

Ж. В. Сотула, Н. И. Штефан // Труды МНТК «Гиротехнологии, навигация, управление, движение и конструирование авиац.-космич. техники». - Киев, НТУУ «КПИ», 2013. - С.303-309.

УДК 531.19

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

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОЛИТА СО СЛЯБ ГЕОМЕТРИЕЙ

Твердые электролиты являются предметом интенсивной научной деятельности ввиду широких перспектив их промышленного применения. На их основе, например, изготавливаются аккумуляторные батареи [1], топливные элементы [2], суперконденсаторы, напоминающие устройства и т. д. Во многих случаях твердые электролиты представляют собой керамику или поликристаллиты, что требует разработки специфических методов их получения и экспериментальных исследований. Для описания таких систем широко используются решеточные модели [3].

Рассмотрена трехмерная модель твердотельного электролита со сляб геометрией, содержащей зерно и межзеренную прослойку, описываемую слоями, характеризующимися дополнительными межузловыми энергетическими барьерами.

Взаимодействие между подвижными ионами принималось состоящим из дальнодействующего электростатического отталкивания и короткодействующего притяжения. Система находится между двумя противоположно заряженными электродами.

Выполнено моделирование описанной системы по методу Монте-Карло. При этом кулоновская энергия определяется суммированием по методу Эвальда с добавлением дополнительных “вакуумных областей” с обеих сторон сляба. Исследован профиль концентрации подвижных ионов при различных условиях.

ЛИТЕРАТУРА

1. High-Energy All-Solid-State Lithium Batteries with Ultralong Cycle Life / X. Yao [et al.] // *Nano Lett.* 2016. Vol. 16, no. 11. P. 7148–7154.
2. Solid Oxide Fuel Cells: Materials Properties and Performance / J. Zhang [et al.] // CRC Press, 2016. 298 p.
3. Bokun G. S., Groda Y. G., Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Unusual properties of a model of an intergrain boundary in solid oxide ceramic electrolytes // *Solid State Ionics.* 2017, vol. 302, P. 25–29.