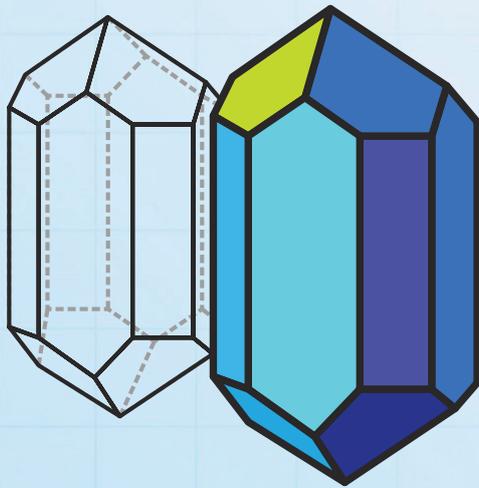


строение, свойства, методы исследования



МИНЕРАЛЫ

14-я конференция

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Уральское отделение

Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого
Южно-Уральский федеральный научный центр минералогии и геоэкологии
Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина
Российское минералогическое общество
Комиссия по рентгенографии, кристаллохимии и спектроскопии



МИНЕРАЛЫ
14-я конференция

XIV ВСЕРОССИЙСКАЯ
НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Минералы: строение, свойства,
методы исследования»**

28 мая — 1 июня 2024 г.

ЕКАТЕРИНБУРГ
2024

УДК 549.01

Материалы XIV Всероссийской научной конференции «Минералы: строение, свойства, методы исследования». Екатеринбург: Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН, 2024. 144 с.

ISBN 978-5-89516-336-8

ОРГКОМИТЕТ:

Вотяков С.Л., д.г.-м.н., академик РАН, председатель, ИГГ УрО РАН, Екатеринбург
Зедгенизов Д.А., д.г.-м.н., проф. РАН, сопредседатель, ИГГ УрО РАН, Екатеринбург
Кривовичев С.В., д.г.-м.н., академик. РАН, сопредседатель, ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты
Филатов С.К., д.г.-м.н., проф., сопредседатель, СПбГУ, Санкт-Петербург
Аксенов С.М., д.х.н., ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты
Белогуб Е.В., д.г.-м.н., ИМин УрО РАН, Миасс
Вайнштейн И.А., д.ф.-м.н., проф. РАН, УрФУ, Екатеринбург
Гроховский В.И., к.т.н., УрФУ, Екатеринбург
Ерёмин Н.Н., д.х.н., член-корр. РАН, МГУ, Москва
Дымшиц А.М., к.г.-м.н., ИЗК СО РАН, Иркутск
Замятин Д.А., к.г.-м.н., ИГГ УрО РАН, Екатеринбург
Канева Е.В., к.г.-м.н., ИГХ СО РАН, Иркутск
Лютюев В.П., к.г.-м.н., ИГ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар
Петрова Е.В., к.ф.-м.н., УрФУ, Екатеринбург
Реутский В.Н., д.г.-м.н., проф. РАН, ИГМ СО РАН, Новосибирск
Удачин В.Н., д.г.-м.н., ИМин УрО РАН, Миасс
Чареев Д.А., д.х.н., ИЭМ РАН, Черногоровка
Шендрик Р.Ю., к.ф.-м.н., ИГХ СО РАН, Иркутск
Щапова Ю.В., к.ф.-м.н., ИГГ УрО РАН, Екатеринбург
Упорова Н.С., к.ф.-м.н., секретарь конференции, ИГГ УрО РАН, Екатеринбург



© Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН, 2024

ISBN-978-5-89516-336-8

© Авторы тезисов, 2024

СИНТЕЗ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ТЕРМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ОКСОБОРАТА $\text{Sm}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$

Сизов Г.С.^{1,2}, Кржижановская М.Г.^{1,2}, Бубнова Р.С.², Власенко Н.С.¹, Филатов С.К.¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия, sizov-george@mail.ru

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

В работе [Илюхин, 1993] при исследовании системы $\text{CaO}-\text{Ln}_2\text{O}_3-\text{B}_2\text{O}_3$ ($\text{Ln}=\text{Gd}, \text{Tb}, \text{Lu}$) впервые был синтезирован оксоборат $\text{Eu}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$. Нами получен оксоборат, $\text{Sm}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$, изоструктурный $\text{Eu}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$, и показано существование нового бората Sm близкой стехиометрии, образующегося при разложении $\text{Sm}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$ выше 1200 °С. Для обоих соединений на монокристаллах расшифрованы кристаллические структуры, для $\text{Sm}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$ исследовано термическое расширение.

Порошковые дифракционные исследования выполнены на дифрактометре Rigaku Miniflex II: $\text{CuK}\alpha$, 30 кВ/15мА, $\theta/2\theta$, 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 бората $\text{Sm}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$ изучено в интервале 30–1200 °С на воздухе методом порошковой терморентгенографии (дифрактометр Rigaku Ultima IV: $\text{CuK}\alpha$, 40 кВ/30 мА, $\theta/2\theta$, PSD детектор D/teX Ultra), образец осаждался из гексановой суспензии на платиновую подложку. С помощью сканирующего электронного микроскопа Hitachi S-3400N (приставка EDX) в образцах контролировали содержание Ca и Sm. Для обработки результатов использовались программные комплексы PDXL2 с базой PDF-2-2020, Topas 5, CrysAlis Pro, Olex2, RietToTensor [Бубнова, 2018].

Оксоборат $\text{Sm}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$ кристаллизуется в тригональной пространственной группе $R\bar{3}c$, $a=b=8.7992(3)$, $c=37.8225(15)$ Å, $V=2532.36(16)$ Å³, $Z=18$, $R1=1.18$ %. Структура представлена вдвоенными слоями из 9-вершинных полиэдров (Sm,Ca) O₉ и двух треугольников BO₃, а также кольцами

из 8-вершинных полиэдров SmO₈ и трех несвязанных кислородов. Слои и кольца чередуются вдоль направления [001] и распространяются в плоскости ab . По данным терморентгенографии образец стабилен в исследуемом диапазоне. Структура испытывает максимальное расширение в направлении [001]. С использованием зависимостей параметров элементарной ячейки от температуры, аппроксимированных полиномами 2-го порядка, рассчитаны значения коэффициентов при 600 °С: $\alpha_{11}=\alpha_{22}=7.8$, $\alpha_{33}=23.8$, $\alpha_v=39.3\times 10^{-6}$ °С⁻¹. Новый борат Sm кристаллизуется в гексагональной пространственной группе $P\bar{6}2c$, $a=b=8.8595(2)$, $c=8.1618(2)$ Å, $V=554.80(2)$ Å³, $Z=3$, $R1=1.12$ %. Мотив его структуры в целом похож на $\text{Sm}_2\text{CaO}(\text{BO}_3)_2$, основное отличие в соотношении Sm/Ca в крупных полиэдрах, отсутствии чередования слоев и колец, расположении треугольников BO₃ в каналах вдоль оси 6-го порядка.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-13-00317). Исследования проведены в ресурсных центрах «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Геомодель» СПбГУ.

ЛИТЕРАТУРА

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

Научное издание

**МИНЕРАЛЫ: СТРОЕНИЕ, СВОЙСТВА,
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ**

Материалы XIV Всероссийской научной конференции

Ответственный редактор: Вотяков С.Л.

Оригинал-макет: Амромин И.М.

Верстка и издание книг и журналов на заказ 2077181@mail.ru

ISBN-978-5-89516-336-8



Формат 60x84 1/8, объем 16.51 усл. печ. листов.

Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН

620016, г. Екатеринбург, ул. Академика Вонсовского, 15.

www.igg.uran.ru

