

Р. Н. Ласовский, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);  
Т. Н. Пацаган, канд. физ.-мат. наук (ИФКС НАНУ, г. Львов)

## **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩЕЙ КЕРАМИКИ С ПРИМЕСНЫМИ ИОНАМИ, СЕГРЕГИРОВАННЫМИ НА МЕЖЗЕРЕННОЙ ГРАНИЦЕ**

В настоящее время в электрохимических системах активно используются жидкие растворы ионных солей или полимерные ионообменные мембраны, что сопряжено с опасностью появления утечек и воспламенения. Переход к электрохимическим элементам с твердотельными электролитами позволит повысить прочность, долговечность, экологичность и безопасность источников энергии, расширить диапазон рабочих температур. Для описания твердотельных электролитов широко используются решеточные модели [1, 2]

Ионная проводимость поликристаллической керамики обычно намного ниже ионной проводимости монокристалла из-за наличия межзеренных границ. Они блокируют непрерывные области миграции ионов, что приводит к значительному сопротивлению.

Рассмотрена трехмерная модель оксидной керамики, содержащей зерно и межзеренную прослойку, описываемую слоем с сегрегированными неподвижными примесными ионами. Выполнено моделирование описанной системы по кинетическому методу Монте-Карло. При этом кулоновская энергия определялась суммированием по методу Эвальда.

Показано, что температурная зависимость числа частиц, прошедших через границу, которое пропорционально электрическому току, носит аррениусовский характер, что позволило определить энергию активации электропроводности.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Ласовский Р. Н., Бокун Г. С., Вихренко В. С. Диаграммное приближение для неравновесных и неоднородных состояний решеточных систем // Труды БГТУ Сер. VI – физ.-мат. науки и информ. – 2010. – Вып. 18. – С. 59 – 62.
2. Bokun, G. S. Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Nanostructurization caused by first order phase transitions in systems with hopping dynamics // Solid State Ionics. – 2013. – Vol. 251. – P. 51–54.