

УДК 531.19

Я. Г. Грода, зав. кафедрой, канд. физ.-мат. наук;
В.С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СЛУЧАЙНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЫСОТ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ НА ЭНЕРГИЮ АКТИВАЦИИ В РАМКАХ КВАЗИОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ ТОПЛИВНОЙ ЯЧЕЙКИ

В докладе рассмотрена одномерная дискретная модель топливного элемента, в которой массив электролита разбит на слои, содержащие по три ячейки, которые могут быть заняты ионом или вакансией. При отсутствии внешнего потенциала, приложенного к электродам, каждый из выделенных слоев содержит только одну вакансию и является электронейтральным. При этом каждый из слоев имеет два возможных положения для отрицательно заряженного иона и одно — для положительно заряженного. В дальнейшем положительные ионы считаются фиксированными, тогда как отрицательные могут совершать переходы с одного слоя на другой.

Процесс миграции подвижных ионов между ячейками электролита был смоделирован с помощью динамического метода Монте-Карло, в рамках которого вероятность перехода отрицательно заряженного иона из слоя j в соседний слой k определяется как действием электрического поля, так и величиной энергетического барьера между слоями. Величина последнего принимает случайные значения, подчиняющиеся распределению Гаусса с заданной величиной дисперсии.

Моделирование системы с заблокированными электродами показало, что вблизи каждого из электродов образуется двойной электрический слой толщиной порядка 5 рассматриваемых слоев, в то время как оставшаяся часть электролита остается электронейтральной.

При использовании периодических граничных условий определена зависимость логарифма тока, протекающего через электролит, от обратной температуры. Линейный характер этой зависимости позволил определить среднюю энергию активации системы E_a и рассмотреть ее зависимость от параметра дисперсии.

Анализ полученных результатов показал, что энергия активации нелинейно зависит от параметра дисперсии, снижаясь с его увеличением. Такой характер зависимости объясняется, по нашему мнению тем, что при увеличении параметра дисперсии увеличивается число межузельных барьеров, высота которых оказывается существенно ниже средней высоты барьера. Соответственно, возможность движения частицы вдоль данных относительно низких барьеров и проявляется в снижении средней энергии активации.