

РЕФЕРАТ

Дипломна робота: 75 сторінок, 12 рисунків, 10 таблиць, 49 літературних джерел.

Мета роботи: на основі першопринципних підходів провести моделювання структури LiFePO_4 ; розрахувати коефіцієнти дифузії та енергію активації дифузії атома літію в об'ємі та на поверхні.

Методи дослідження: теорія функціоналу щільності, метод пружної стрічки, узагальнене градієнтне наближення.

Предмет дослідження: система LiFePO_4 .

Наукова новизна: дослідження свідчать про те, що причиною повільної дифузії літію в структурі LiFePO_4 є ряд факторів, які пов'язані з особливостями її будови. Результати роботи визначають напрямок подальших досліджень в цій області.

Практичне значення: отримана модель може бути використана при розробці нових катодних матеріалів для літієвих акумуляторів.

LiFePO_4 , МОДЕЛЮВАННЯ, VIRTUAL NANOLAB, ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛУ ЩІЛЬНОСТІ, МЕТОД ПРУЖНОЇ СТРІЧКИ, ДИФУЗИЯ