

Материалы секции
ХИМИЯ



17-23 апреля 2024
НОВОСИБИРСК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

МНСК-2024

ХИМИЯ

Материалы
62-й Международной научной студенческой конференции

17–23 апреля 2024 г.

Новосибирск
2024

УДК 54+577.1+66.017
ББК Г.я431
Х465

Председатель секции — д-р хим. наук, проф. *В. А. Резников*

Ответственный секретарь секции — канд. хим. наук *А. И. Таратайко*

Экспертный совет секции

д-р хим. наук, проф. *А. В. Ткачев*
д-р хим. наук, проф. *С. Н. Конченко*
д-р хим. наук, проф. *Е. В. Болдырева*
канд. хим. наук *И. П. Поздняков*
канд. хим. наук *А. Р. Цыганкова*
канд. хим. наук *Е. В. Дмитриенко*
канд. хим. наук *А. В. Уткин*
канд. хим. наук *Л. М. Ковтунова*

Х465 Химия : Материалы 62-й Междунар. науч. студ. конф. 17–23 апреля 2024 г. / Новосибир. гос. ун-т. — Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2024. — 212 с.

ISBN 978-5-4437-1621-3

Данное издание представляет собой публикации тезисов 62-й Международной научной студенческой конференции 2024 г. (МНСК-2024) по химии.

Материалы конференции представляют интерес для студентов, аспирантов, преподавателей, научных работников, сотрудников образовательных учреждений.

УДК 54+577.1+66.017
ББК Г.я431

ISBN 978-5-4437-1621-3
DOI 10.25205/978-5-4437-1621-3

© СО РАН, 2024
© Новосибирский государственный университет, 2024

SIBERIAN BRANCH OF RAS
MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION
OF THE RUSSIAN FEDERATION
NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY

ISSC-2024

CHEMISTRY

Proceedings
of the 62nd International Scientific Student Conference

April, 17-23, 2024

Novosibirsk
2024

УДК 54+577.1+66.017
ББК Г.я431
Х465

Section head — Dr Chem. Sci., Prof. *V.A. Reznikov*

Responsible secretary — Cand. Chem. Sci. *A.I. Taratayko*

Section scientific committee

Dr Chem. Sci., Prof. *A.V. Tkachev*
Dr Chem. Sci., Prof. *S.N. Konchenko*
Dr Chem. Sci., Prof. *E.V. Boldyreva*
Cand. Chem. Sci. *I.P. Pozdnyakov*
Cand. Chem. Sci. *A.R. Tsygankova*
Cand. Chem. Sci. *E.V. Dmitrienko*
Cand. Chem. Sci. *A.V. Utkin*
Cand. Chem. Sci. *L.M. Kovtunova*

X465 Chemistry : Proceedings of the 62nd International Scientific Student Conference. April, 17–23, 2024 / Novosibirsk State University. — Novosibirsk : IPC NSU, 2024. — 212 p.

ISBN 978-5-4437-1621-3

This edition represents the publications of the 62nd International Scientific Student Conference 2024 (ISSC-2024) theses in chemistry.

These Conference materials can be of interest for students, Ph.D. candidates, professors, scientists, and members of educational institutions.

УДК 54+577.1+66.017
ББК Г.я431

ISBN 978-5-4437-1621-3
DOI 10.25205/978-5-4437-1621-3

© SB RAS, 2024
© Novosibirsk State University, 2024

УДК 548.3

Синтез, кристаллическая структура и термическое поведение нового оксобората $\text{Nd}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$

Г. С. Сизов

Санкт-Петербургский государственный университет
Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург

Бораты с щелочно- и редкоземельными элементами интенсивно исследуются в последнее время как материалы для оптоэлектроники. В настоящей работе изучены кристаллическая структура по монокристалльным данным и термические свойства нового оксобората $\text{Nd}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$, полученного методом твердофазного синтеза. Порошковые исследования выполнены на Rigaku Miniflex II: $\text{CuK}\alpha$, 30 кВ/15 мА, $\theta/2\theta$, PSD детектор D/teX Ultra. Монокристаллы исследовали на Rigaku XtaLAB Synergy-S: $\text{MoK}\alpha$, 50 кВ/1 мА, НРС детектор HyPix-6000HE. Термическое поведение изучено при 30–1200 °С методом порошковой терморентгенографии на воздухе (Rigaku Ultima IV: $\text{CuK}\alpha$, 40 кВ/30 мА, θ/θ , PSD детектор D/teX Ultra). Для обработки использованы комплексы PDXL2 с базой PDF-2-2020, CrysAlis Pro, Olex2, RietToTensor [2].

Оксоборат $\text{Nd}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$ изоструктурен $\text{Eu}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$ из работы [1], кристаллизуется в тригональной пространственной группе $R\bar{3}c$, $a = b = 8,8488(2)$, $c = 38,2093(11)$ Å, $V = 2591,01(14)$ Å³, $Z = 18$, $R1 = 1,51$ %. В структуре в плоскости ab выделяются двоянные слои из полиэдров $(\text{Nd,Ca})\text{O}_8$ и изолированных BO_3 треугольников, связанные вдоль $[001]$ полиэдрами NdO_9 и дополнительными атомами кислорода. По данным терморентгенографии образец стабилен в исследуемом диапазоне. Параметры элементарной ячейки $\text{Nd}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$ рассчитаны при различных температурах, средние значения коэффициентов теплового расширения: $\alpha_{11} = \alpha_{22} = 7,9$, $\alpha_{33} = 23,5$, $\alpha_V = 40,2 \times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$. Структура расширяется резко анизотропно — максимально в направлении $[001]$, перпендикулярно плоскости треугольников BO_3 .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-23-01133) и проведено в ресурсном центре «Рентгенодифракционные методы исследования» СПбГУ.

1. Илюхин А. Б., Джурицкий Б. Ф. Кристаллические структуры двойных оксоборатов $\text{LnCa}_4\text{O}(\text{BO}_3)_3$ ($\text{Ln} = \text{Gd, Tb, Lu}$) и $\text{Eu}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$. Ж. Неорг. Х. 1993. Т. 38. № 6. С. 917–921.
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 // Физ. и хим. стекла. 2018. Т. 44. С. 33–40.

Научные руководители — канд. геол.-минерал. наук, доц. М. Г. Кржижановская,
д-р хим. наук, проф. Р. С. Бубнова