

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

Государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Уральский государственный университет им.
А.М. Горького»

ИОНЦ «Нанотехнологии и перспективные материалы»

Химический факультет

Кафедра физической химии

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ
**«ДЕФЕКТЫ И СВОЙСТВА ПЕРСПЕКТИВНЫХ ОКСИДНЫХ
МАТЕРИАЛОВ»**

ЕКАТЕРИНБУРГ 2008

Студенты, обучающиеся по дисциплине «ДЕФЕКТЫ И СВОЙСТВА ПЕРСПЕКТИВНЫХ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ» должны приобрести следующие компетенции:

- 1) Знание принципов математического моделирования дефектной структуры кристаллических оксидных материалов и умение решать прямую и обратную задачу математического моделирования.
- 2) Представление о видах и целях математического моделирования дефектной структуры кристаллических тел.
- 3) Использование моделирования как способа проверки научных гипотез.

Студенты, изучившие эту дисциплину, должны иметь навыки по обработке данных эксперимента, как способу решения обратной задачи математического моделирования, и - по имитационному моделированию (вычислительному эксперименту).

Они должны хорошо представлять термодинамическое описание процессов разупорядочения кристаллической решетки оксидных соединений, относящихся к различным структурным типам.

Студенты, обучающиеся по этой дисциплине, приобретают навыки по компьютерному моделированию реальной (дефектной структуры) простых и сложных оксидных соединений. Они способны верифицировать предложенную модель дефектной структуры на основании данных эксперимента путем решения минимизационной задачи.

Наконец, они в состоянии промоделировать различные свойства оксидных материалов, зависящих напрямую от характера разупорядочения, такие как общая, парциальная электронная и ионная проводимость, коэффициент Зеебека и химического расширения с использованием модели их реальной структуры.

Поэтому при изучении дисциплины «ДЕФЕКТЫ И СВОЙСТВА ПЕРСПЕКТИВНЫХ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ» необходимо опираться на содержание общего курса «Численные методы и программирование» и спецкурсов «Термодинамика и структура твердого тела» и «Структура и

свойства сложнооксидных систем», и «Моделирование реальной структуры и свойств материалов в среде Maple». Обучающиеся по этой дисциплине должны достаточно хорошо владеть не только необходимой учебной литературой, но и оригинальной научной литературой по проблемам взаимосвязи дефектной структуры и свойств перспективных оксидных материалов. Прежде чем приступить к непосредственному решению модельной задачи для определенного оксидного материала, следует познакомиться с имеющимися в литературе данными по этому материалу, знание которых необходимо для понимания и решения проблемы.

Помимо знания структуры и физико-химических свойств моделируемых объектов необходимо хорошо представлять принципы самого моделирования и методы решения минимизационной задачи, например, метод наименьших квадратов. Следует обратить внимание на то, что при верификации модели методом нелинейной регрессии параметры модели подгоняются формально. Поэтому необходимо уделять повышенное внимание их физическому смыслу. Следует отметить, что нередко наилучшее схождение теоретической модели и экспериментальных данных достигается при таких значениях параметров, которые не имеют физического смысла, например, отрицательных значениях констант равновесия. С другой стороны, следует критически оценивать сами экспериментальные данные, на основе которых выполняется верификация. Такие признаки, как большой разброс в данных, могут означать их недостоверность.

Если подогнанные значения параметров модели с первого взгляда не вызывают подозрения, то необходимо рассчитать зависящие от них свойства и убедиться, что их физический смысл в полном порядке. Например, получив значения констант равновесия реакций дефектообразования, необходимо рассчитать концентрацию дефектов и убедиться, что ее величина не противоречит физическому смыслу.

Наконец, стоит обратить внимание на то, что часто две модели, построенные исходя из альтернативных физико-химических особенностей

моделируемой системы, согласуются с экспериментальными данными, на основе которых они верифицируются, практически одинаково хорошо. В этом случае выбор модели лучше всего осуществить на основе прямого расчета некоторого свойства, значение которого измерено экспериментально. В таком расчете свойства значения параметров не подгоняются, а расчетное значение просто сравнивается с экспериментальным.

Учебное пособие «ДЕФЕКТЫ И СВОЙСТВА ПЕРСПЕКТИВНЫХ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ» предназначено для сопровождения курса с одноименным названием. Оно призвано оказать существенную помощь изучающим этот курс по всем его разделам.

Для работы с пособием желательно иметь программу компьютерной математики Maple, установленную на пользовательском компьютере в версиях не младше чем Maple 10 (Maple 11 или Maple 12). Следует проделать шаги, описанные в пособии в рабочем листе указанной программы. Для существенного увеличения эффективности работы рекомендуется использовать интерактивные рабочие листы Maple, содержащиеся в электронном варианте пособия «Моделирование реальной структуры и свойств материалов в среде Maple». Рекомендуется сохранить файлы пособия на персональном компьютере обучаемого. Следует также сохранять измененные файлы на своем компьютере.