

Аспирантский семинар состоится

25 мая в 16.45 в 472 аудитории

Докладчики: Аспирант ФНМ 2г/о Веряева Е.С., Аспирант 3г/о ФНМ Кузьмова Т.Г.

Термодинамические базы данных

Аспирантка ФНМ 2г/о Веряева Е.С.

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Успенская И.А.

Рецензент: в.н.с., д.т.н. Белов Г.В.

В настоящее время обязательной начальной стадией новых технологических разработок в области химии и материаловедения является физико-химическое моделирование протекающих в системе процессов: оцениваются оптимальные условия осуществления реакций (температура, давление, соотношение количеств реагентов, состав газовой фазы,

присутствие инертных добавок и т.д.), скорости их протекания, теплообмен и массоперенос. Расчеты равновесий - основной инструмент химической термодинамики. Методы расчетов равновесий постоянно совершенствуются с использованием достижений математики, вычислительных методов и программирования.

Первые крупные термодинамические базы данных были созданы в 60-70-х годах прошлого столетия для решения задач, связанных с моделированием процессов горения ракетных топлив (NASA, ИВТАНТЕРМО). Базы данных формируются на основе критического анализа большого числа данных, полученных с помощью экспериментальных и расчетно-теоретических методов изучения термодинамических свойств различных классов веществ. В настоящее время разработано несколько десятков программных комплексов широкого профиля (MALT, THERMOCALC, MTDATA, FACTSAGE и т.п.), ориентированных на решение задач металлургии, химии, материаловедения и геохимии.

В докладе будет сделан обзор по имеющимся базам данных и программным комплексам, приведены примеры их использования для решения различных прикладных задач. Отдельно будет рассмотрена проблематика термодинамического моделирования окислительно-восстановительных реакций железа в расплавах стеклообразующих систем.

Эпитаксиальная стабилизация:

получение новых функциональных материалов в виде тонких плёнок

Аспирант 3г/о ФНМ Кузьмова Т.Г.

Научный руководитель: проф., д.х.н. Кауль А.Р.

Рецензент: к.х.н. Молодык А.А.

Существует большое количество соединений, для синтеза которых необходимо использовать высокие давления и температуры или их вовсе невозможно получить в керамическом виде. Явление эпитаксиальной стабилизации позволяет синтезировать такие соединения в виде тонких плёнок. Суть явления состоит в том, что вещество при осаждении на монокристаллическую подложку с известной структурой, повторяет структуру подложки, что приводит к стабилизации данного соединения. Таким образом были стабилизированы манганиты со структурой перовскита $\text{RMnO}_3(\text{Y, Ho, Tm, Lu})$, кобальтаты LuCoO_3 и $\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x\text{CoO}_3$, никелаты $\text{RNiO}_3(\text{Pr, Nd, Sm, Gd})$, гранаты $(\text{La}_x\text{Nd}_{1-x})_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, которые не были получены ранее в объёмном виде.

В докладе обсуждаются термодинамическая модель явления эпитаксиальной стабилизации её подтверждение на примерах различного класса соединений. Также рассмотрен один из методов получения тонких плёнок – химическое осаждение из паровой фазы.