

ВИВЧЕННЯ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І КВАНТОВИХ ЕФЕКТІВ В ТВЕРДИХ МАТЕРІАЛАХ

STUDY OF CHEMICAL PROCESSES AND QUANTUM EFFECTS IN SOLID MATERIALS

Науковий керівник каф. “Матеріалознавство та технології матеріалів”,

канд. техн. наук Клименко Н.М. (Klimenko N.M.)

Воронов Р.В. (Voronov Rodion)

Анотація: Хімія твердого тіла – розділ хімії, направлений на розвиток методів синтезу твердих речовин і матеріалів з заданими кристалічними структурами, морфологією, фізико-хімічними та біологічними властивостями. Вивчає будову, хімічні і фізичні властивості твердих тіл, протікання хімічних реакцій в них і особливо взаємозв'язок між складом, кристалічною структурою, мікроструктурою і властивостями твердофазних з'єднань і речовин. Об'єкти синтезу і дослідження - кристалічні, нанокристалічні і аморфні, неорганічні і органічні твердофазні речовини і матеріали.

Ключові слова: хімічний процес, твердий матеріал, хімія та фізика твердого тіла, квантовий ефект, характеристики матеріалу.

Annotation: Solid state chemistry is a branch of chemistry aimed at the development of methods for the synthesis of solids and materials with specified crystal structures, morphology, physicochemical and biological properties. He studies the structure, chemical and physical properties of solids, the course of chemical reactions in them and especially the relationship between the composition, crystal structure, microstructure and properties of solid-phase compounds and substances. Objects of synthesis and research - crystalline, nanocrystalline and amorphous, inorganic and organic solids and materials.

Keywords: chemical process, solid material, chemistry and solid state physics, quantum effect, material characteristics.

Центральне місце в хімії твердого тіла займають уявлення про дефектної структурі та нестехіометрії кристалічних твердих речовин, а також особливості твердофазної атомної та іонної дифузії. Саме тому становлення хімії твердого тіла відбувалося паралельно з розвитком уявлень про дефекти структури, нестехіометрії, впорядкуванням і разупорядкуванням з використанням методів кристалографії, кристалохімії, квантової хімії, молекулярної динаміки та комп'ютерного моделювання.

Основні наукові завдання хімії твердого тіла: побудова фазових діаграм багатокомпонентних систем на основі даних термічного аналізу, дифракційних та

термодинамічних даних, отриманих при різних температурах і тисках; дослідження впливу дефектів, нестехіометрії і атомного безладу на структуру і властивості твердих речовин, особливо оксидів, карбідів, нітридів і халькогенидів зі змішаним типом хімічного зв'язку; аналіз і побудова діаграм типу «склад - структура - властивості», що забезпечують спрямований синтез твердих речовин із заданими властивостями.

Хімія твердого тіла є комплексною міждисциплінарною науковою дисципліною, що лежить на стику фізичної та неорганічної хімії, фізики твердого тіла, кристалохімії, хімічної термодинаміки і матеріалознавства і вдається до методів цих наук. Застосовує різноманітні методи отримання матеріалів: високотемпературне спікання на повітрі і в вакуумі, високотемпературний синтез, Термобаричний і механохімічний синтез, плазмохімічний синтез і зонну плавку, хімічне та фізичне осадження з газової фази, золь-гель синтез, хімічне осадження з розчинів.

Електронна будова твердих тіл вивчається з застосуванням об'ємних і поверхневих експериментальних методів, за допомогою квантовохімічних розрахунків (квантові ефекти Холла, Зенона та Шоттки).

ЛІТЕРАТУРА

1. Мелихов И. В. Физико-химическая эволюция твердого вещества. - М.: Бином, 2006. – 309с.
2. Kanatzidis, Mercouri G. Report from the third workshop on future directions of solid-state chemistry: The status of solid-state chemistry and its impact in the physical sciences // Progress in Solid State Chemistry. – 2007. № 36 (1-2): - P. 1-133.
3. Bezpalo, A., Lebedev, V., Klimenko, N., Chumachenko, T., & Uyadnikova, I. (2018). Investigation and analysis of the possibility of diffusionless phase transformations in the surface layer of a part under the action of grinding temperatures. Восточно-Европейский журнал передовых технологий, Eastern-European Journal of Enterprise Technologies № 94. - P. 36 – 42.
4. Bezpalo, A., Lebedev, V., Morozov, Y., Chumachenko, T., & Klymenko, N. (2019, September). Mathematical Modeling of the Process of the Interaction of the Cutting Diamond Disk with the Environment. In Grabchenko's International Conference on Advanced Manufacturing Processes. - Springer, Cham. -P. 3-14.