلن کربنات (EC) و دی متیل کربنات (DMC) با نسبت حجمی یک به یک (1:1 v/v) استفاده شد. برای جلوگیری از اتصال کوتاه الکتروودهای کاتد (CNFS) و آند (ورق لیتیوم)، از یک جداکننده استفاده شد. محلول الکترولیت اعمال شده برای شبیه سازی، یکی از الکترولیت‌های بسیار رایج و مورد استفاده در شرایط تجربی و عملی برای باتری‌های لیتیوم یون است. برای انجام این شبیه سازی از فیزیک باتری‌های لیتیوم یون^{۱۲} به همراه فیزیک انتقال گونه‌های رقیق شده^{۱۳} به صورت کوپل شده استفاده شد. تصاویر مش بندی صورت گرفته برای انجام این شبیه سازی برای هر سه ساختار در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل ۱: (الف) ساختار داربست‌های کاملاً الاین، (ب) نیمه الاین و (ج) درهم تنیده را نشان می‌دهد. با حل معادله لاپلاس برای این ساختارها، شار لاپلاسین محاسبه شده در قسمت (د) برای داربست کاملاً الاین، (ه) نیمه الاین و (و) درهم تنیده نشان داده شده است.

$$-\nabla \cdot \nabla(u) = 0 \quad \text{رابطه (۲)}$$

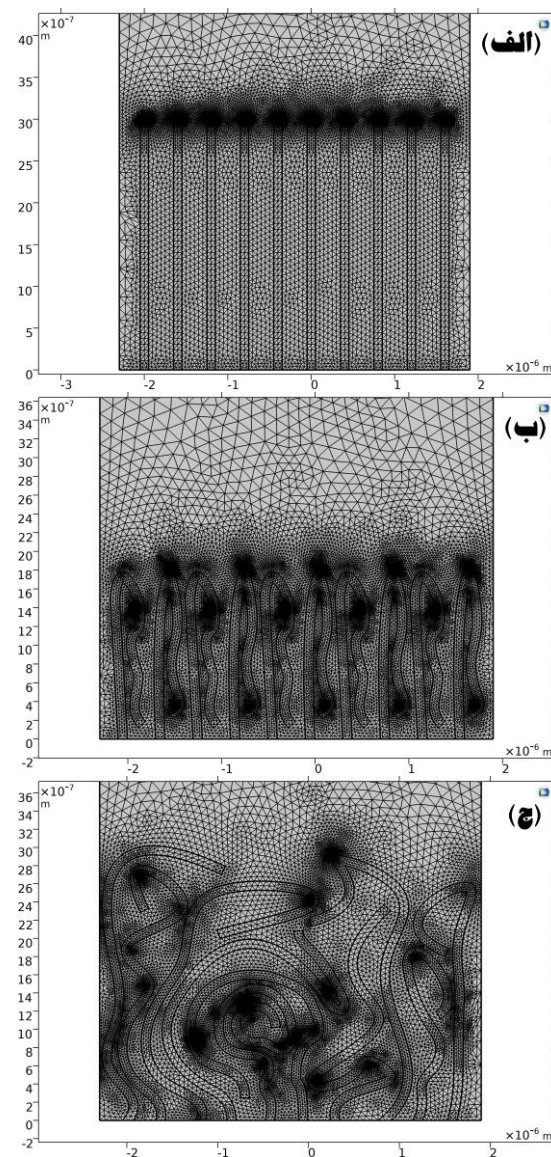
پژوهش های نوین در مهندسی برق و الکترونیک هوایی دوره دوم، شماره ۱، پاییز ۱۴۰۴

گذشت ۰/۳ ساعت از دشارژ (پایان دشارژ) نشان می دهد و خطوط پیکان دار شار یون های لیتیوم را در داخل سلول و پس از گذشت ۰/۳ ساعت از شروع دشارژ نشان می دهد.

شکل (۴) بزرگنمایی بیشتری از سلول را جهت جهت فهم بهتر و دقیق تر از شمایک داربست های درون نیم سلول، ارائه می دهد. شکل (۴-الف) الکترو د کاملاً الاین را نشان می دهد که در آن شار یون های لیتیوم نانوفیبرها را از بالا به عمق پوشانده است. اگرچه این شار در سطوح بالایی بیشتر و در سطوح پایینی کمتر است، اما غلظت یون های لیتیوم در داخل نانو فیبرها تقریباً یکنواخت است که به دلیل پیچ خوردگی کم ساختار و نفوذ زیاد یون های لیتیوم در داخل آن است. با توجه به نوار مقیاس یکسان در نظر گرفته شده برای هر سه الکترو د که در سمت راست هر شکل وجود دارد رنگ نانو فیبر ها نشان دهنده میزان غلظت لیتیوم در داخل نانو فیبر ها است.

شکل (۴-ب) الکترو د نیمه الاین را نشان می دهد که در آن نفوذ یون های لیتیوم به عمق سازه به دلیل افزایش پیچ خوردگی در مقایسه با ساختار کاملاً الاین کاهش یافته و نشست لیتیوم داخل ساختار با توجه به رنگ نانو فیبرها مقداری غیر یکنواخت تر شده است. شکل (۴-ج)، الکترو د درهم تنیده را نشان می دهد که این الکترو د دارای بیشترین میزان پیچ خوردگی در میان الکترو د های مورد مطالعه ما در این تحقیق است. در این الکترو د نفوذ یون های لیتیوم به عمق سازه با پیچیدگی و دشواری زیادی همراه بوده است که این پدیده باعث بوجود آمدن غیر یکنواختی زیادی در نشست لیتیوم درون نانوفیبرها شده است. از آنجایی که افزایش پیچ خوردگی سازه باعث کاهش دسترسی یون های لیتیوم به عمق الکترو د شده است، نشست لیتیوم در بالای سازه بیشتر از عمق الکترو د بوده است و لیتیوم به صورت ترجیحی در سطوح بالایی داربست ها تجمع یافته است. که این مهم با توجه به تغییر رنگ نانو فیبر ها کاملاً مشهود است.

با در نظر گرفتن ضرایب انتشار یون های Li^+ و PF_6^- در الکترو لیت و نانوفیبرها، خیلی مفید است بتوانیم زمان لازم برای انتشار درون آنها را تخمین بزنیم. از منظر تحقیقی، این امر به ما کمک می کند تا درک بهتری داشته باشیم که طی کردن طول و یا قطر نانوفیبرها با استفاده از مکانیزم انتشار^{۱۴} چقدر طول می کشد. در محلول ها، املاح در حال انتشار به سمت کم شدن گرادیان غلظت، از ناحیه ای با غلظت بالاتر به ناحیه ای با غلظت پایین تر حرکت می کنند.

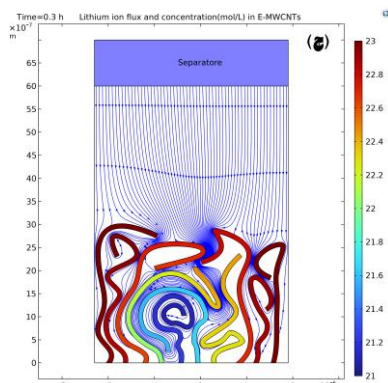
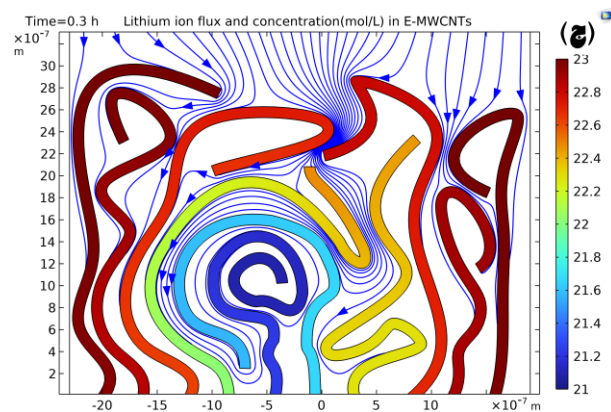
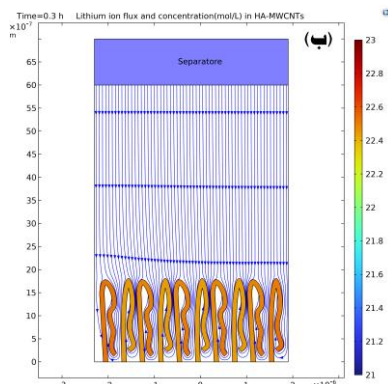
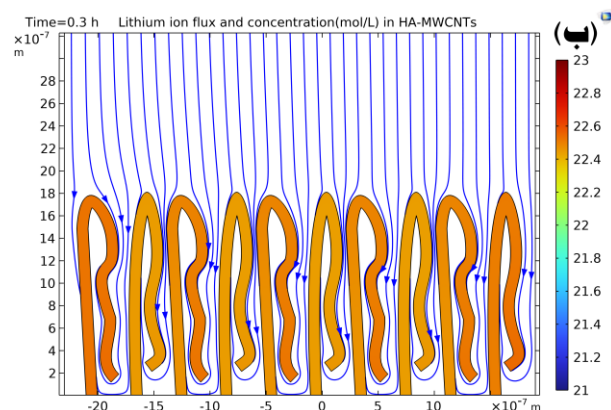
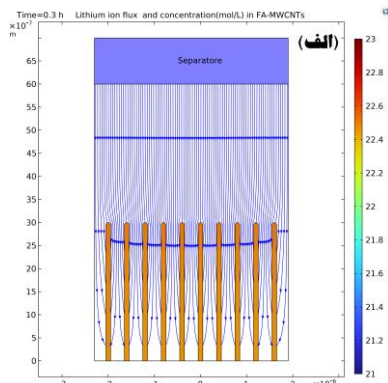
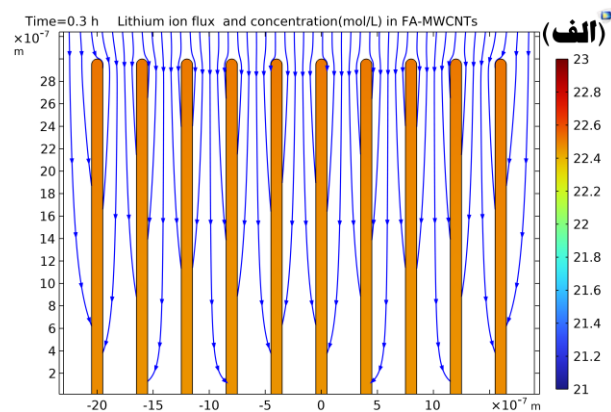


شکل ۲ : تصاویر مش بندی صورت گرفته برای شبیه سازی نیم سلول لیتیومی به صورت دوبعدی برای هر سه ساختار شامل الف) نانوفیبرهای کاملاً الاین، ب) نانوفیبرهای نیمه الاین و ج) نانوفیبرهای درهم تنیده را نشان می دهد.

شماتیک کامل سلول نیز در شکل (۳) ارائه شده است. یک نیم سیکل دشارژ کامل با نرخ جریان 3C برای هر سه الکترو د از جمله الکترو د های کاملاً الاین، نیمه الاین و درهم تنیده شبیه سازی شد و نتایج این مدل سازی در شکل های (۳) و (۴) برای این سه الکترو د نشان داده شده است. نوار مقیاس سمت راست غلظت یون های لیتیوم در داخل نانو فیبر ها را بر حسب مول بر لیتر بعد از

14. Diffusion

تأثیر پارامتر پیچش بر نشست لیتیوم درون نانوفیبرهای کربنی در حالت نیم سلول، سید علی حسینی



شکل ۴: شماتیک داربست های ساخته شده از : الف) نانوفیبرهای کاملاً الاین ب) نانوفیبرهای نیمه الاین و ج) نانوفیبرهای درهم تنیده را در درون نیم سلول لیتیومی با بزرگنمایی بیشتر نشان می‌دهد. این شبیه سازی وابسته به زمان است و نمودارهای این شکل مربوط به انتهای سیکل دشارژ و بعد از گذشت ۰/۳ ساعت از شروع آن هستند. رنگ نانوفیبرها غلظت لیتیوم نشسته شده در داخل شان را نشان می‌دهد. خطوط فلش دار آبی رنگ نیز مسیر عبور یون های لیتیوم در ساختار را نشان می‌دهند.

شکل ۳: شماتیک کامل نیم سلول به همراه فلاکس یون های لیتیوم را برای هر سه ساختار الف) کاملاً الاین ب) نیمه الاین و ج) درهم تنیده نشان می‌دهد که در بالای سلول جداکننده و فویل لیتیوم وجود دارند و در پایین سلول الکترولیت و داربست های نانو فیبری با پیچ خوردگی متفاوت وجود دارند. غلظت یون های لیتیوم بعد از گذشت ۰/۳ ساعت از شروع نیم سیکل دشارژ در داخل نانو فیبر ها در نوار مقیاس سمت راست هر نیم سلول نشان داده شده است که این غلظت بر حسب مول بر لیتر است. خطوط آبی رنگ پیکان دار موجود در هر شکل جریان یون های لیتیوم از سمت فویل لیتیوم به سمت داربست ها را نشان می‌دهد.

نوع ساختار از نانوفیبرهای کربنی مورد محاسبه قرار گرفت. بر این اساس میزان پیچش برای هر سه ساختار شامل کاملاً الاین، نیمه الاین و درهم تنیده به ترتیب برابر ۱/۰۱، ۱/۱۱، ۱/۴۱ و محاسبه گردید. این نتایج نشان دهنده افزایش پیچش ساختاری از ساختار کاملاً الاین تا ساختار در هم تنیده است.

سپس با مدل سازی دو بعدی نیم سلول لیتیومی برای این داربست ها از این ساختارهای متشکل از نانوفیبرهای کربنی به عنوان الکترود در باتری لیتیومی استفاده شد. نتایج این مدل سازی نشان داد با افزایش پیچش ساختاری، ناهمگونی نشست لیتیوم در درون نانوفیبرهای کربنی افزایش می یابد و ترجیح لیتیوم بر نشست در قسمت های بالایی نانوفیبرهای کربنی است. که خطر تشکیل دندریت های فلزی در آن قسمت ها را افزایش می دهد. به عبارتی لیتیوم به جای ورود به ساختار نانوفیبرها در بالای آن می نشیند که این امر باعث از دست رفتن لیتیوم فعال در چرخه، تشکیل دندریت های فلزی و خطر پاره شدن جداکننده خواهد شد، که همه این موارد باعث کاهش طول عمر باتری خواهد گردید. بنابراین می توان نتیجه گرفت هر چه میزان پیچش ساختاری افزایش یابد بالانشینی لیتیوم افزایش یافته و طول عمر قابل انتظار کمتر خواهد بود. در میان ساختارهای مدل سازی شده در این تحقیق انتظار داریم ساختار درهم تنیده کمترین طول عمر و ساختار کاملاً الاین بیشترین طول عمر را داشته باشد.

مراجع

- [1] C. Yang et al., "Roll-to-roll prelithiation of lithium-ion battery anodes by transfer printing," *Nat. Energy*, vol. 8, no. 7, pp. 703–713, 2023, doi: 10.1038/s41560-023-01272-1.
- [2] J. Bae et al., "A 3D Nanostructured Hydrogel-Framework-Derived High-Performance Composite Polymer Lithium-Ion Electrolyte," *Angew. Chemie Int. Ed.*, vol. 57, no. 8, pp. 2096–2100, Feb. 2018, doi: 10.1002/ANIE.201710841.
- [3] J. An, H. Zhang, L. Qi, G. Li, and Y. Li, "Self-Expanding Ion-Transport Channels on Anodes for Fast-Charging Lithium-Ion Batteries," *Angew. Chemie Int. Ed.*, vol. 61, no. 7, p. e202113313, Feb. 2022, doi: 10.1002/ANIE.202113313.
- [4] Z. Dai, Z. Li, R. Chen, F. Wu, and L. Li, "Defective oxygen inert phase stabilized high-voltage nickel-rich cathode for high-energy lithium-ion batteries," *Nat. Commun.*, vol. 14, no. 1, p. 8087, Dec. 2023, doi: 10.1038/s41467-023-43792-0.
- [5] S. Huang et al., "Interfacial friction enabling ≤ 20 μm thin free-standing lithium strips for lithium metal batteries," *Nat. Commun.*, vol. 14, no. 1, pp. 1–11, 2023, doi: 10.1038/s41467-023-41514-0.

از یک رابطه ساده که به معادله تقریب انیشتین معروف است (رابطه ۴) برای تقریب مدت زمان لازم برای انتشار یک مولکول معین در یک فاصله متوسط و در یک بعد استفاده می شود.

$$t = \frac{x^2}{2D} \quad \text{رابطه (۵)}$$

در این رابطه (t) زمان انتشار، (x) فاصله انتشار، و (D) ضریب انتشار هستند. زمان انتشار با مجذور فاصله انتشار افزایش می یابد. ضریب انتشار برای هر یون منحصر به فرد است و باید به صورت تجربی تعیین گردد. با توجه به دمای در نظر گرفته شده برای شبیه سازی (298 K) و جنس نانوفیبرها، ضریب انتشار لیتیوم درون نانوفیبرها در شبیه سازی برابر $D = 2.58 \times 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$ فرض شد. که مدل مورد استفاده برای ضریب انتشار وابسته به دما، همان مدل مورد استفاده در ماده گرافیت بود که در کامسول وجود دارد. این مدل بر مبنای تحقیق انجام گرفته توسط گروه پرفسور وایت [۲۱] از دانشگاه کارولینای جنوبی بوده است.

در این شبیه سازی قطر نانو فیبر ها ۱۰۰ نانومتر و طول آنها ۳ میکرومتر در نظر گرفته شده است. نانو فیبر ها از اطراف با الکترولیت احاطه شده اند و یون های لیتیوم از اطراف به درون آنها وارد می شوند. به عبارتی نفوذ یون های لیتیوم به درون نانو فیبر ها از هر دو طرف می باشد.

فاصله انتشار برای نفوذ در قطر نانوفیبرها، برابر ۵۰ نانومتر است. با استفاده از رابطه (۴) زمان تقریبی انتشار در قطر و طول نانوفیبرها به ترتیب ۴۸ میلی ثانیه و ۱۷۴ ثانیه محاسبه می گردد. دلیل یکسان بودن تقریبی غلظت لیتیوم در قطر نانو فیبر ها زمان انتشار پایین آنها در قطر بوده است (۴۸ میلی ثانیه). با توجه به زمان دشارژ ۲۰ دقیقه ای و گام های زمانی بالا در شبیه سازی وابسته به زمان، همگونی لیتیوم در قطر نانو فیبرها کاملاً مورد انتظار بوده است. اما از آنجایی که زمان انتشار در طول نانوفیبرها حدود ۱۷۴ ثانیه بوده است، مقدار کمی ناهمگونی غلظت در طول نانوفیبرها وجود دارد که مورد انتظار است. این نتایج نشان دهنده صحیح بودن شبیه سازی صورت گرفته برای نیم سلول لیتیومی بوده است.

۴-نتیجه گیری

بررسی پارامترهای تاثیر گذار در طراحی و ساخت الکترودهای نانو ساختار از اهمیت بسیار ویژه ای برخوردار است. در این تحقیق برای اولین بار از طریق شبیه سازی سه بعدی، و حل معادله لاپلاس میزان پارامتر پیچش برای سه

- [19] B. Ghanbarian, A. G. Hunt, R. P. Ewing, and M. Sahimi, "Tortuosity in Porous Media: A Critical Review," *Soil Sci. Soc. Am. J.*, vol. 77, no. 5, pp. 1461–1477, 2013, doi: 10.2136/sssaj2012.0435.
- [20] H. Chen et al., "Tortuosity Effects in Lithium-Metal Host Anodes," *Joule*, vol. 4, no. 4, pp. 938–952, 2020, doi: 10.1016/j.joule.2020.03.008.
- [21] K. Kumaresan, G. Sikha, and R. E. White, "Thermal Model for a Li-Ion Cell," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 155, no. 2, p. A164, 2008, doi: 10.1149/1.2817888.
- [6] H.-H. Ryu, H.-W. Lim, S. G. Lee, and Y.-K. Sun, "Near-surface reconstruction in Ni-rich layered cathodes for high-performance lithium-ion batteries," *Nat. Energy*, vol. 9, pp. 47–56, 2023.
- [7] A. Gohier et al., "High-rate capability silicon decorated vertically aligned carbon nanotubes for li-ion batteries," *Adv. Mater.*, vol. 24, no. 19, pp. 2592–2597, 2012, doi: 10.1002/adma.201104923.
- [8] H. Lin et al., "Twisted aligned carbon nanotube/silicon composite fiber anode for flexible wire-shaped lithium-ion battery," *Adv. Mater.*, vol. 26, no. 8, pp. 1217–1222, 2014, doi: 10.1002/adma.201304319.
- [9] J. Shi et al., "Application of magnetron sputtering to deposit a multicomponent separator with polysulfide chemisorption and electrode stabilization for high-performance lithium-sulfur batteries," *Surf. Coatings Technol.*, vol. 405, p. 126580, Jan. 2021, doi: 10.1016/J.SURFCOAT.2020.126580.
- [10] S. Qin et al., "Polymer dispersed ionic liquid electrolytes with high ionic conductivity for ultrastable solid-state lithium batteries," *Carbon Energy*, vol. 5, no. 5, pp. 1–12, 2023, doi: 10.1002/cey2.316.
- [11] C. Chen, J. Zhang, B. Hu, Q. Liang, and X. Xiong, "Dynamic gel as artificial interphase layer for ultrahigh-rate and large-capacity lithium metal anode," *Nat. Commun.*, vol. 14, no. 1, 2023, doi: 10.1038/s41467-023-39636-6.
- [12] J. Wagner-Henke, D. Kuai, M. Gerasimov, F. Röder, P. B. Balbuena, and U. Krewer, "Knowledge-driven design of solid-electrolyte interphases on lithium metal via multiscale modelling," *Nat. Commun.*, vol. 14, no. 1, 2023, doi: 10.1038/s41467-023-42212-7.
- [13] R. Zhang et al., "Coralloid Carbon Fiber-Based Composite Lithium Anode for Robust Lithium Metal Batteries," *Joule*, vol. 2, no. 4, pp. 764–777, 2018, doi: 10.1016/j.joule.2018.02.001.
- [14] M. Sha, H. Zhao, and Y. Lei, "Updated Insights into 3D Architecture Electrodes for Micropower Sources," *Adv. Mater.*, vol. 33, no. 45, p. 2103304, 2021, doi: 10.1002/adma.202103304.
- [15] J. H. Pikul, H. Gang Zhang, J. Cho, P. V. Braun, and W. P. King, "High-power lithium ion microbatteries from interdigitated three-dimensional bicontinuous nanoporous electrodes," *Nat. Commun.*, vol. 4, pp. 1–5, 2013, doi: 10.1038/ncomms2747.
- [16] P. Sun, X. Li, J. Shao, and P. V. Braun, "High-Performance Packaged 3D Lithium-Ion Microbatteries Fabricated Using Imprint Lithography," *Adv. Mater.*, vol. 33, no. 1, pp. 1–7, 2021, doi: 10.1002/adma.202006229.
- [17] C. Wang, M. Liu, M. Thijs, F. G. B. Ooms, S. Ganapathy, and M. Wagemaker, "High dielectric barium titanate porous scaffold for efficient Li metal cycling in anode-free cells," *Nat. Commun.*, vol. 12, no. 1, pp. 1–11, 2021, doi: 10.1038/s41467-021-26859-8.
- [18] J. Fu, H. R. Thomas, and C. Li, "Tortuosity of porous media: Image analysis and physical simulation," *Earth-Science Rev.*, vol. 212, p. 103439, 2021, doi: 10.1016/j.earscirev.2020.103439.