

## Kuramsal Sıvı Hal Laboratuarı (KSL)

Kuramsal Sıvıhal Laboratuarı'nda, kuramsal ve bilgisayar benzetim yöntemleriyle katı ve sıvı sistemlerin yapısal, termodinamik ve transport özellikleri araştırılmaktadır.

Çalışılan malzemeler genellikle Katı Elektrolitler veya Hızlı İyon İletkenleri olarak da bilinen Süperiyonik İletkenlerdir (AgI, CuI, RbAg<sub>4</sub>I<sub>5</sub>...). Bunların yanı sıra sıradan iyonik sıvılar ve katılar da araştırılmaktadır.

## Yöntemler

-Sıvı hal teorileri – İntegral denklem teorileri (Hypernetted-Chain (HNC), Modified HNC, ...)

<http://www3.imperial.ac.uk/pls/portallive/docs/1/50527700.PDF>

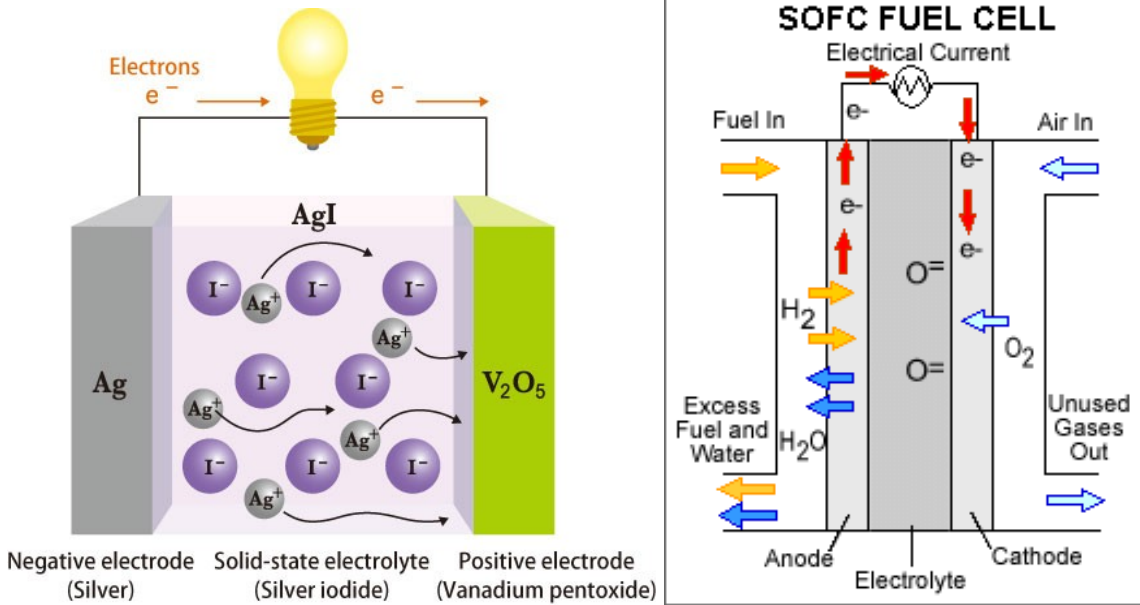
*J.P. Hansen and I. R. McDonald, Theory of Simple Liquids, Academic, New York,*

-Moleküler Dinamik Simülasyon yöntemi

[www.me.utexas.edu/~lishi/L23.ppt](http://www.me.utexas.edu/~lishi/L23.ppt)

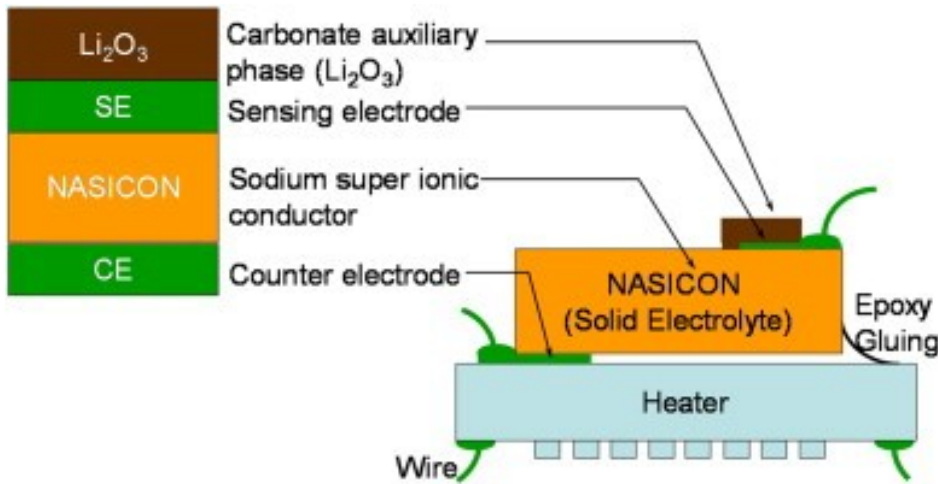
*Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, J. M. Haile*

Bu malzemelerin, katı piller, yakıt pilleri, gaz sensörleri ve zararlı gaz ayırıcıları gibi önemli uygulamaları vardır:

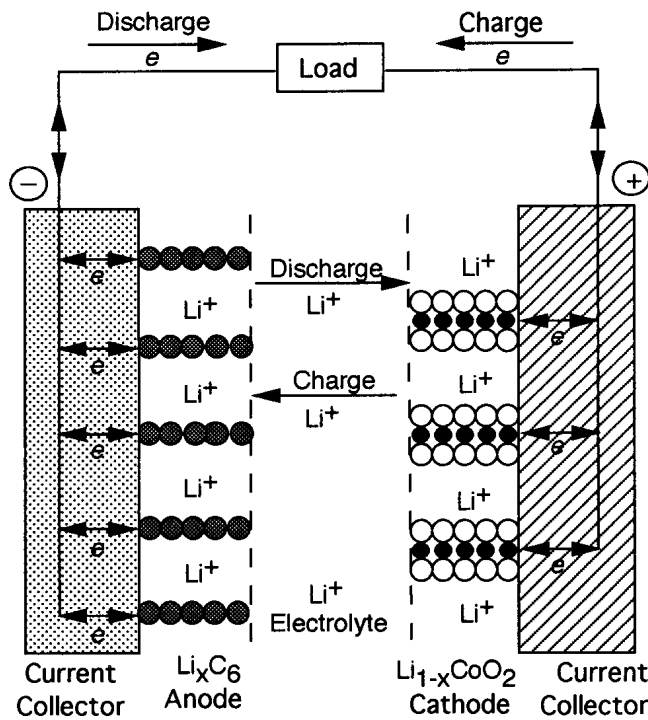


[http://www.spring8.or.jp/en/news\\_publications/publications/scientific\\_results/structural\\_materials/topic14](http://www.spring8.or.jp/en/news_publications/publications/scientific_results/structural_materials/topic14)

[http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/fuelcells/fc\\_types.html](http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/fuelcells/fc_types.html)



<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040609010010618>



**Figure 6.** Schematic illustration of the discharge and charge processes in a rechargeable lithium ion battery. In the  $\text{Li}_x\text{-CoO}_2$  cathode, the solid and open circles refer, respectively, to Co and O atoms (adapted from ref 14).

A. Manthiram & J. Kim – “Low Temperature Synthesis of Insertion Oxides for Lithium Batteries”, *Chem. Mater.* 10, 2895-2909 (1998)

### Arařtırmacılar

Prof.Dr. etin Tařseven  
 Dr. Unsal Akdere  
 Dr. Sekin Dndar Gnay