

Ивонина Мария Васильевна

В 2017 году получила степень бакалавра в Институте химии СПбГУ. Под научным руководством Сизова Владимира Викторовича, работая на кафедре физической химии, выполнила выпускную квалификационную работу на тему «Многомасштабное моделирование диффузии ионов кислорода в твердых оксидах на основе ZrO_2 », которая была посвящена изучению ионного транспорта в ZrO_2 , dopированном Sc_2O_3 (scandia-stabilized zirconia, ScSZ) в сравнении с ZrO_2 , dopированном Y_2O_3 (yttria-stabilized zirconia, YSZ) методами молекулярной динамики и теории функционала плотности. Данные материалы представляют большой интерес, так как являются перспективными кислородпроводящими твердыми электролитами в производстве высокотемпературных твердооксидных топливных элементов.

В ходе работы было проведено молекулярно-динамическое моделирование диффузии ионов кислорода в системе ScSZ в широком интервале содержания Sc_2O_3 при нескольких температурах. С целью нивелирования эффектов локальных неоднородностей расчеты каждой системы проводились для 20 случайных конфигураций. Статистический анализ всех полученных результатов позволил найти концентрационные зависимости коэффициентов диффузии, энергии активации диффузии и координационных чисел. Для более глубоко понимания процессов ионного транспорта были проведены квантовохимические расчеты барьеров миграции анионов кислорода в ScSZ и YSZ, а также энергий ассоциации кислородных вакансий с примесными катионами.

В ходе работы было показано, что интенсивность ионного транспорта зависит от состава керамики, так как с увеличением содержания допиравшего оксида сильнее проявляется неоднородность энергетических барьеров миграции, что отражается и в изменении структурных характеристик.