

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

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

Химический факультет
Кафедра физической химии

**ФОРМИРОВАНИЕ ЦЕЛЕВЫХ СВОЙСТВ ПЕРСПЕКТИВНЫХ
МАТЕРИАЛОВ. ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЕ.**

Методические указания к изучению дисциплины

(Стандарт ПД-СД)

Екатеринбург

2008

Методические указания к изучению дисциплины «Формирование целевых свойств перспективных оксидных материалов. Теория и практика применения в твердооксидных топливных элементах».

Данное учебное пособие призвано показать химию новых перспективных оксидных материалов как науку, изучающую традиционную для химии вообще взаимосвязь между структурой, составом и свойствами веществ с учетом особенностей твердого состояния, а также дать представление о современных проблемах в данной области знания, решение которых позволит создавать новые твердофазные материалы с заданными свойствами.

Современный специалист в области материаловедения должен иметь знания о методах получения, структуре, химических и физических свойствах твердых оксидов. Данный раздел знаний находится на стыке двух фундаментальных наук: физики и химии твердого состояния. В результате современная физическая химия оперирует как понятиями классической химии (химическая связь, химический состав, реакции и т.п.), так и понятиями физики (дефекты в электронной и атомной структурах).

Под термином «состав» в современной химии твердого тела понимают не только соотношение основных компонентов, но и отклонения (в том числе и малые) от стехиометрии, а также содержание примесей, их распределение в объеме и на поверхности объекта. Термином «структура» обозначают кристаллическую структуру (дальний порядок), реализующуюся при данном элементном составе, тип, концентрацию и распределение доминирующих дефектов и микроструктуру — размеры и форму кристаллитов, их взаимную ориентацию, строение поверхности раздела фаз. Из разнообразных свойств твердых тел в данном пособии рассматриваются преимущественно те, которые связаны с дефектной структурой и переносом массы и заряда в сложных оксидах.

Понятно, что поставленная задача не может быть решена, если оставаться в рамках только неорганической, физической, коллоидной химии или физики

твёрдого тела, т.е. тех областей науки, которые часто рассматривают (по отдельности) упомянутые факторы. Поэтому при изучении дисциплины «Формирование целевых свойств перспективных оксидных материалов. Теория и практика применения в твердооксидных топливных элементах» необходимо опираться на содержание спецкурсов «Термодинамика и структура твёрдого тела», «Кинетика и механизм твердфазного синтеза» и «Структура и свойства сложнооксидных систем». Обучающиеся по этой дисциплине должны достаточно хорошо владеть не только необходимой учебной литературой, но и оригинальной научной литературой по проблемам формирования свойств перспективных оксидных материалов для различных современных приборов и устройств.

Для лучшего освоения материала студентам предлагается проанализировать оригинальные научные статьи и выступить на семинаре. Студентам предоставляется возможность провести компьютерное моделирование процессов взаимодействия дефектов в кристалле на экспериментальных данных, представленных в оригинальной научной литературе.

В данном пособии химия новых перспективных оксидных материалов представлена как последовательность взаимосвязанных глав.

Первая глава посвящена проблемам дефектного состояния твёрдых тел, влиянию газовой фазы на равновесие дефектов в твёрдых телах.

Во второй главе рассматриваются электротранспортные свойства сложных оксидов: совместный перенос массы и заряда, температурная зависимость электронной проводимости в смешанных проводниках, гальванические цепи для изучения неорганических соединений с высокой электронной составляющей проводимости.

В третьей главе представлены конкретные примеры применения оксидных материалов в современной энергетике, преимущества топливных элементов по сравнению с традиционными методами производства энергии.

Четвертая глава посвящена материалам кислородпроводящих мембран и принципам улучшения целевых свойств мембран путем повышения смешанной и кислородно-ионной электропроводности.

Учебное пособие предназначено для студентов старших курсов, знакомых с основами общей физики, неорганической и физической химии, квантовой механики и строения молекул.

Студенты, обучающиеся по дисциплине «Формирование целевых свойств перспективных оксидных материалов. Теория и практика применения в твердооксидных топливных элементах», должны приобрести следующие компетенции:

- 1) Знание особенностей протекания реакций в твердых телах.
- 2) Представление о методах синтеза, термической обработке и получении материалов с прогнозируемыми свойствами.
- 3) Использование полученных знаний для решения проблем формирования свойств материалов для их использования в различных современных приборах и устройствах.

Студенты, изучившие эту дисциплину, должны уметь выбирать наиболее удобный и простой метод получения материала с заданными свойствами.

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

Наконец, они в состоянии промоделировать различные свойства оксидных материалов (такие как дефектная структура, кислородная нестехиометрия и др.) в зависимости от метода их получения. Помимо знания структуры и физико-химических свойств моделируемых объектов необходимо хорошо представлять принципы самого моделирования и методы решения минимизационной задачи, например, метод наименьших квадратов

Учебное пособие «Формирование целевых свойств перспективных оксидных материалов. Теория и практика применения в твердооксидных топливных элементах» предназначено для сопровождения курса с одноименным названием. Оно призвано оказать существенную помощь изучающим этот курс по всем его разделам.