



Лаборатория Неорганической Кристаллохимии
Кафедра Неорганической Химии, Химический Факультет МГУ

Кристаллохимический дизайн

Содержание

1. Кристаллохимический дизайн: что это такое

2. Методология и примеры

2.1 Методология кристаллохимического дизайна

2.2 Дизайн сверхпроводников

2.3 Дизайн материалов для Li-батарей

1. Кристаллохимический дизайн

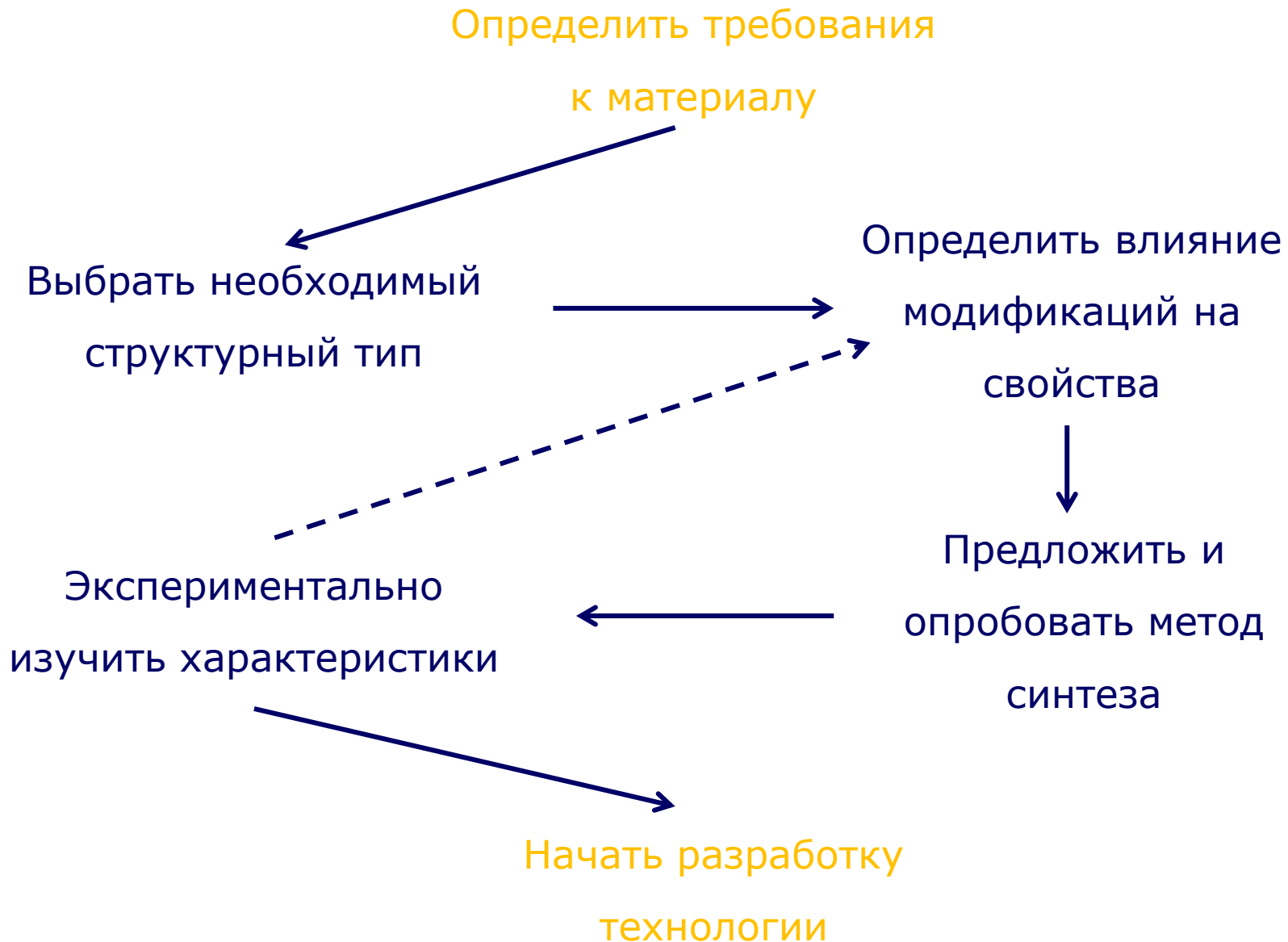
1. Создание новых материалов с заданными свойствами
2. Совершенствование существующих материалов



1. Выбор направлений поиска и модификаций
2. Предварительное планирование синтетических процедур
3. Выявление бесперспективных направлений поиска/модификаций
4. Предсказание свойств материала
5. Определение требований к методам получения материала и/или изделия.

Кристаллохимический
дизайн + химия
твердого тела +
физика твердого тела

2. Кристаллохимический дизайн: методология



2. Кристаллохимический дизайн: методология

Выбрать необходимый структурный тип

1. Анализ литературы
2. Зависимости «состав-структура-свойства»
3. Квантовохимические расчеты

Влияние модификаций на свойства

1. Зависимости «состав-структура-свойства»
2. Квантовохимические расчеты
3. Исследование фазовых диаграмм

2. Кристаллохимический дизайн: методология

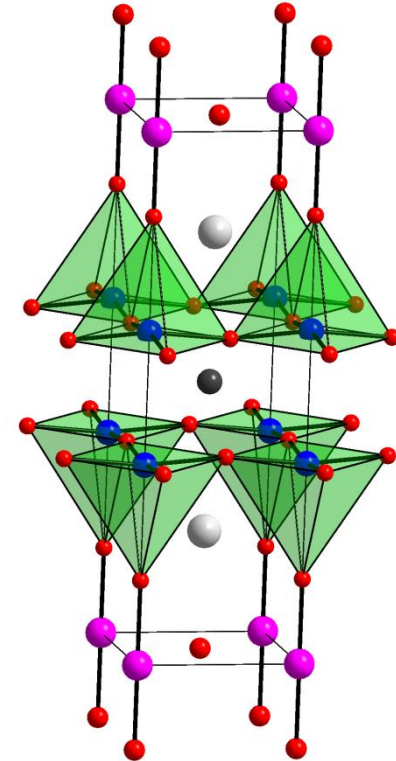
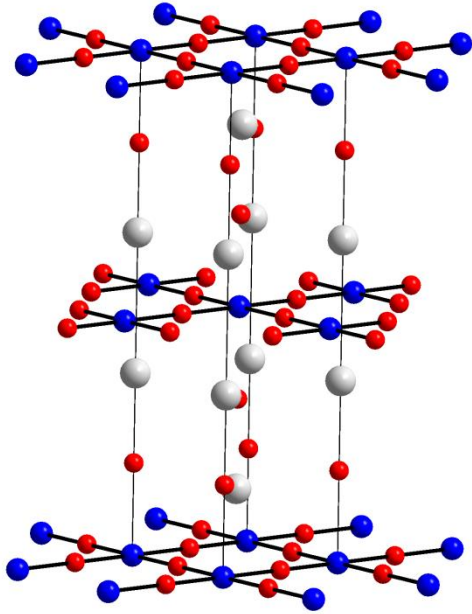
Предложить и опробовать метод синтеза

1. Анализ литературы
2. Практика для сходных систем
3. Анализ фазовых диаграмм
4. Перспектива технологического внедрения

Экспериментально изучить характеристики

1. Учет многих факторов
2. Перспектива технологического внедрения
3. Сопоставление с целевыми ориентирами

2. Кристаллохимический дизайн: ВТСП

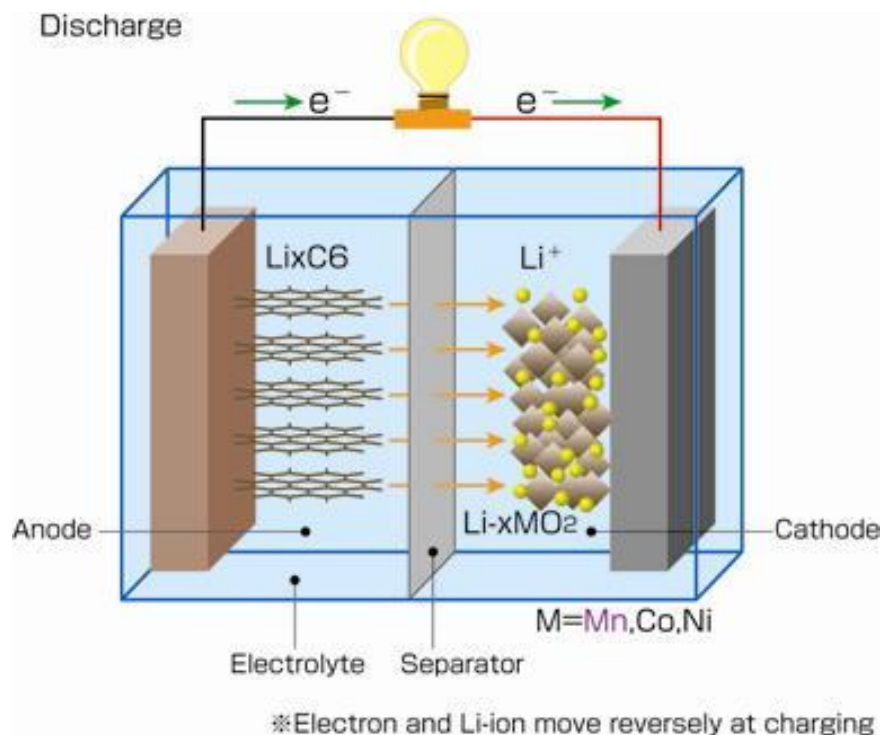


1. Требования – максимальная T_c
2. Структура – производная от перовскита
3. Изолированные CuO_2 слои!
4. Давление – рост T_c

1. Слои остаются
2. Изолированные слои CuO_2
3. Есть возможности варьировать состав

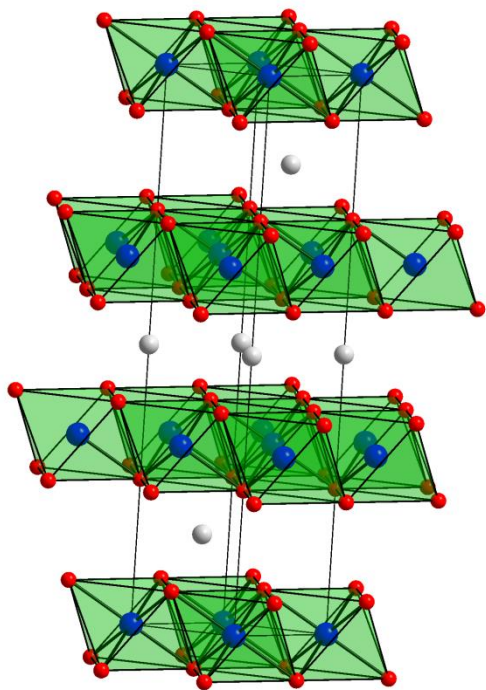
2. Кристаллохимический дизайн: катоды Li-батарей

Принцип действия литий-ионного аккумулятора:

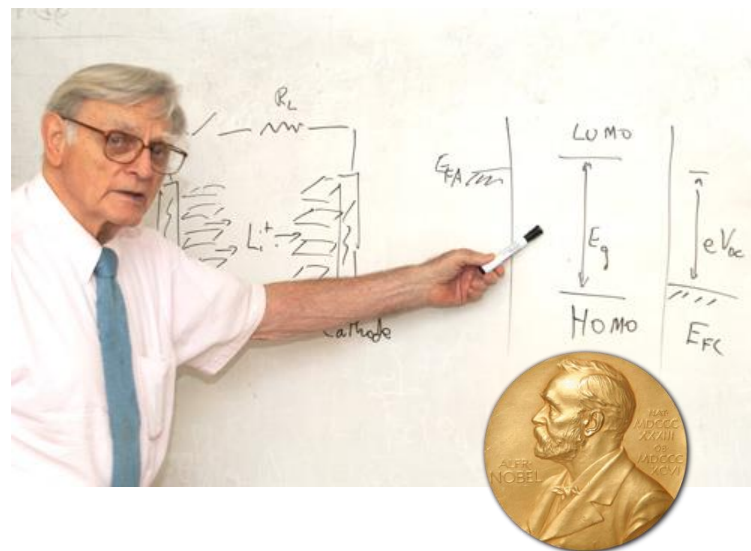


2. Кристаллохимический дизайн: катоды Li-батарей

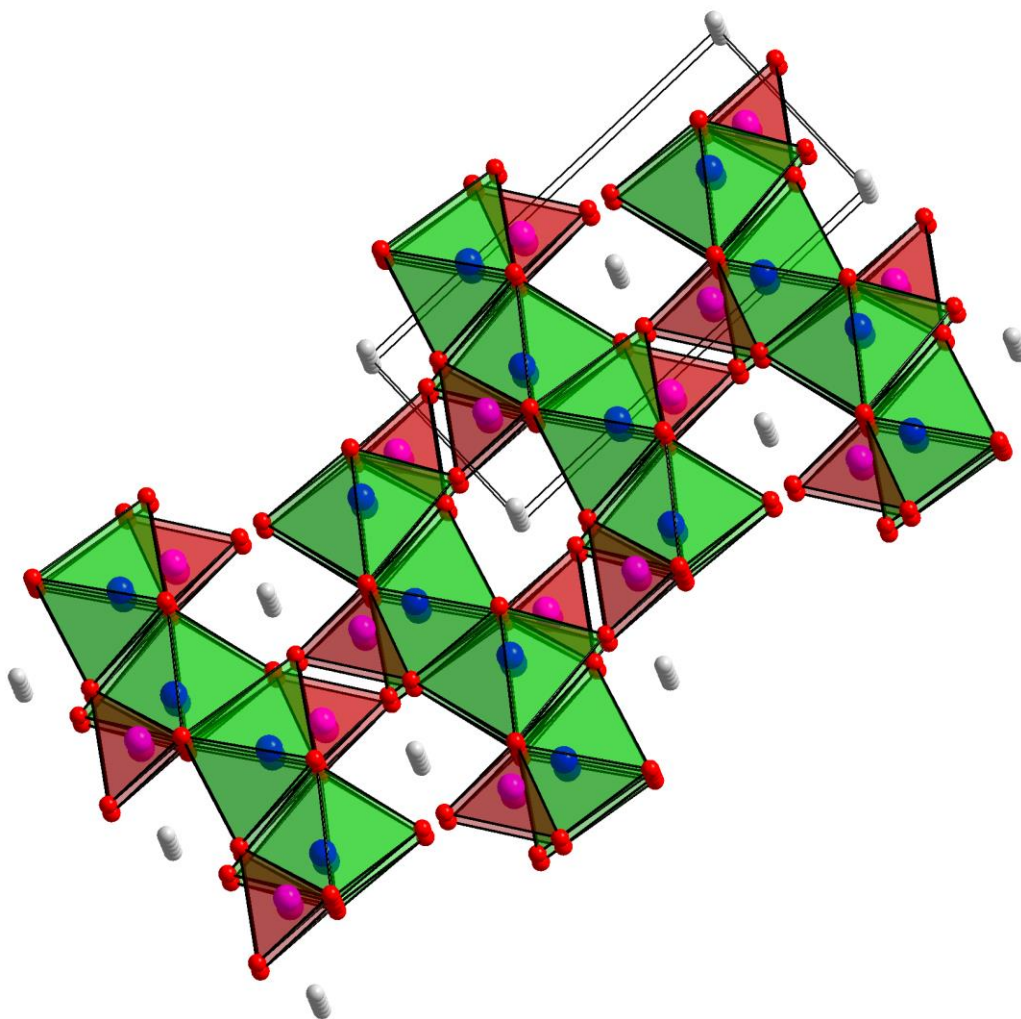
1. Высокая удельная емкость (массовая доля Li, доступного для извлечения)
2. Потенциал в заданных рамках (не выше 5В относительно Li)
3. Устойчивость к заряду-разряду
4. Электропроводность (иначе что это за электрод?)



$\text{Li}_{1-x}\text{CoO}_2$ by
John Goodenough



2. Кристаллохимический дизайн: катоды Li-батарей



LiFePO₄ by
John Goodenough

1. Потенциал ниже
2. Стоимость ниже
3. Электропроводность ниже
4. Емкость ниже (но ненамного)
5. Диффузия Li медленнее.