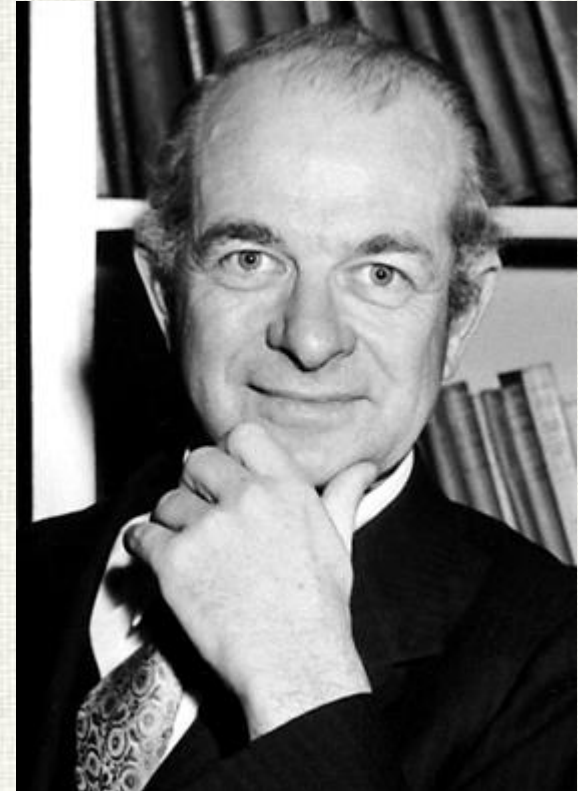


# Теорія розчинів сильних електролітів



# 1954

- **Лайнус Карл ПОЛІНГ (1901-1994)**  
– американський хімік, біохімік і активний борець за мир, автор понад 1200 книг і наукових статей, серед яких 850 віднесено до пріоритетних.
- **Prize motivation:** "За дослідження природи хімічних зв'язків та її застосування для визначення структури сполук "
- **Галузь знань: теоретична хімія, хімічний зв'язок**
- В 1963 році нагороджений **Нобелівською премією миру**, і став єдиною людиною, яка отримала дві неподілені Нобелівські премії



# 1959

## ■ ГЕЙРОВСКИЙ Ярослав (1890–1967)

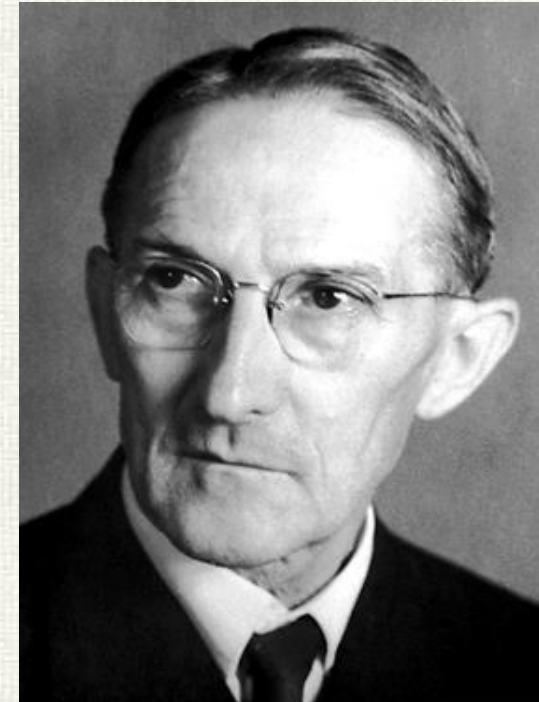
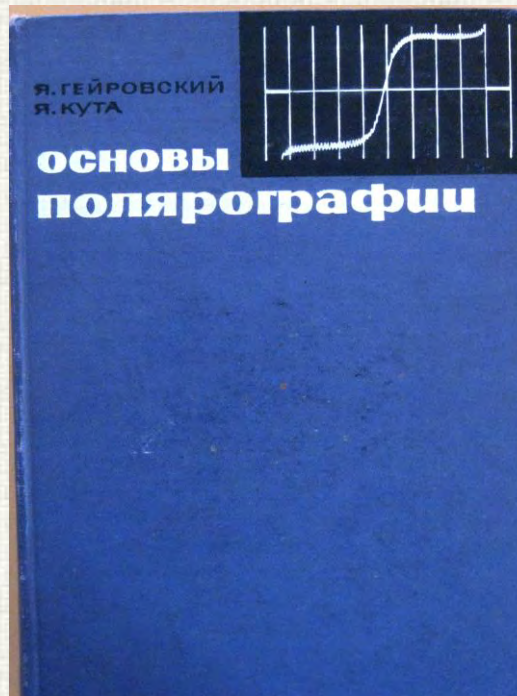
чеський фізико-хімік.

### ■ Prize motivation:

" За відкриття і розвиток  
полярнографічних методів  
аналізу"

### ■ Галузь знань:

Аналітична хімія,



# 1992



- **МАРКУС Рудольф Артур (народився в 1923 р.) – американський фізикохімік.**
- **У 1956 р. запропонував теорію переносу електрона в полярних розчинниках, відому також як теорія перехідного стану, яку згодом розповсюдив на електрохімічні процеси. Найважливішим внеском Маркуса було урахування впливу розчинника на перенесення електрона.**
- **Лауреат Нобелівської премії 1992 р. «За внесок у теорію реакцій електронного переносу в хімічних системах».**

# **Промисловість**

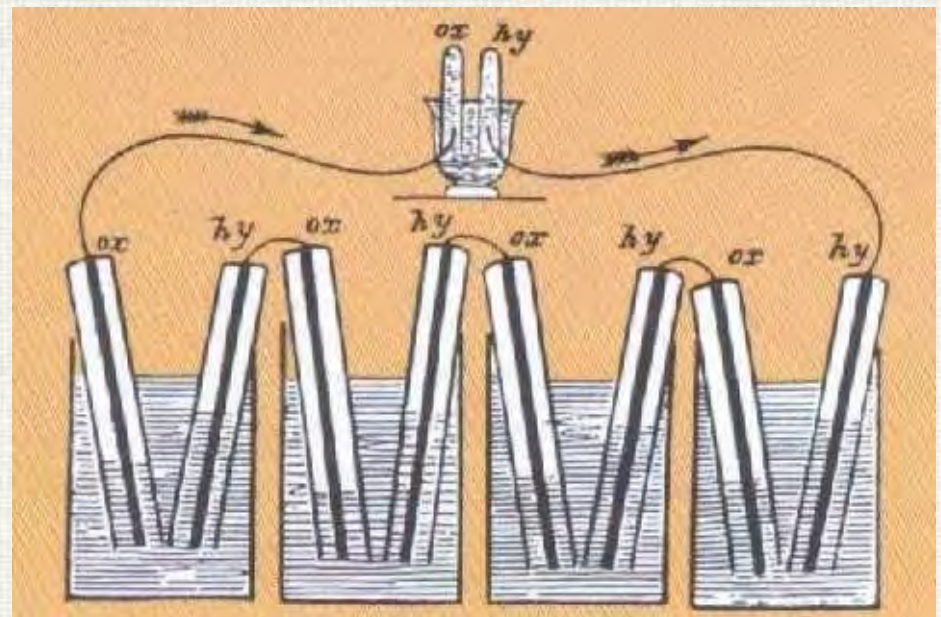
# Електрохімічні апарати



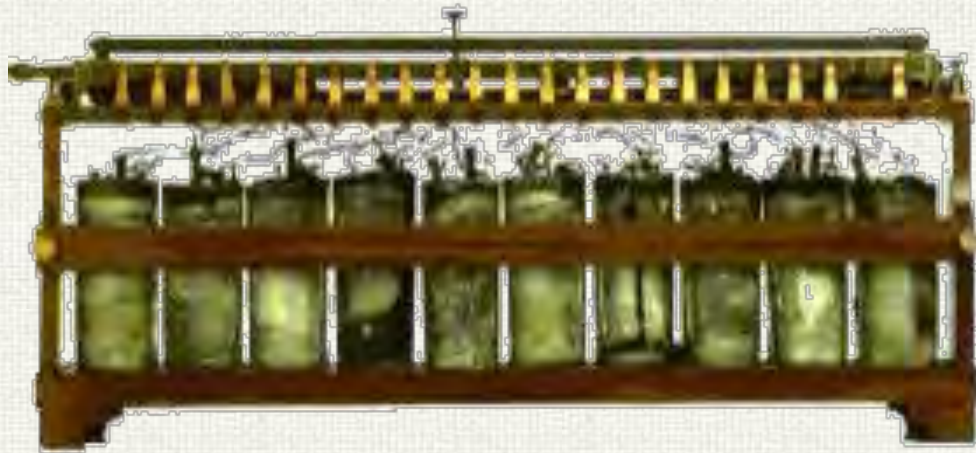
# Історія ХДЕЕ



Grove fuel battery,  
1839



# Історія ХДЕЕ



**Plante battery, 1859**



# Історія ХДЕЕ



**Early Le-Clanche cell,  
1866**



**Lead acid battery  
1881**

# Від Планте до паливного елемента

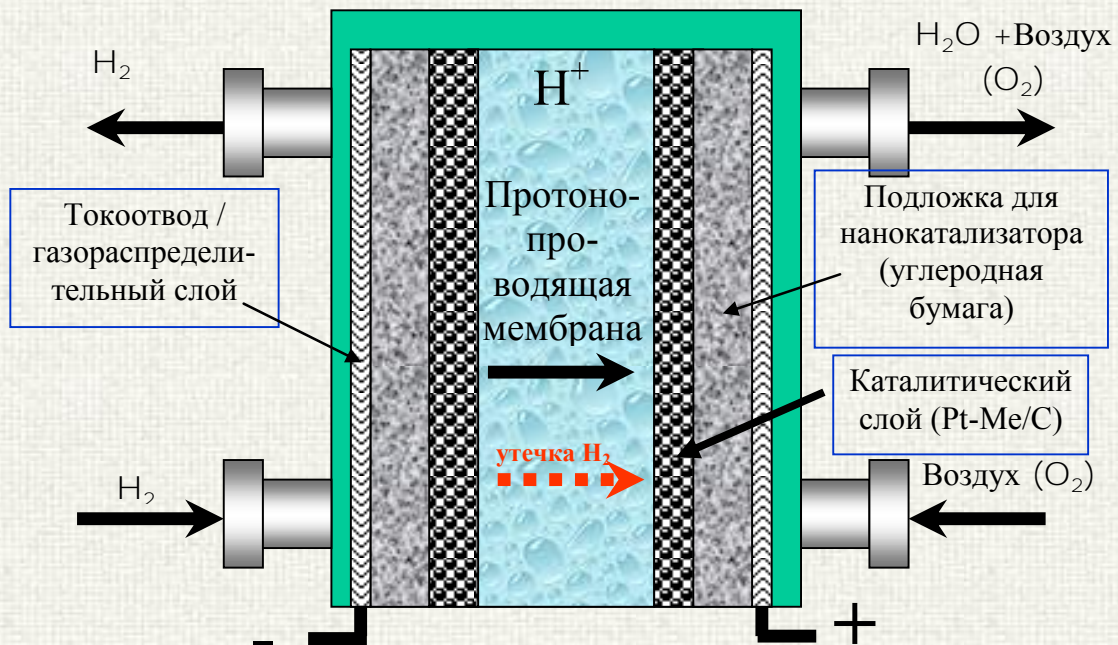
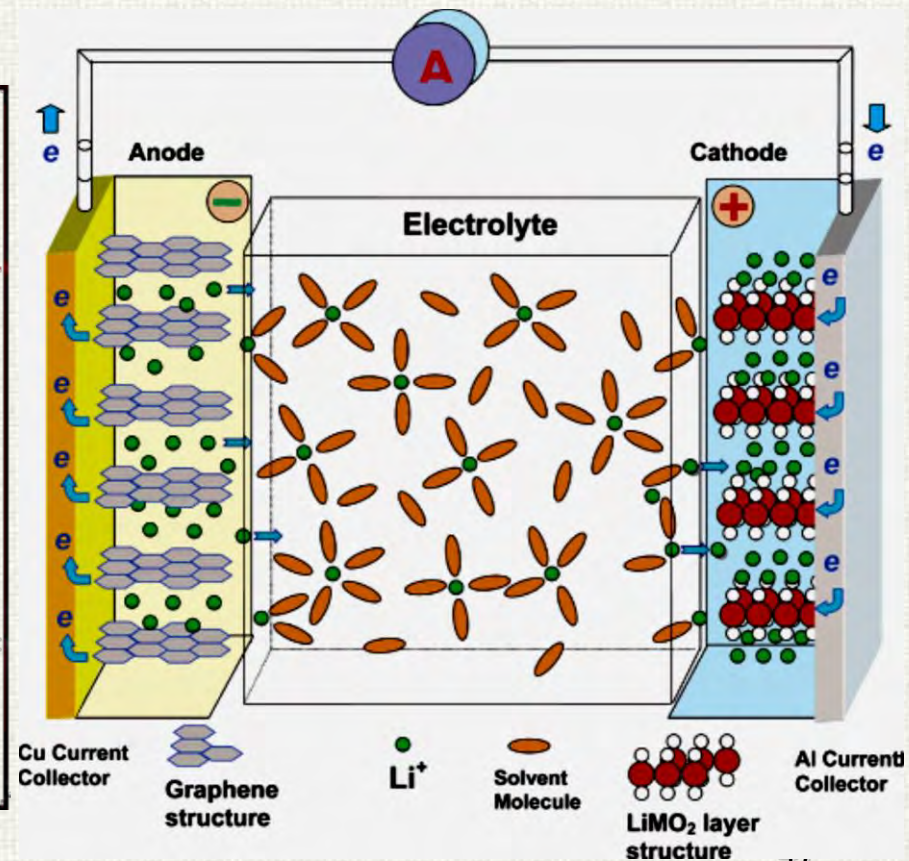
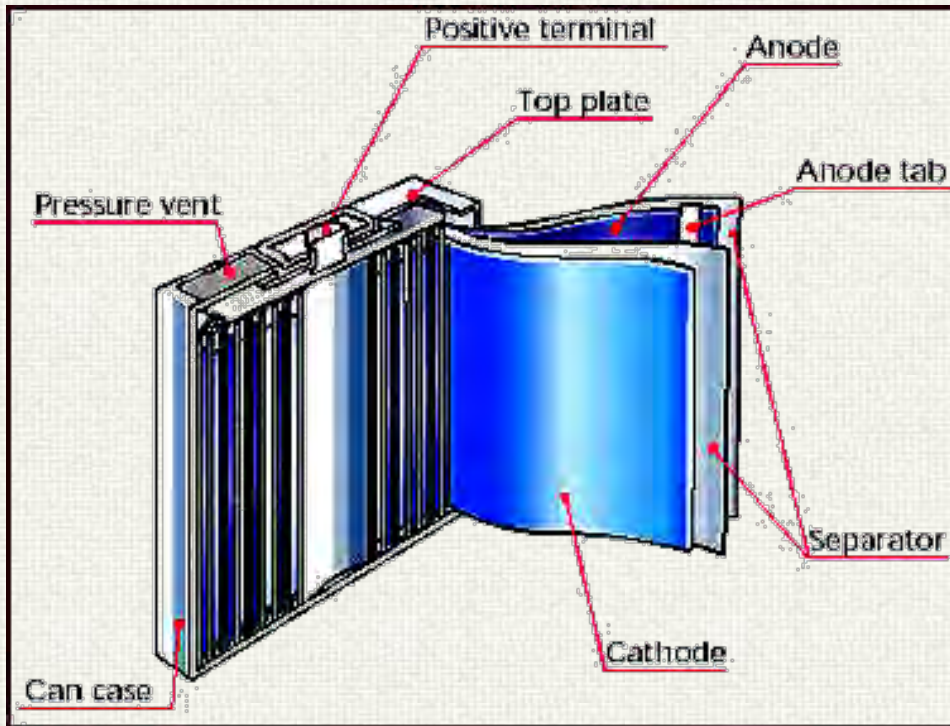


рис.5. Схема водородно-кислородного топливного элемента с протонопроводящей мембраной [Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC)]

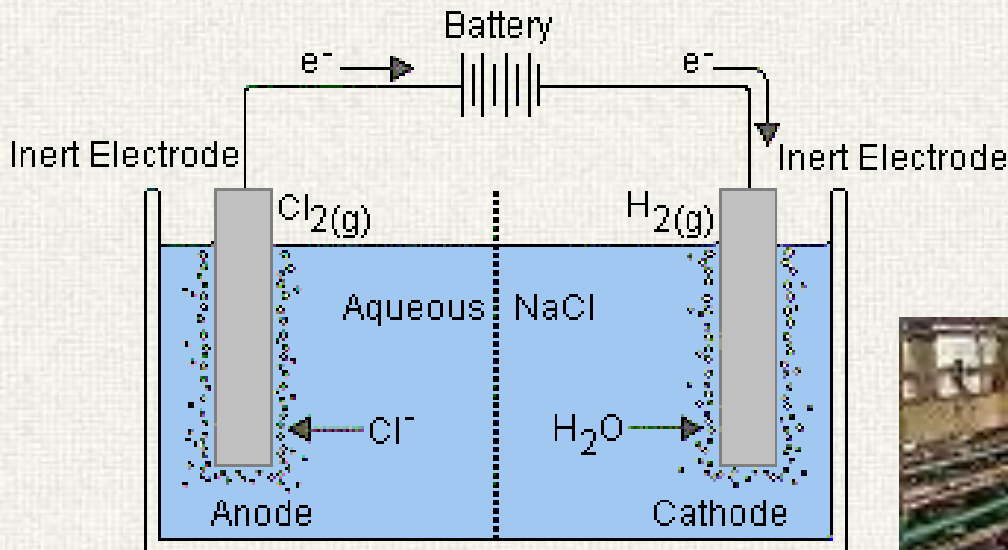


# Літєві акумулятори

- $\text{Li}_x\text{C}_6 \mid \text{LiAlF}_4 \mid \text{Li}_x\text{CoO}_2$
- The *emf* – 3.5-3.7 V;
- Energy density – 150-500 watt-hour/kg;
- 500-1000 of charge–discharge cycles;
- $T = -40 - +60 \text{ }^\circ\text{C}$ .



# Електроліз водних розчинів хлоридів лужних металів



# Виробництво алюмінію



# Гальванохімічні виробництва



# ДЕНЬ СЬОГОДНЯШНІЙ

**До 130-ї річниці з дня заснування  
Харківського практичного  
технологічного інституту**

**Міністерство освіти і науки України  
Національна академія наук України  
Національний технічний університет «ХПІ»  
Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна**

**VII УКРАЇНСЬКИЙ  
ЕЛЕКТРОХІМІЧНИЙ З'ЇЗД  
«СУЧАСНА ЕЛЕКТРОХІМІЯ:  
ОСВІТА, НАУКА, ВИРОБНИЦТВО»**



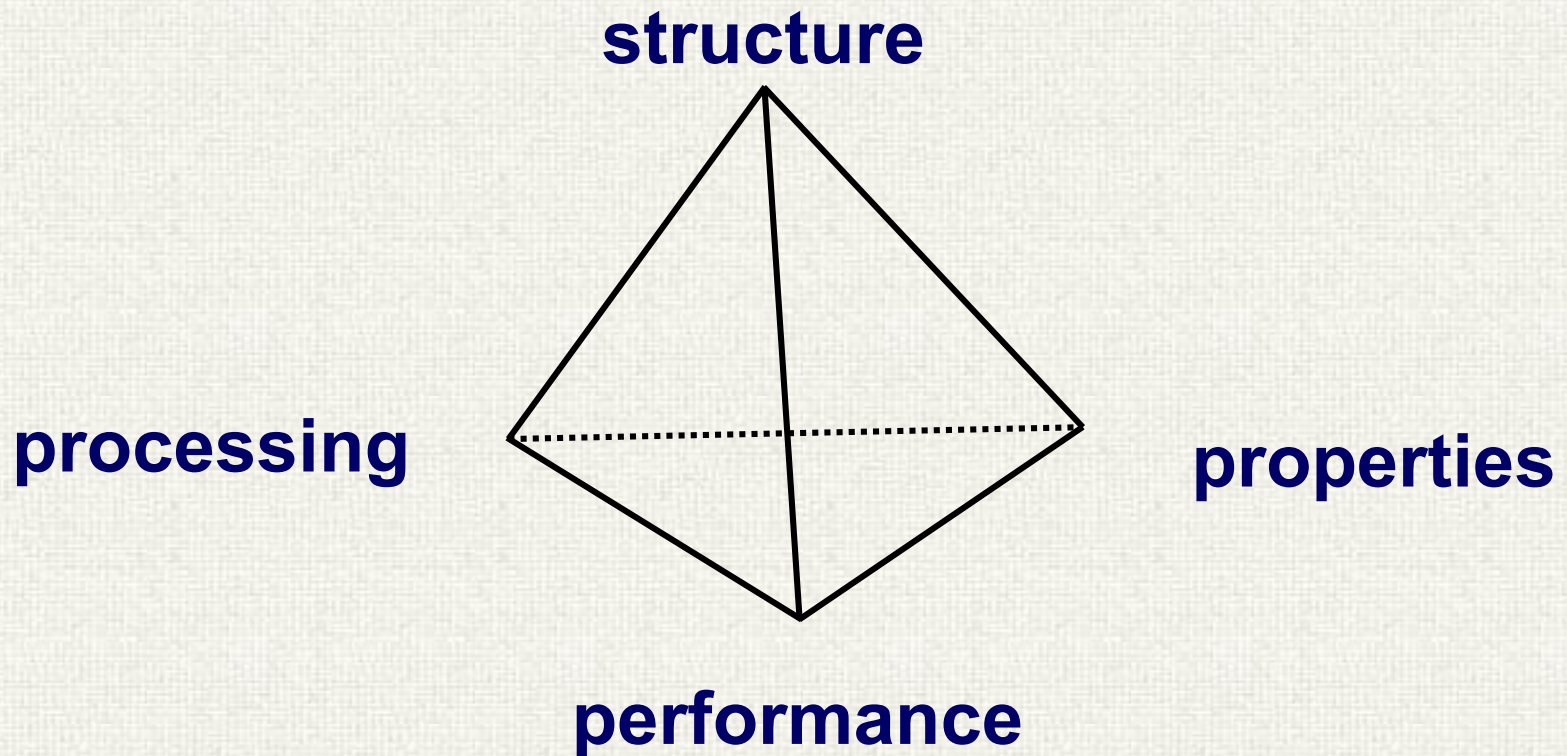
# Конструювання сплавів

- 1. Створення бази даних для опису об'єктів, що проєктуються
- 2. Побудова прогнозної оцінки за результатами моделювання
- 3. Функціоналізація рішень.



# КОНСТРУЮВАННЯ СПЛАВІВ : ВНУТРІШНІЙ ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК

Параметри синтезу → Склад → Будова →  
Властивості → Функція → Галузь застосування.

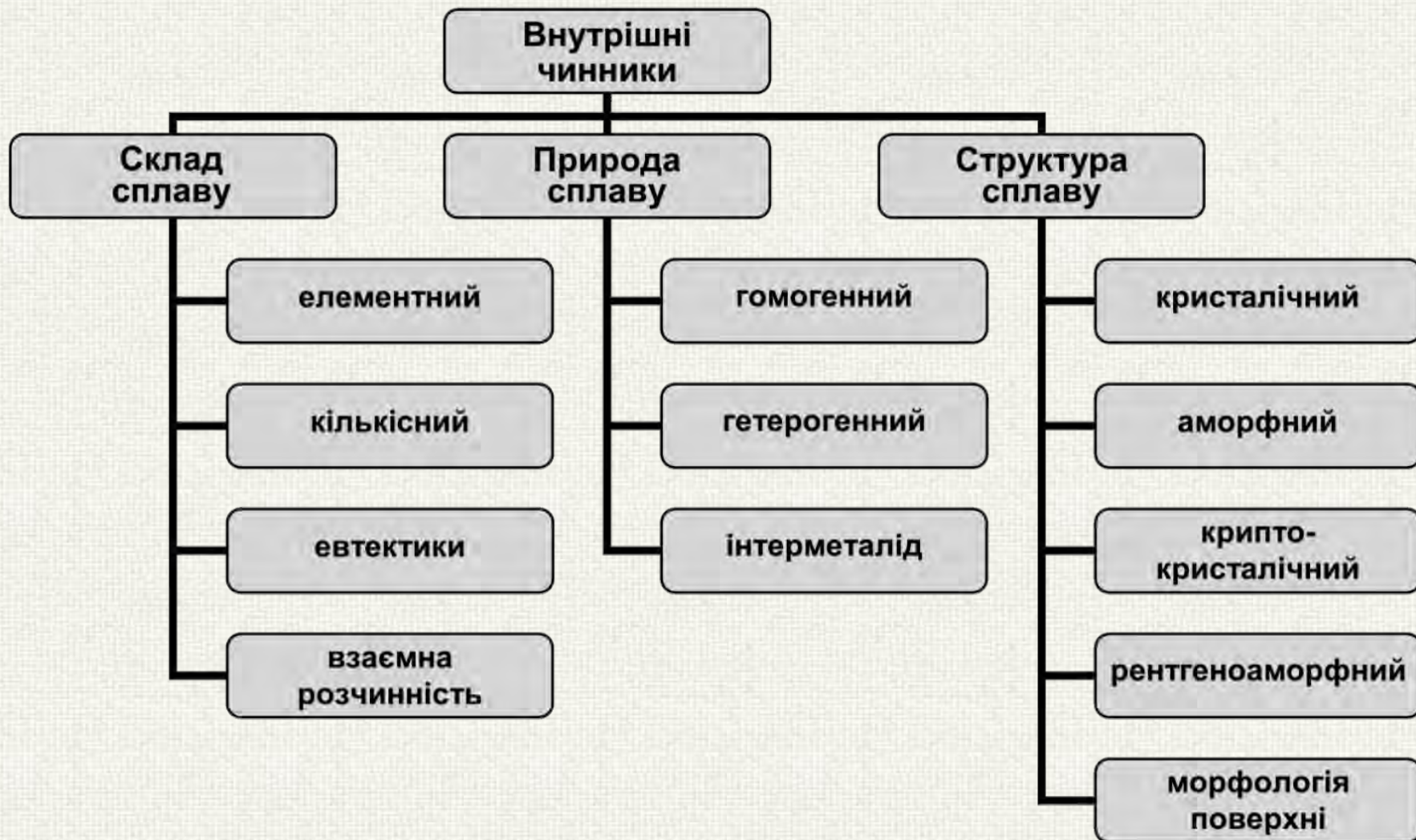


# **1. Створення бази даних для опису об'єкту, що проектується**

# Формування функціональних властивостей : передумови



# Формування функціональних властивостей : передумови



# Формування функціональних властивостей : зовнішні впливи

## Зовнішні поля

Електричне

Магнітне

Температурне

Гравітаційне

Радіаційне

Баричне

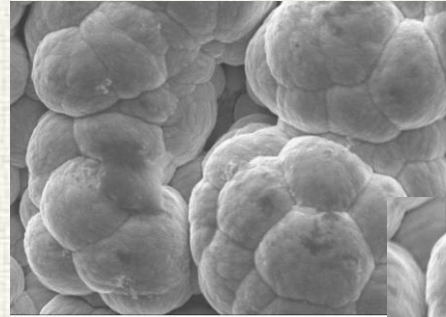
# **Структурнозалежні властивості сплавів**

# Co-Mo-W

## Вплив температури

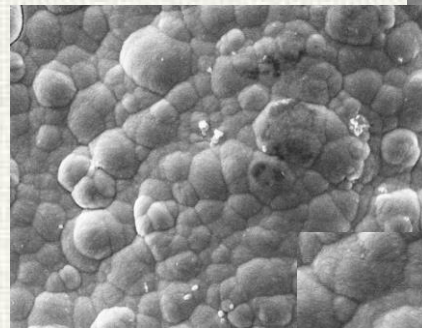
металл	$H_v$
Co	130
Mo	350
W	400
Cr	600

- $\omega$ , ат.%
- Co – 86.6
- Mo – 7.0
- W – 6.4
- $H_v = 800$

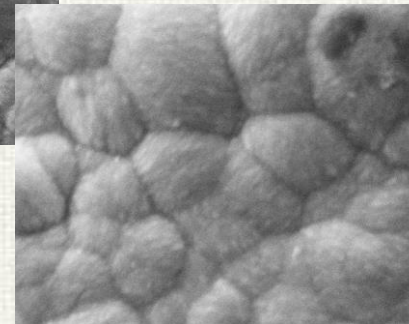
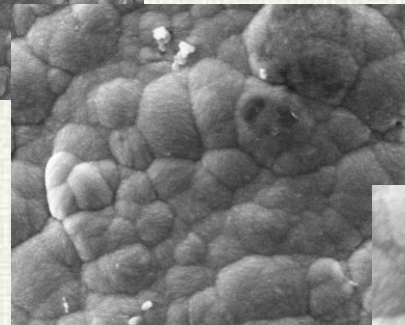


**T 50 °C**

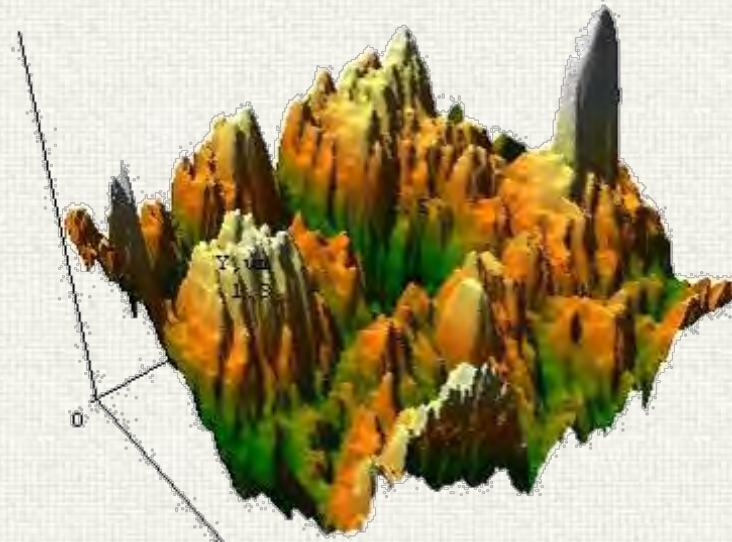
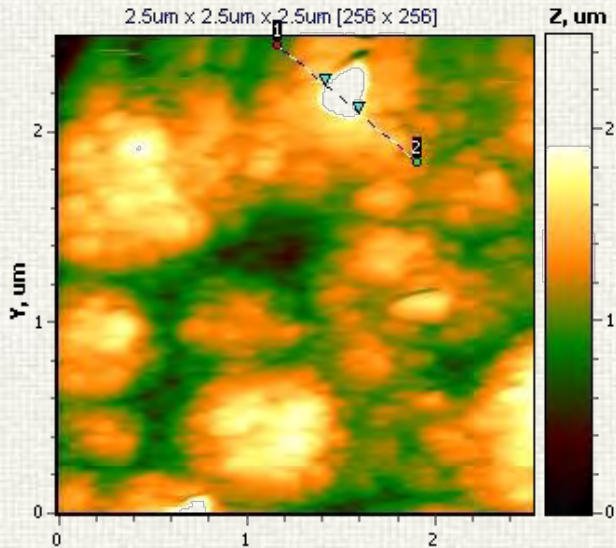
- $\omega$ , ат.%
- Co – 83.2
- Mo – 10.7
- W – 6.1
- $H_v = 1000$



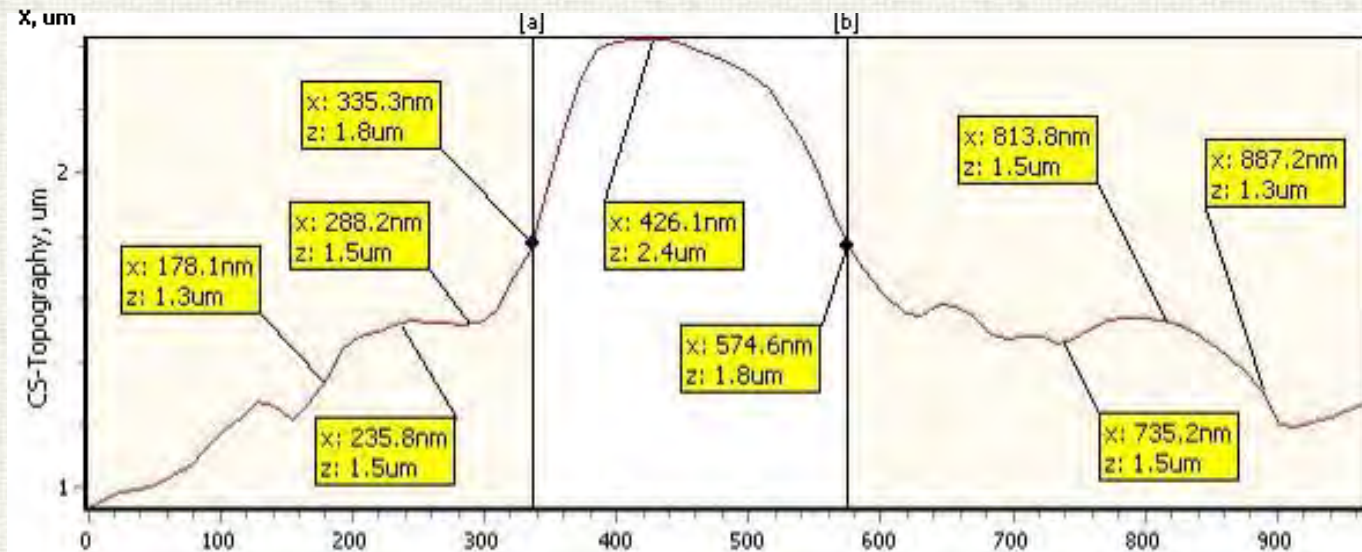
**T 30 °C**



# ACM Co-Mo-W



Площа сканування 2.5 x 2.5 um





# Вплив режиму електролізу

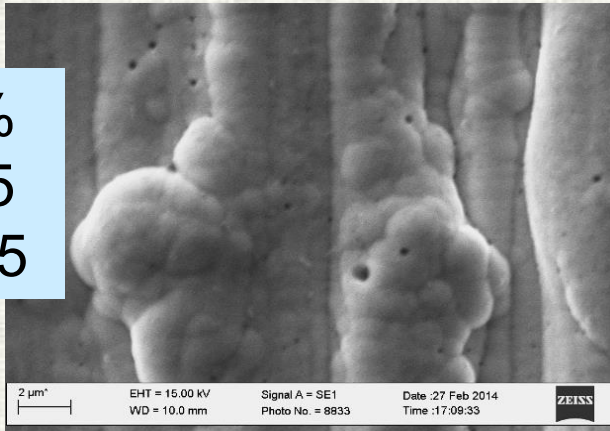
## Fe-Mo

1

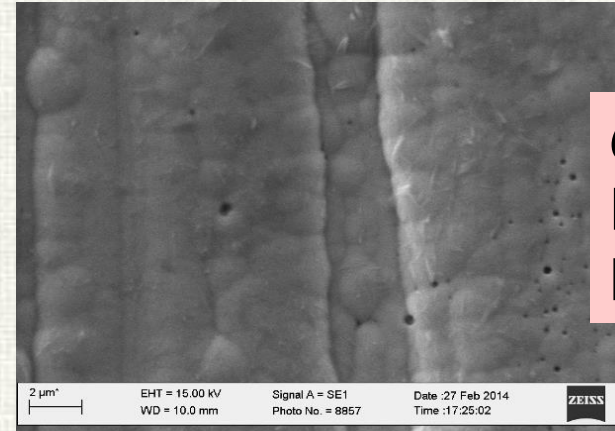
x5000

2

$\omega$ , мас. %  
Fe – 63.5  
Mo – 36.5



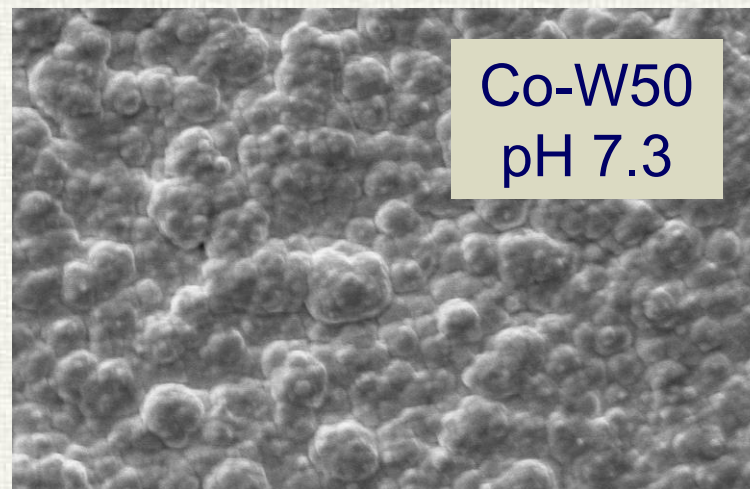
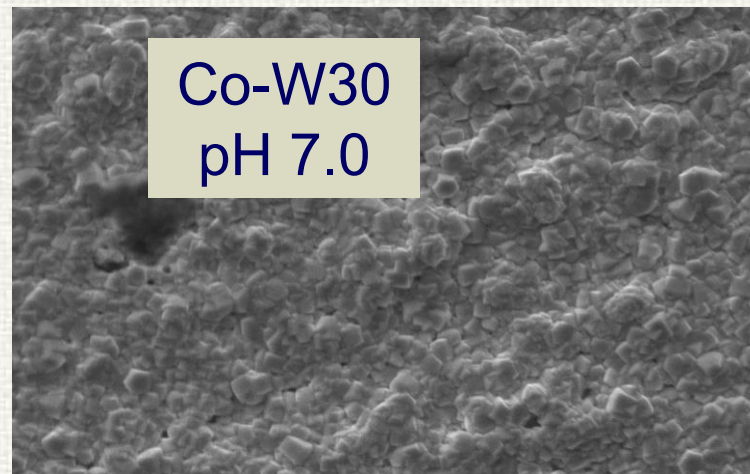
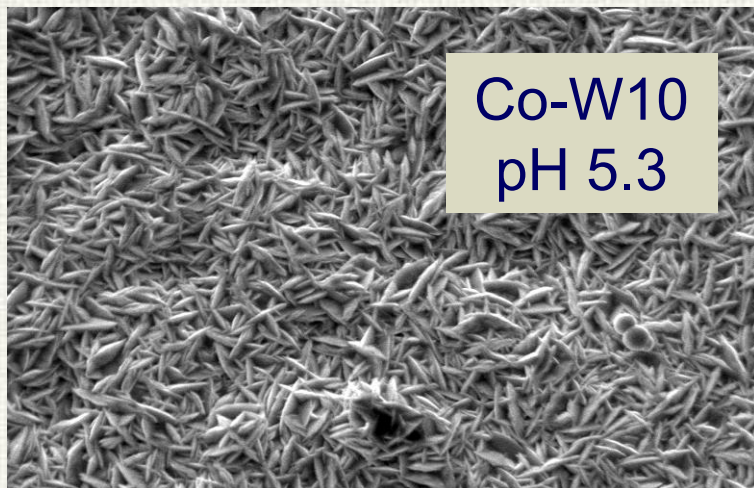
$\omega$ , мас. %  
Fe – 59.2  
Mo – 40.8



- $i = 3.5 \text{ A/дм}^2$ ;
- режими: **гальваностатичний** (1); **імпульсний** (2) – on/off time 5/10 мс

# Co-W

## Вплив рН

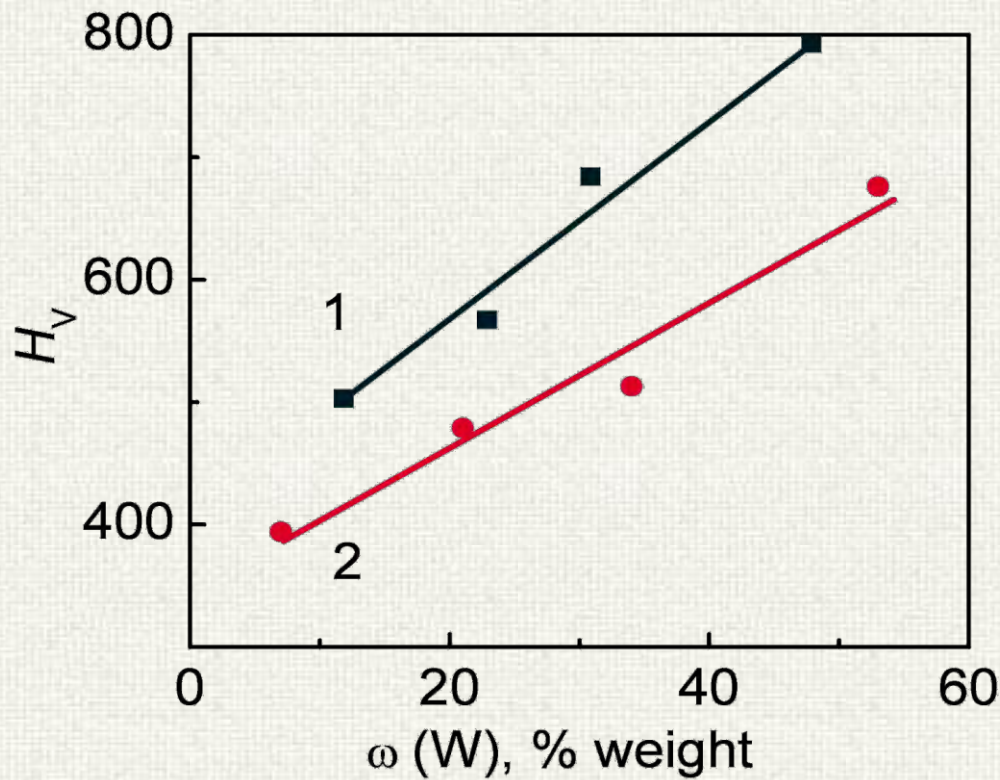


Імпульсний режим

$$i = 12 \text{ A/дм}^2$$

$$t_{\text{on}}/t_{\text{off}} = 2/20 \text{ мс}$$

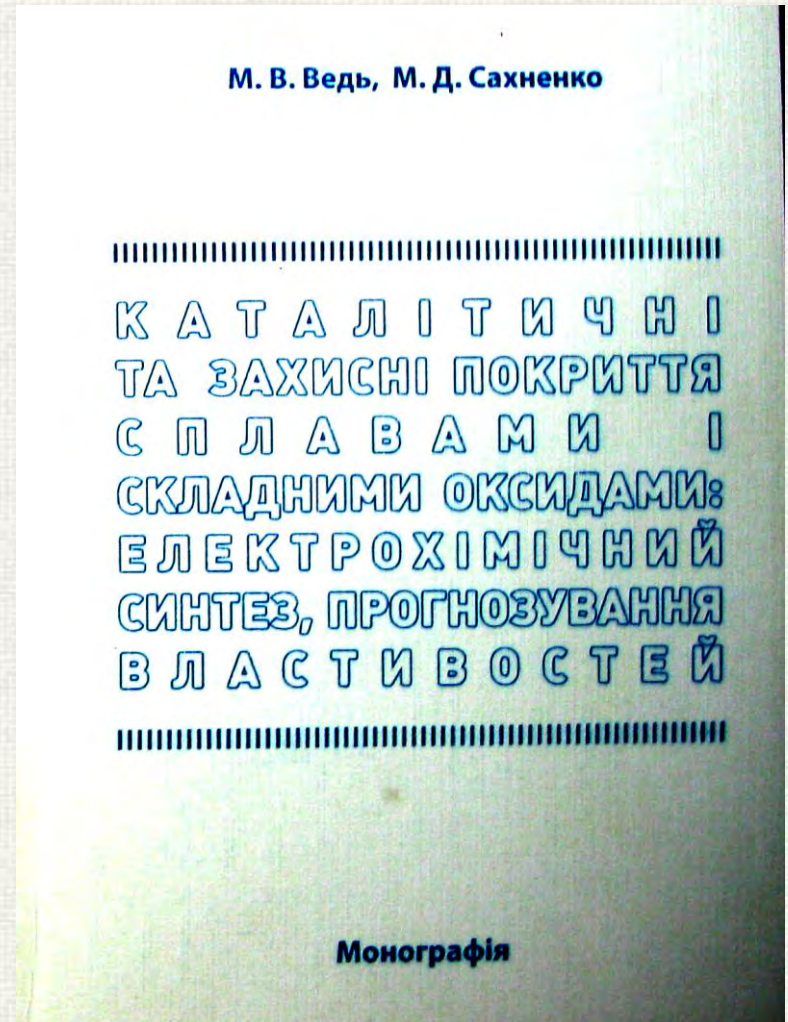
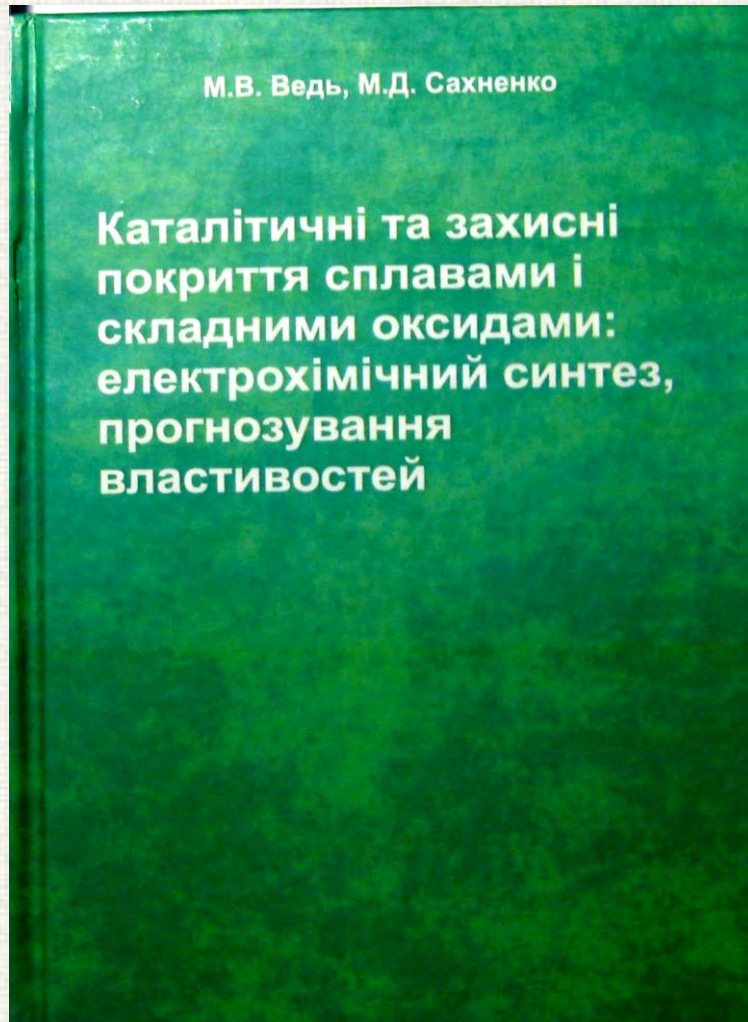
# Мікротвердість Ni-W (1) і Co-W (2)



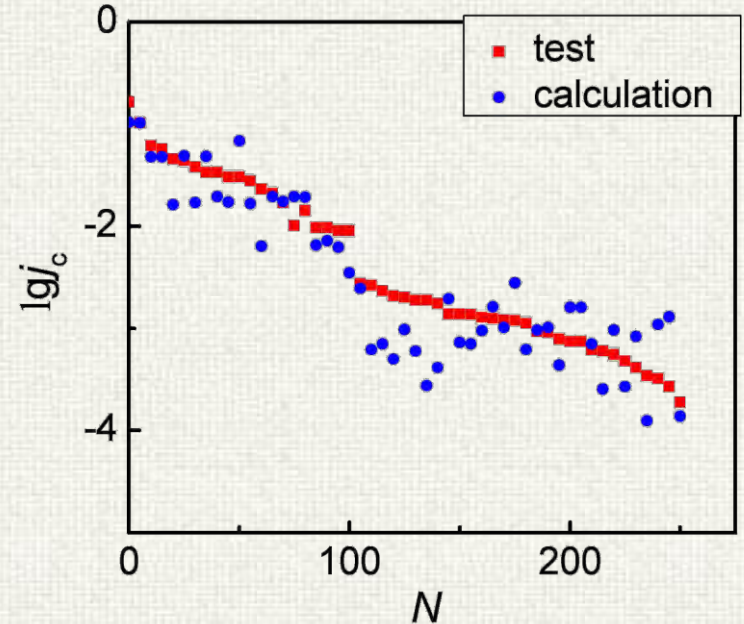
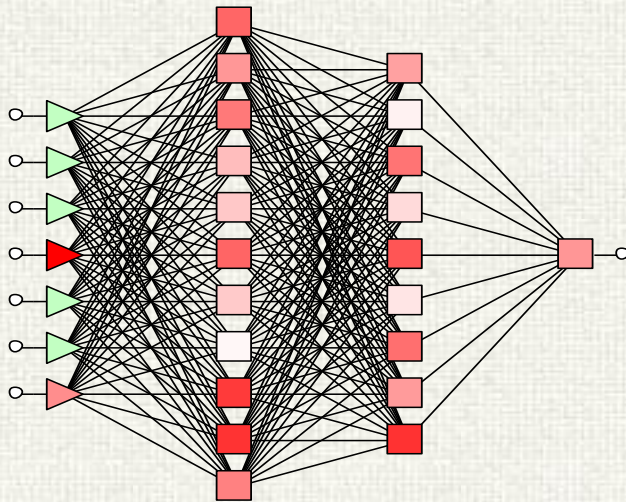
- $H_V(\text{Co}) = 130$
- $H_V(\text{Ni}) = 350$
- $H_V(\text{W}) = 400$

- **2. Побудова прогностної оцінки за результатами моделювання**

# ЗАСТОСУВАННЯ ЗАСОБІВ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ДО АНАЛІЗУ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ СИСТЕМ



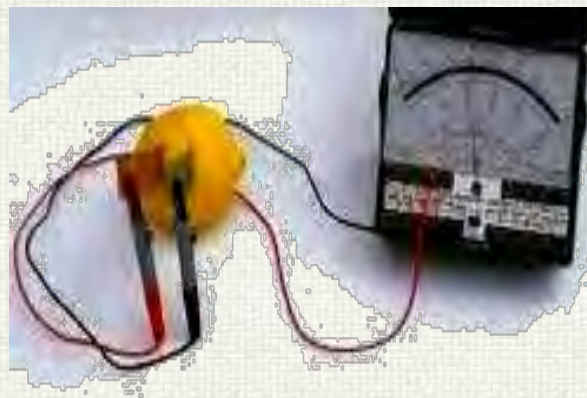
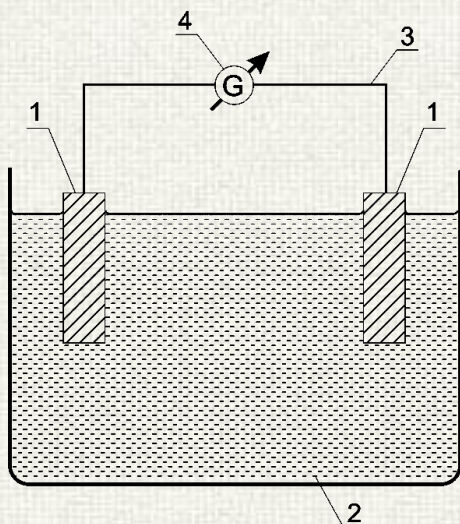
# Архітектура ШНМ для прогнозування швидкості корозії сплаву Ni-W



- Вміст вольфраму $_i$
- Провідність металів і їх оксидів $_i$
- Ентальпія оксидів  $WO_3$ ,  $NiO$  $_i$
- Ентропія оксидів  $WO_3$ ,  $NiO$ .

# Функціоналізація рішень

# Хімічні джерела електричної енергії



## Класифікація ХДЕЕ:

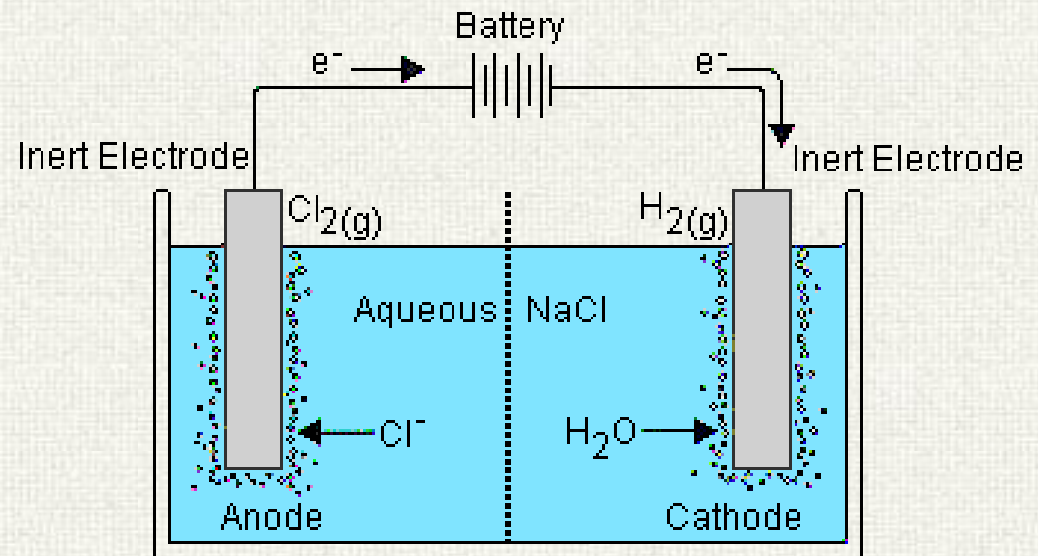
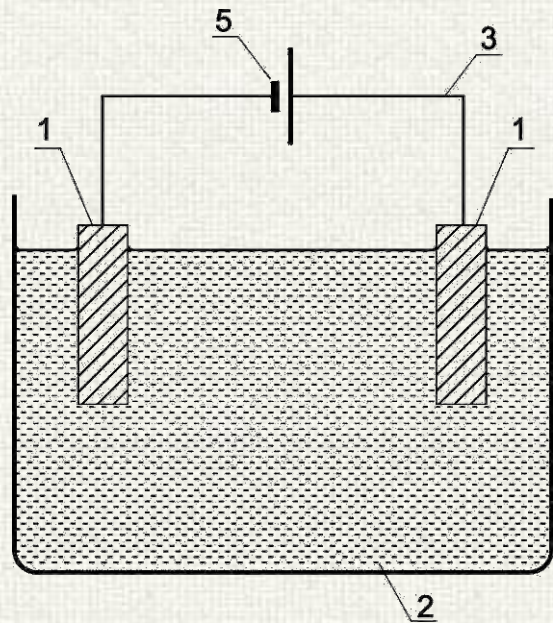
**Первинні** (неперезаряджувані) – гальванічні елементи;

**Вторинні** (перезаряджувані) – акумулятори;

Окремо виділяють - **паливні елементи** та **протічні редокс акумулятори**, в яких активна речовина накопичується не на електродах, а в окремих ємностях іззовні.



# Електрохімічний реактор



# Електрохімічні системи: складові

- **Електрод** – має електронну або змішану провідність (провідник першого роду)
- **Електроліт** – конденсована іонна система з іонним типом провідності (провідник другого роду)
- **Зовнішнє коло** – містить джерело енергії (для ЕХР) або навантаження (ХДЕЕ)

# Електрохімічні системи: електроди

- **Електрод** – провідник першого роду в контакті з іонним провідником, на межі розділу яких відбуваються електрохімічні перетворення.
- **Матеріал електрода** :
  - - метали і сплави
  - - неорганічні напівпровідники
  - - індивідуальні або змішані оксиди металів
  - - високопровідні полімери
  - - синтетичні метали
  - - вуглецеві композити та синтетичні алмази.

# Електрохімічні системи: іонні конденсовані системи:

- **Розчини електролітів :**
  - водні та інші протонні розчини
  - неводні апротонні
- **Розплави (розтопи):**
  - високотемпературні
  - органічні іонні рідини
- **Тверді електроліти**
- **Тверді полімерні електроліти**
- **Надкритичні органічні рідини**

# Remember: Розчини

- **Розчини** – це дисперсні (роздрібнені) системи, компоненти яких рівномірно розподілені один в одному.
- Сукупність розподілених частинок називають **дисперсною фазою**, а речовину, в якій відбувається розподіл, – **дисперсійним середовищем**.
- Якщо ступінь подрібнення речовини відповідає розмірам молекул (іонів) і зникає межа розподілу, то система стає гомогенною і такі розчини називають **істинними**.
- Отже, **розчин** – гомогенна термодинамічно стійка система змінного складу, яка містить два або більше компонентів: розчинник, розчинені речовини і продукти їх взаємодії.

# Remember: кількісні характеристики розчинів

- **Розчинністю** речовини називають її спроможність утворювати однорідну систему з розчинником.
- Кількісною характеристикою ненасичених розчинів є **концентрація**, тобто відношення кількості розчиненої речовини  $X$  до певної кількості розчинника.
- Найважливішою є **молярна концентрація**  $c(X)$  – відношення кількості розчиненої речовини до об'єму розчину ( $V$ ):

$$c(X) = \frac{n(X)}{V}$$

# Розчини електролітів: стадії розчинення

- Розчинення - сукупність послідовних спряжених процесів:
- **сольватації** (гідратації) - взаємодії розчинника з частинками розчиненої сполуки,
- **іонізації** - руйнування кристалічної структури розчиненої речовини,
- **дифузії** - розподілу сольватованих частинок в об'ємі розчинника.