

Кристаллохимические и квантовомеханические подходы для анализа диффузии в ионных проводниках

Федотов Станислав Сергеевич

Научные руководители: к.х.н., в.н.с. Хасанова Н.Р., д.х.н., проф. Антипов Е.В.

Рецензент: Иткис Д.М.

Необходимым условием возникновения ионной проводимости в неорганическом соединении является наличие в кристаллической структуре протяженной сети пустот и каналов. Обладая надежной информацией о кристаллической структуре и используя метод построения полиэдров Вороного-Дирихле [1], можно получить набор элементарных пустот и каналов, отсеивание которых согласно ряду кристаллохимических критериев приведет к построению путей диффузии выбранного подвижного иона (Li^+ , Na^+ и др.).

Другой подход, метод валентных усилий связи (ВУС, bond valence sum, BVS), исторически применялся в качестве простого инструмента для подтверждения надежности решения или уточнения кристаллических структур неорганических соединений [2]. Компьютерное исполнение этого метода предоставило новые возможности, в частности, для анализа диффузии и прямой визуализации путей миграции ионов [3,4].

Обозначенные подходы достоверно могут дать лишь качественную оценку возможности диффузии тестового иона в том или ином исследуемом соединении. При более глубоком анализе данные кристаллохимические подходы часто используют в совокупности с различными вычислительными методами, основанными на квантовомеханических моделях (методы молекулярной динамики, теории функционала плотности, максимальной энтропии) [5].

В докладе будут рассмотрены краткие теоретические основы, преимущества и недостатки кристаллохимических и квантовомеханических методов для оценки диффузии на примере электродных материалов для металл-ионных аккумуляторов.

[1] Blatov V.A. *Cryst. Rev.* **10**, (2004), 249-318.

[2] Brown, I. D. *Chem. Reviews* **109** (2009) 6858–6919.

[3] Sale, M., Avdeev, M. *J. Appl. Cryst.* **45** (2012) 1054–1056.

[4] Antipov, E.V., Khasanova N.R., Fedotov S.S. *IUCrJ* **2** (2015) 85–94.

[5] Liu, J., Khalifah, P. et al. *Chem. Mater.* **26** (2014), 3295–3305