

## РЕФЕРАТ

**Звіт з переддипломної практики:** 29 сторінок, 7 рисунків, 1 таблиця, 30 літературних джерел.

**Мета роботи:** Моделювання структур  $\text{LiFePO}_4$ , оцінка, на основі проведених розрахунків, можливості їх подальшого застосування в літієвих джерелах струму.

**Об'єкт дослідження:** Система  $\text{LiFePO}_4$ .

**Методи дослідження:** Дослідження здійснювалися за допомогою квантово-хімічного моделювання в ліцензійному програмному пакеті Virtual NanoLab в рамках методу функціоналу щільності (DFT).

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

**Результати та їх новизна:** Проведені дослідження свідчать про те, що накопичення літію на поверхні є причиною його повільної дифузії, а саме лімітуючою стадією переходу з поверхні в приповерхневих шарах. Результати роботи визначають напрямок подальших досліджень в цій області.

$\text{LiFePO}_4$ , МОДЕЛЮВАННЯ, VIRTUAL NANOLAB, ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛУ ЩІЛЬНОСТІ, МЕТОД ПРУЖНОЇ СТРІЧКИ, ДИФУЗИЯ