

УДК 531.19

Р.Н. Ласовский, канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

## РАСЧЕТ ПРОВОДИМОСТИ ТВЕРДЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ В СТАЦИОНАРНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Для моделирования переноса заряда в твердоэлектrolитной керамике использовались методы решеточных теорий. Для учета базовых особенностей исходили из того, что ионные системы, подлежащие описанию, характеризуются наличием зарядов двух разных сортов [1]. Один из них – это высокоподвижные заряды (вакансии или катионы), обуславливающие процессы электропроводности среды; вторые – малоподвижные заряды противоположного знака, создающие компенсирующий фон и соответствующую поляризацию среды, т.е. объемный заряд. Для построения описания, соответствующего поставленной цели, рассматривается двухкомпонентная система, состоящая из частиц сортов  $a$  и  $b$ , перемещающихся по узлам соответствующих подрешеток, каждая из которых содержит  $N$  узлов.

Для учета влияния границ зерен в рамках рассматриваемой модели естественным представляется моделирование границы через искажение характеристик подрешеток  $a$  и  $b$ , по которым перемещаются частицы обоих сортов. Для учета такого обстоятельства исходное выражение для функции распределения модифицируем, добавляя кристаллический одночастичный потенциал, соответствующий области межфазной границы.

Для определения электросопротивления межзеренной границы в соответствии с изложенным подходом рассматривалась плоская квадратная решетка. В центре этой решетки расположена тонкая полоса узлов, моделирующая тонкую межзеренную границу. Исследуемая система состоит из частиц сортов  $a$  и  $b$ , перемещающихся по узлам соответствующих подрешеток.

В результате численного решения кинетических уравнений при отсутствии электрического поля получено равновесное состояние, соответствующее неоднородному распределению заряда в виде двух конденсаторных слоев, обуславливающих реактивное сопротивление на высоких частотах. В дальнейшем полученное распределение будет использовано при расчете проводимости межзеренных границ.

*Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ,  
грант № X13ЛИТ-002*

### ЛИТЕРАТУРА

1 Бокун Г. С. Диффузионный импеданс твердого электролита в рамках решеточной модели / Г. С. Бокун // Труды БГТУ. – 2013. – Физ.-мат. науки и информ. – № 6 (162) – С. 27–30.