



НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ
ИНСТИТУТ»

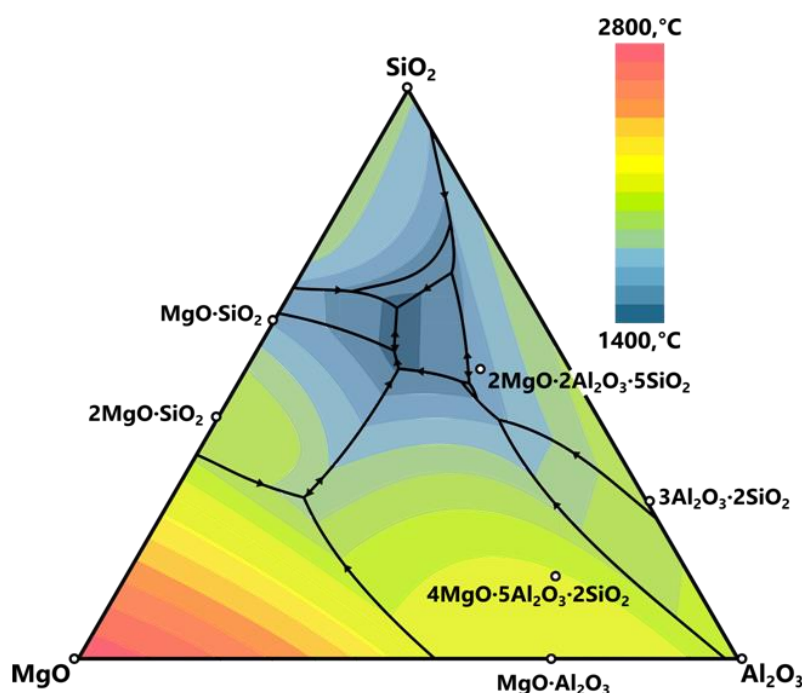
Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт»

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Ордена Трудового Красного Знамени
Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова

**X ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
(с международным участием)
«ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ХИМИЯ
ОКСИДНЫХ СИСТЕМ И МАТЕРИАЛОВ»**

Посвящается 75-летию ИХС РАН

СБОРНИК ТЕЗИСОВ



25 – 28 сентября 2023 г.
Санкт-Петербург

УДК 546.05

ББК 21.4

В93

X Всероссийская конференция (с международным участием) «Высокотемпературная химия оксидных систем и материалов»: Сборник тезисов докладов, г. Санкт-Петербург, 25 – 28 сентября 2023 г. – СПб.: ООО «Издательство «ЛЕМА», 2023. – 376 с.

ISBN 978-5-00105-845-8

В сборнике представлены тезисы докладов X Всероссийской конференции (с международным участием) «Высокотемпературная химия оксидных систем и материалов», проведенной 25-28 сентября 2023 г. в г. Санкт-Петербурге.

Сборник может быть полезен для ученых, инженеров, технологов, преподавателей, аспирантов и студентов, научная и производственная деятельность которых связана с исследованиями в области неорганической и физической химии, неорганических материалов (стекло, керамика, высокотемпературные оксиды и покрытия),

Издание осуществлено с оригинала, подготовленного Институтом химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН на основе MS Word файлов, представленных авторами докладов. Техническое редактирование касалось только ошибок, обусловленных дефектами подготовки исходных файлов.

© Коллектив авторов, 2023

© ООО «Издательство «ЛЕМА», 2023

УДК 548

ТЕРМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СЛОИСТОГО БОРАТА $\text{Sr}_3\text{V}_{14}\text{O}_{24}$

Сизов Г.С.^{1,2}, Южно В.А.², Бубнова Р.С.², Кржижановская М.Г.^{1,2}, Филатов С.К.¹

¹*Кафедра кристаллографии, Институт наук о Земле, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

²*Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*
sizov-george@mail.ru

Аннотация. По данным порошковой терморентгенографии для слоистого бората ($3\text{SrO} \cdot 7\text{B}_2\text{O}_3$) рассчитаны значения коэффициентов термического расширения, по которым построены фигуры тензоров. Проведено сопоставление проекций структуры соединения с сечением фигур поверхностей тензора.

Ключевые слова: $\text{Sr}_3\text{V}_{14}\text{O}_{24}$, термическое расширение, борат стронция.

Впервые борат $\text{Sr}_3\text{V}_{14}\text{O}_{24}$ ($3\text{SrO} \cdot 7\text{B}_2\text{O}_3$) расшифрован и описан в работе [1]. Слоистый борат кристаллизуется в моноклинной сингонии, пространственной группе $P2_1/c$, $a = 6.6479\text{\AA}$, $b = 11.6182\text{\AA}$, $c = 21.8990\text{\AA}$, $\beta = 93.307^\circ$, $Z = 9$.

Образец стехиометрии $3\text{SrO} \cdot 7\text{B}_2\text{O}_3$ был получен методом кристаллизации из стекла.

Порошковый рентгенофазовый анализ (дифрактометр Rigaku Miniflex II: $\text{CuK}\alpha$, 30 кВ/15мА, $\theta/2\theta$ геометрия на отражение, PSD детектор D/teX Ultra), позволил определить фазовый состав: образец содержал $\text{Sr}_3\text{V}_{14}\text{O}_{24}$ (программа PDXL2 с базой PDF-2-2020).

Термическое поведение бората $\text{Sr}_3\text{V}_{14}\text{O}_{24}$ изучено в интервале 30–860 °С на воздухе методом порошковой терморентгенографии (дифрактометр Rigaku Ultima IV: $\text{CuK}\alpha$, 40 кВ/30 мА, θ/θ геометрия на отражение, PSD детектор D/teX Ultra). Образец готовился осаждением из гексановой суспензии на платиновую подложку. Обработка терморентгенограмм, расчеты параметров элементарной ячейки и определение тензоров термического расширения проводились в программе Riet To Tensor [2].

По результатам терморентгенографии образец устойчив до 820 °С. При более высоких температурах соединение начинает разлагаться с образованием сначала фазы $\alpha\text{-SrV}_4\text{O}_7$, выше 840 °С появляются пики фазы SrB_2O_4 . $\text{Sr}_3\text{V}_{14}\text{O}_{24}$ полностью распадается при 860 °С на две фазы: $\alpha\text{-SrV}_4\text{O}_7$ и SrB_2O_4 (рис. 1). При различных температурах рассчитаны параметры элементарной ячейки $\text{Sr}_3\text{V}_{14}\text{O}_{24}$. С использованием зависимостей параметров ячейки от температуры, аппроксимированных полиномами 2-го порядка, рассчитаны значения коэффициентов термического расширения (табл. 1). Значения компонентов тензора вдоль направления [100] с температурой увеличиваются и незначительно уменьшаются по направлениям [010] и [001], что приводит к уменьшению степени анизотропии термического расширения. По полученным данным построены сечения фигур поверхностей тензора в плоскостях (101) и (011) (рис. 2). При наложении их на проекции кристаллической структуры можно видеть, что под воздействием температуры структура расширяется максимально в направлении перпендикулярном слоям (рис. 2), что характерно для слоистых структур.

Табл. 1. Коэффициенты термического расширения ($\times 10^6 \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$) для $\text{Sr}_3\text{V}_{14}\text{O}_{24}$

$T \text{ }^\circ\text{C}$	0	100	200	300	400	500	600	700	800
α_{11}	1.4	2.6	3.8	5.0	6.2	7.4	8.6	9.8	11.0
α_{22}	11.2	10.9	10.7	10.4	10.1	9.9	9.6	9.4	9.1
α_{33}	14.2	14.1	13.9	13.8	13.6	13.5	13.3	13.2	13.1
α_β	-0.9	-0.8	-0.8	-0.7	-0.7	-0.6	-0.6	-0.5	-0.5
α_ν	26.8	27.6	28.4	29.2	29.9	30.8	31.5	32.3	33.1

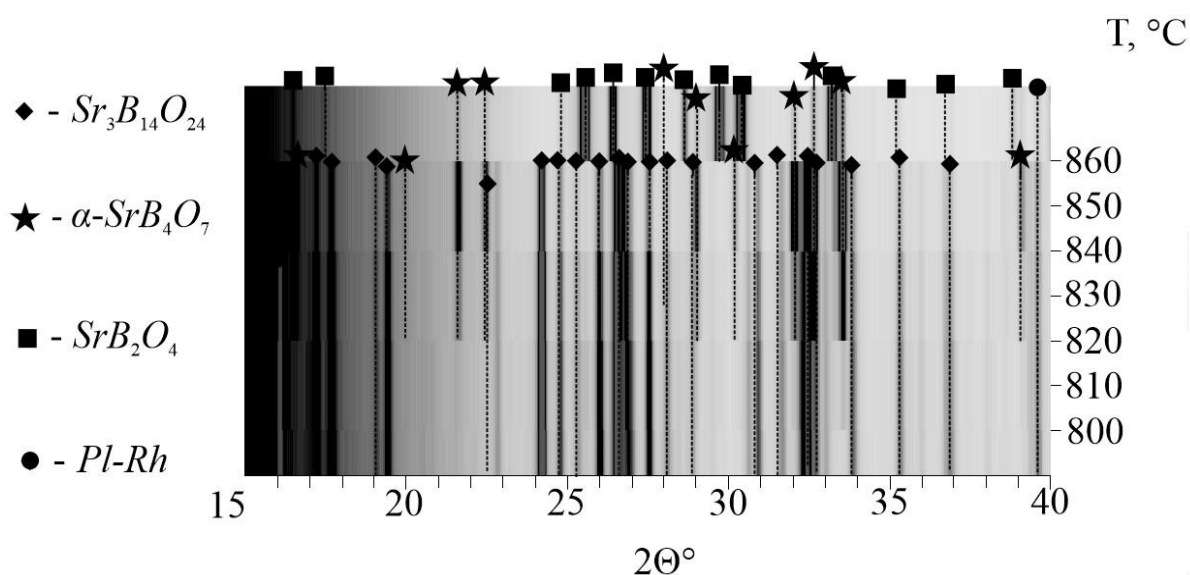


Рис. 1. Разложение $Sr_3B_{14}O_{24}$

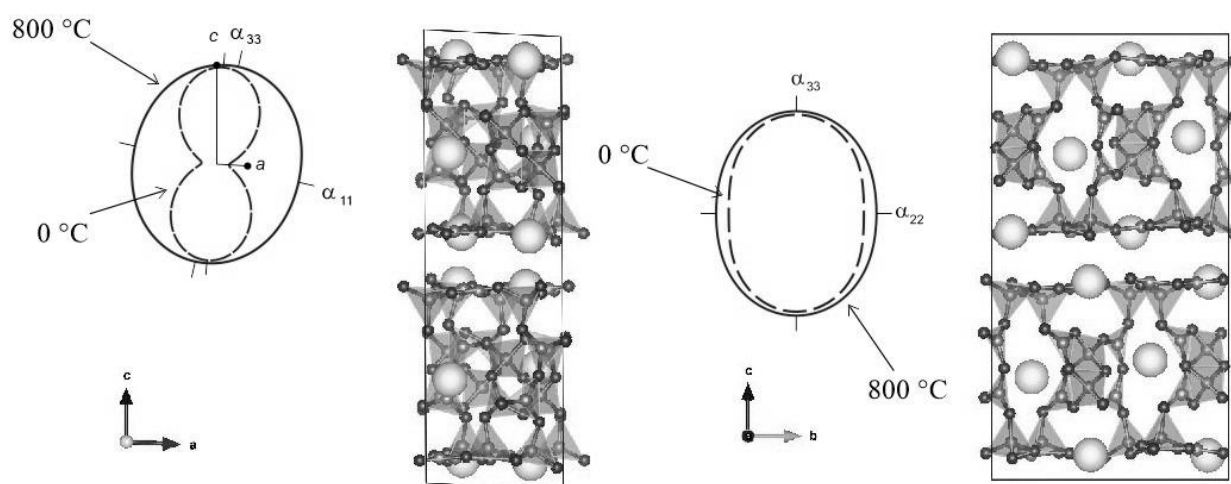


Рис. 2. Проекция кристаллической структуры $Sr_3B_{14}O_{24}$ в сопоставлении с сечениями фигур поверхностей тензора в плоскостях ac , bc при 0 (штриховая линия) и 800 °C (сплошная линия)

Литература:

1. Wu C., Chen Z., Chen J., Yang Z. $Sr_3B_{14}O_{24}$: A New Borate with $[B_{14}O_{30}]$ Fundamental Building Block and Unwonted 2D Double Layer. Dalton Transactions, 2021.
2. Бубнова Р.С., Фирсова В.А., Волков С.Н., Филатов С.К. Rietveld To Tensor: программа для обработки порошковых рентгенодифракционных данных, полученных в переменных условиях // Физика и химия стекла. 2018b. Т. 44. С. 33–40.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ 0081-2022-0002, ИХС РАН) и при финансовой поддержке Российского научного фонда (проекта РНФ № 22-13-00317). Рентгенодифракционные и терморентгенографические исследования проводились в ресурсном центре «Рентгенодифракционные методы исследования» СПбГУ.