



Российская академия наук
Институт проблем химической физики РАН
Отдел функциональных материалов для химических источников энергии
«Научно-консалтинговый центр «Форум-СМ»
Научный совет по электрохимии Российской академии наук
Центр компетенции НТИ «Новые и мобильные источники энергии»
Smart-Stat

16-е Собрание с международным участием
«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ИОНИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА»

16th International Meeting «Fundamental Problems of Solid State Ionics»

ТРУДЫ СОВЕЩАНИЯ
Proceedings of the Meeting

Московская обл., г. Черноголовка, 27 июня - 03 июля 2022 г.
Chernogolovka, Moscow region, Russian Federation, June 27 – July 03, 2022

web-site: <http://fpssi16.altres.su/>

С-3-16. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОДВИЖНОСТИ ИОНОВ ФТОРА В НАНОЧАСТИЦАХ $Pb_{0.8}Sr_{0.2}F_2$

Петров А.В., Цзи Цяньлун, Мурин И.В.

Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия

e-mail: a.petrov@spbu.ru

Компьютерное моделирование наноразмерных твердых растворов суперионных проводников позволяет объяснить природу ионного транспорта на основе адекватного описания физико-химических свойств наиболее перспективных фторпроводящих систем [1].

Методом классической молекулярной динамики моделировалась подвижность ионов фтора в сферических частицах твердых растворов на основе фторида свинца (II) $Pb_{0.8}Sr_{0.2}F_2$ диаметром 4 нм. Общее число атомов составляло 1959. Создание структурной модели наночастицы, параметризация параметров силового поля, расчёт методом молекулярной динамики и анализ полученных результатов проводился с помощью программ Amorphous Cell, Gulp и Forcite из программного пакета Materials Studio. Расчёт выполнялся в режиме NVT, общее время расчёта составляло 50 ps с шагом интегрирования – 1 fs при температуре около 1000 К.

Разработка расчётной схемы осуществлена на базе фторида свинца. На первом этапе была оптимизирована геометрия наночастицы PbF_2 и был проведён расчёт методом молекулярной динамики. На втором этапе, для моделирования системы $Pb_{0.8}Sr_{0.2}F_2$ 20% атомов свинца случайным образом были замещены на атомы стронция.

На основе анализа выполненного моделирования, можно сделать следующие выводы:

1. Введение 20% атомов стронция стабилизирует флюоритовую решётку наночастицы $Pb_{0.8}Sr_{0.2}F_2$, тогда как в наночастице PbF_2 наблюдается значительное разупорядочение в катионном мотиве при температуре моделирования;
2. Анализ среднеквадратичных смещений ионов фтора в бинарной системе твердого раствора $Pb_{0.8}Sr_{0.2}F_2$ показал увеличение их подвижности.

Благодарности. Исследования были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного Центра "Вычислительный центр СПбГУ" (<http://cc.spbu.ru>). Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-23-00465.

Литература

[1] Petrov A.V., Salamatov M.S., Ivanov-Schitz A.K., Murin I.V. Nanoscale Effects in PbF_2 - CdF_2 Solid Solutions. Crystallography Reports. 2019. V. 64(6). P. 932-936.

**P-3-16. COMPUTER SIMULATION OF THE MOBILITY OF FLUORINE IONS
IN $\text{Pb}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{F}_2$ NANOPARTICLES**

A.V. Petrov, Ji Qianlong, I.V. Murin

St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

e-mail: a.petrov@spbu.ru

Computer simulation of nanosized solid solutions of superionic conductors makes it possible to explain the nature of ion transport based on an adequate description of the physicochemical properties of the most promising fluorine-conducting systems [1].

The mobility of fluorine ions in spherical particles with diameter of 4 nm of solid solutions based on lead(II) fluoride $\text{Pb}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{F}_2$ was simulated by the method of classical molecular dynamics. The total number of atoms was 1959. The creation of a structural model of a nanoparticle, parametrization of the force field, calculation by the molecular dynamics method, and analysis of the results obtained were carried out using the Amorphous Cell, Gulp, and Forcite programs from the Materials Studio software package. The calculation was performed in the NVT ensemble, the total calculation time was 50 ps with an integration step of 1 fs at a temperature of about 1000 K.

The design scheme was developed on the basis of lead fluoride. At the first stage, the geometry of the PbF_2 nanoparticle was optimized and the calculation was carried out using the molecular dynamics method. At the second stage, for simulation of the $\text{Pb}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{F}_2$ system, 20% of lead atoms were randomly replaced by strontium atoms.

Based on the analysis of the performed simulation, the following results are presented:

1. The introduction of 20% strontium atoms stabilizes the fluorite lattice of the $\text{Pb}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{F}_2$ nanoparticle, while in the PbF_2 nanoparticle, significant disordering in the cationic motif is observed at the simulation temperature;
2. An analysis of the root-mean-square displacements of fluorine ions in the binary system of the $\text{Pb}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{F}_2$ solid solution showed an increase of their mobility.

Acknowledgements. The research was carried out using the computing resources of the Resource Center "Computer Center of St. Petersburg State University" (<http://cc.spbu.ru>). This work was supported by the Russian Science Foundation grant no. 22-23-00465.

References

- [1] A.V. Petrov, M.S. Salamatov, A.K. Ivanov-Schitz, I.V. Murin // Nanoscale Effects in PbF_2 - CdF_2 Solid Solutions. Crystallography Reports. 2019. V. 64(6). P. 932-936.