

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

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ В ТВЕРДОТЕЛЬНОМ КЕРАМИЧЕСКОМ ЭЛЕКТРОЛИТЕ

Для описания твердотельных электролитов широко используются решеточные модели [1, 2]. В работе рассматривается трехмерная решеточная модель керамического ионного проводника. При этом кроме дальнедействующего электростатического отталкивания между ионами, в модели учитывается вандерваальсовское притяжение ближайших соседей. Ионы выполняют термоактивированные прыжки в случайно выбранные вакантные узлы. 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. Для воспроизводства эффекта повышенного сопротивления межзеренной границы будем моделировать ее слоем с сегрегированными неподвижными ионами.

Выполнено моделирование описанной системы по кинетическому методу Монте-Карло. Показано, что температурная зависимость числа частиц, прошедших через границу, которое пропорционально электрическому току, носит аррениусовский характер. Это позволяет определить энергию активации. Также отмечено, что энергия активации имеет слабую зависимость от величины межзеренных границ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ласовский Р. Н. Диаграммное приближение для неравновесных и неоднородных состояний решеточных систем / Р. Н. Ласовский, Г. С. Бокун, В. С. Вихренко // Труды БГТУ Сер. VI – физ.-мат. науки и информ. – 2010. – Вып. 18. – С. 59 – 62.

2. Ласовский Р. Н. Эволюция межфазной границы решеточной системы в приближениях среднего поля и квазихимическом / Р. Н. Ласовский, Г. С. Бокун // Труды БГТУ. Сер. IV, физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 39–41.