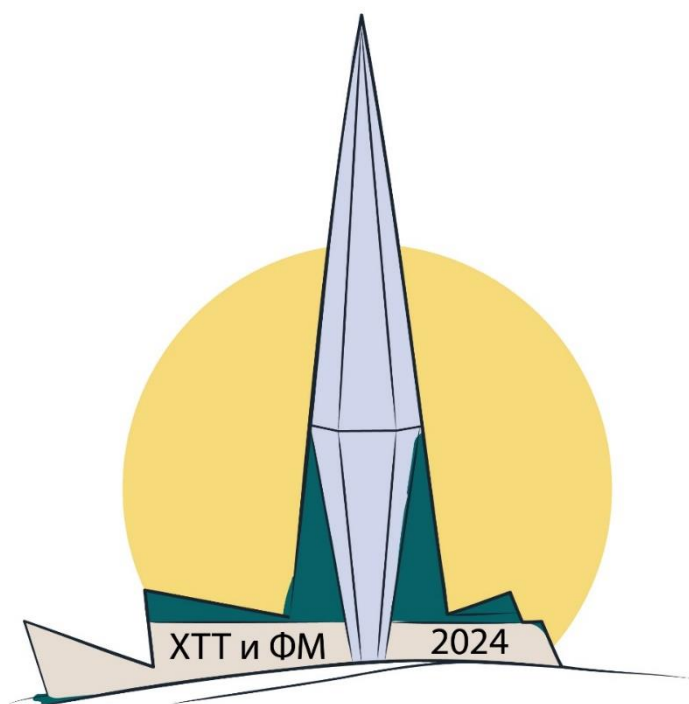


Российская академия наук
Санкт-Петербургское отделение РАН
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева
филиал НИЦ «КИ» — ПИЯФ – ИХС
ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН
ИХТТ УрО РАН
ИХТТМ СО РАН

ХIII Всероссийская конференция с международным участием
**«Химия твёрдого тела
и функциональные материалы 2024»**



ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

16-20 сентября, 2024
Санкт-Петербург

УДК544.2:544.3:546.05

Сборник тезисов XIII Всероссийской конференции с международным участием "Химия твердого тела и функциональные материалы - 2024". 16-20 сентября 2024 года. – СПб.: Типография «НОВБИТХИМ», 2024. –546 с.: ил.

ISBN

Термодинамические свойства керамики на основе системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ при высоких температурах: эксперимент и моделирование

Ворожцов В.А.¹, Шилов А.Л.¹, Лопатин С.И.^{1,2}, Столярова В.Л.^{1,2},
Федорова А.В.^{1,2}

1 - филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС, Санкт-Петербург, Россия

2 - Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: v.vorozhcov@rambler.ru

В настоящей работе изучены термодинамические свойства и процессы испарения керамики на основе системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$, представляющей значительный интерес для разработки огнеупорных материалов, электрооптических устройств и матриц для захоронения радиоактивных отходов [1, 2]. Образцы системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ получены методом твердофазного синтеза при максимальной температуре 1573 К в течение 30 часов, а также идентифицированы методами рентгенофазового и рентгенофлуоресцентного анализа. Масс-спектрометрическим эффузионным методом Кнудсена показано, что при температурах выше 2270 К основными молекулярными формами пара над расплавами изученной системы были TiO_2 , TiO , LaO и O , что соответствовало составу пара над соответствующими индивидуальными оксидами. Определены температурные зависимости парциальных давлений пара TiO_2 и TiO над образцом, содержащим 90 мол. % TiO_2 , а также концентрационные зависимости парциальных давлений идентифицированных молекулярных форм пара и активностей TiO_2 в расплавах системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ при температурах 2290 К и 2475 К. Высказано предположение о существовании азеотропа в исследованном интервале температур и концентрационной области 55-65 мол. % TiO_2 . Полученные величины активностей TiO_2 в расплавах системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ были аппроксимированы с привлечением полинома Редлиха-Кистера [3] и оптимизированы на основе обобщённой решёточной теории ассоциированных растворов (ОРТАР) [4], что позволило рассчитать активности La_2O_3 и избыточные энергии Гиббса в расплавах системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$. Полученные результаты свидетельствовали об отрицательных отклонениях от идеального поведения в изученной системе. На основе подхода ОРТАР были выявлены взаимосвязи между концентрационными зависимостями термодинамических свойств и изменением относительного количества связей с учётом второй координационной сферы в модельной решётке расплавов системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$.

Литература

1. Škapin S.D., Kolar D., Suvorov D. *J. Eur. Ceram. Soc.*, 2000, 20(8), 1179.
2. Vidmar M., Golobič A., Meden A., et al. *J. Eur. Ceram. Soc.*, 2015, 35(10), 2801.
3. Redlich O., Kister A.T. *Ind. Eng. Chem.*, 1948, 40(2), 345.
4. Barker J.A. *J. Chem. Phys.*, 1952, 20(10), 1526.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-13-00254. Авторы благодарят ресурсные центры «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Методы анализа состава вещества», а также криогенный отдел Научного парка Санкт-Петербургского государственного университета за предоставленную возможность использования приборной базы, консультаций специалистов и поставки жидкого азота для масс-спектрометра.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Пленарные доклады	9
Новые электродные материалы для натрий-ионных аккумуляторов	
<u>Антипов Е.В.</u>	11
Наноматериалы для спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния: дизайн, свойства, перспективы практического использования	
<u>Гудилин Е.А.</u> , <u>Семенова А.А.</u> , <u>Браже Н.А.</u> , <u>Веселова И.А.</u>	12
Влияние эффектов порядка-беспорядка на особенности кристаллических структур и функциональных свойств твердых растворов замещения неорганических кристаллов	
<u>Еремин Н.Н.</u>	13
Химия твердого тела и тонкопленочные оксидные материалы	
<u>Кауль А.Р.</u> , <u>Маркелова М.Н.</u> , <u>Грабой И.Э.</u> , <u>Амеличев В.А.</u> , <u>Васильев А.Л.</u>	14
Кислородный обмен в нестехиометрических перовскитах со смешанной проводимостью	
<u>Немудрый А.П.</u>	15
Проблемы термодинамики и кинетики коллоидно-химического роста гидроксидных плёнок в аммиачных водных растворах	
<u>Поляков Е.В.</u> , <u>Максимова М.А.</u>	16
Влияние химической модификации наноразмерного диоксида титана на его фотосорбционные свойства	
<u>Ремпель А.А.</u>	17
Закономерности синтеза композиционных покрытий на основе полимеров из активной газовой фазы	
<u>Рогачев А.А.</u> , <u>Ярмоленко М.А.</u> , <u>Рогачев А.В.</u>	18
Нанокристаллические материалы для полупроводниковых газовых сенсоров: химические аспекты формирования функциональных свойств	
<u>Румянцева М.Н.</u>	19
Синтез и свойства оксидных материалов на основе редких металлов	
<u>Рычков В.Н.</u> , <u>Карташов В.В.</u> , <u>Денисова Э.И.</u> , <u>Жиренкина Н.В.</u> , <u>Алешин Д.К.</u> , <u>Бакшеев Е.О.</u> , <u>Аликин Е.К.</u> , <u>Хорошавцева Н.В.</u>	20
Термодинамический подход к изучению высокоэнтропийных систем методом высокотемпературной масс-спектрометрии	
<u>Столярова В.Л.</u>	21
Фазовые равновесия и особенности кристаллической структуры перовскитоподобных ферритов/кобальтитов РЗЭ и ЩЗМ при варьировании химического состава	
<u>Черепанов В.А.</u> , <u>Аксенова Т.В.</u> , <u>Бастрон И.А.</u> , <u>Власова М.А.</u> , <u>Волкова Н.Е.</u> , <u>Гаврилова Л.Я.</u> , <u>Головачев И.Б.</u> , <u>Давыдова М.В.</u> , <u>Урусова А.С.</u>	22
Путешествие в мир одномерных магнетиков: кристаллохимия и физические свойства	
<u>Шванская Л.В.</u>	23
Материалы для твердотельных литиевых аккумуляторов	
<u>Стенина И.А.</u> , <u>Воропаева Д.Ю.</u> , <u>Ярославцев А.Б.</u>	24

Пероксогруппа на поверхности перовскита SrFeO_{3-d} по данным DFT	
<u>Афимченко Н.А., Зильберберг И.Л.</u>	180
Определение энтальпии образования высокоэнтропийных цирконатов методами калориметрии сброса и растворения	
<u>Баженова И.А., Гагарин П.Г., Гуськов А.В., Гуськов В.Н.</u>	181
Применимость универсальных нейросетевых межатомных потенциалов для расчета упругих свойств высокоэнтропийных сплавов	
<u>Балякин И.А., Рыльцев Р.Е., Щелкачев Н.М., Упоров С.А.</u>	182
Анализ экспериментальной теплоёмкости γ-K₂Gd(MoO₄)₂: фононная компонента	
<u>Беспятов М.А., Шевелев Д.С., Гельфонд Н.В.</u>	183
Высокотемпературные термодинамические свойства аденозина	
<u>Беспятов М.А., Назарова А.А., Пищур Д.П., Кузин Т.М.</u>	184
Концентрационный изотермический тетраэдр системы Li–Mn–Eu–O	
<u>Бузанов Г.А., Нипан Г.Д.</u>	185
Особенности фазовых равновесий в системе Li–Eu–O	
<u>Бузанов Г.А., Нипан Г.Д.</u>	186
Термодинамические свойства керамики на основе системы La₂O₃-TiO₂ при высоких температурах: эксперимент и моделирование	
<u>Ворожцов В.А., Шилов А.Л., Лопатин С.И., Столярова В.Л., Федорова А.В.</u>	187
Синтез и термодинамические свойства гексаалюминатов магния-РЗЭ со структурой магнетоплюмбита RE₂MgAl₁₁O₁₉ (RE=La, Pr, Nd, Sm)	
<u>Гавричев К.С., Гуськов В.Н., Гагарин П.Г., Гуськов А.В., Хорошилов А.В., Рюмин М.А., Никифорова Г.Е., Баженова И.А.</u>	188
DFT расчет поверхностных реакций оксохлоридов молибдена и воды для процессов АСО MoO_x	
<u>Гаджимурадов С.Г., Сулейманов С.И., Абдулагатов И.М., Абдулагатов А.И.</u>	189
Моделирование термического разложения резиновой крошки в реакторе с неподвижным слоем	
<u>Гардер А.Д., Богомолов А.Р.</u>	190
Рецепторные и термодинамические свойства нанокристаллических модификаций бета-циклодекстрина	
<u>Гатиатулин А.К., Зиганшин М.А., Горбачук В.В.</u>	191
Монокристаллический LiCsMo₃O₁₀: рост, термодинамические свойства, параметры фононного спектра	
<u>Беспятов М.А., Черняйкин И.С., Мусихин А.Е., Трифонов В.А., Назарова А.А., Гельфонд Н.В.</u>	192
Термодинамика дефектообразования в слоистых кобальтитах: комбинированный подход	
<u>Гробовой И.С., Политов Б.В., Сунцов А.Ю.</u>	193
Компьютерный дизайн галогенпроизводных ацетилацетона для атомно-слоевого травления	
<u>Дамыров У.М., Сулейманов С.И., Гаджимурадов С.Г., Абдулагатов И.М., Абдулагатов А.И.</u>	194
Прогнозирование совместимости полимеров для полимерных электролитов полуэмпирическим квантовохимическим методом	
<u>Ежов Д.В., Гайдадин А.Н., Климов В.В.</u>	195

АВТОРСКИЙ ИНДЕКС

Chen Y.	147	Антонова Е.П.	244, 358
Fouad M.G.	179	Антонова И.В.	258, 294
Guskov R.D.	179	Аншиц А.Г.	76
Hou Y.	147	Апарнев А.И.	429
Kovalev I.V.	179	Аписаров А.П.	498
Li Y.	147	Арапова М.В.	350, 411
Minchukova O.	147	Арбанас С.	245
Nemudry A.P.	179	Арифов П.А.	391
Piš I.	145	Артамонова О.В.	290
Popov M.P.	179	Артоболевский С.В.	231, 430
Quiñones S.H.	119	Арутюнян Л.Г.	88
Rymski G.	147	Асабина Е.А.	246, 431
Tropin E.S.	179	Астапович К.А.	57
Zhaludkevich A.	147	Асташов А.Г.	432
Абакумов М.А.	360	Астрова Е.В.	356
Абарбанель Н.В.	292	Атаев М.Б.	56
Абашев Р.М.	241	Аулов М.С.	469
Абдулагатов А.И.	84, 189, 194, 234	Афанасьев А.Е.	85, 433
Абдулагатов И.М.	84, 189, 194, 234, 295	Афанасьев П.И.	470
Абдуллина Д.Н.	388	Афимченко Н.А.	180
Абдульменова Е.В.	427	Афонникова С.Д.	250
Абиев Р.Ш.	45	Ахмадуллина Д.Р.	58
Абрамова В.Д.	434	Ахмедов М.А.	56
Аввакумов Т.В.	428	Бабанова О.А.	332
Авдин В.В.	53	Бабешкин К.А.	63
Аверкиев Д.Д.	54	Багрянцева И.Н.	327, 328
Агапов И.В.	100, 239	Баданина К.А.	74, 247
Агафонов Г.О.	97	Баженова И.А.	181, 188, 202, 228
Адамович Д.С.	240	Базай А.В.	68, 298
Азаревич А.Н.	27, 159, 361	Бай Х.	230
Айвазян В.М.	355	Бакланова Н.И.	92
Акамова Е.В.	55	Бакланова Я.В.	166, 448
Акрамов Д.Ф.	120	Бакшеев Е.О.	20
Аксенов С.М.	133, 138	Балашова Е.В.	141
Аксенова Т.В.	22	Балякин И.А.	182
Акулов Д.А.	241	Банару А.М.	133
Александров А.А.	126, 325	Баранов Н.В.	120, 248, 305, 378, 461, 479, 500
Алексеева О.А.	121	Барилюк Д.В.	315
Алешин Д.К.	20	Барина Т.В.	440
Алиева С.Б.	242	Басова Т.В.	203, 293
Аликин Е.К.	20	Бастриков Р.М.	249
Алиханян А.С.	220, 221	Бастрон И.А.	22, 125
Алмаев А.В.	122, 409, 421	Бауман Ю.И.	115, 250
Алмаев Д.А.	122	Бахадур А.М.	434
Алымов М.И.	440	Бахтеева Ю.А.	251
Альмяшев В.И.	225, 428	Бгашева Т.В.	41
Альмяшева О.В.	91	Беккер Т.Б.	252
Амашаев Р.Р.	295	Белоусов А.С.	357
Амеличев В.А.	14, 87, 405	Белоусов Ю.А.	255
Амерханова Ш.К.	457	Белый В.А.	74
Амиров А.М.	56	Бельгибаева Д.С.	457
Анандкумар М.	110	Бельская Н.А.	164
Андреев В.А.	335, 336	Беляков С.А.	435
Андреев С.В.	334	Бер Б.Я.	445
Андрухович И.М.	243, 449	Бережная Т.С.	59, 130
Аникин В.Н.	485	Беспятов М.А.	183, 184, 192, 211
Анкудинов А.В.	277	Биндюг Д.В.	253
Антипов Е.В.	11	Бирюков Я.П.	123, 167, 279

Благовещенский Ю.В.	392	Винник Д.А.	28
Бобровская А.Д.	355	Виноградов В.Ю.	437
Бобрышева Н.П.67, 86, 95, 100, 239, 369, 390, 397, 472		Виноградова В.О.	263
Богач А.В. 27, 159, 299, 361, 412		Витязь П.А.	111, 270
Богданов Н.Е. 124, 128, 227		Вихман С.В.	284, 285
Богданова А.П.	254	Вишневский А.С.	422, 488
Богомолов А.Р.	190, 268	Владими́рова Е.В.	281
Бодров Е.Г.	399	Власов В.А.	69, 70
Бозаров Н.	470	Власов И.В.	131, 267
Бозоров Н.С.	471	Власов М.И.	264
Бойцова О.В.	60	Власова Е.Н.	478
Болдин М.С.	484	Власова М.А.	22
Болдырева Е.В. 124, 127, 128, 169		Вознесенский М.А.67, 86, 95, 100, 239, 390, 397, 472	
Болтков Е.Д.	255	Возняковский А.А.	438, 439
Болтуева В.А.	69, 70	Возняковский А.П.	438, 439
Большаков О.И.	401	Волегов А.С.	102, 120, 334, 378
Борисенко Т.А.	436	Волков Д.А.	405
Борисов Р.В. 61, 137, 143, 300, 442		Волков С.Н.	126, 138, 139
Бородина Е.В.	256	Волков Ф.С.	370
Брагина О.А. 350, 411, 502		Волкова Е.А.	85, 433
Браже Н.А.	12	Волкова Н.Е.	22, 125
Брянцева Ю.Д.	62	Волчек А.А.	126
Бубнова Р.С.46, 123, 132, 139, 157, 167, 168, 279, 389		Волченко Е.И.	440, 441
Бугров А.Н. 257, 262, 263, 288, 348, 424		Воробьев А.М.	436
Бузанов Г.А.	185, 186	Воробьев С.А.	65, 442
Бузлуков А.Л.	448	Воробьев С.А.	300
Бузмакова А.А.	258, 294	Ворожцов В.А.	187
Бузмареv Г.Д.	298	Воронов В.В.	325
Бузоверов М.Е.	63	Воронцов-Вельяминов П.Н.	397
Буй К.Д.	259	Воропаева Д.Ю.	24
Булава А.С.	41	Воротилоv К.А.	277, 422, 443, 488
Булдакова Л.Ю.	274	Воротынцев Д.А.	66
Бурдина А.С.	260, 261	Восканян Л.А.	67, 390
Бурлаченко А.Г.	313	Восмериков С.В.	270, 271
Бучинская И.И.	385, 490	Вронов В.В.	126
Буяков А.С.	144	Габдулхаев М.Н.	30, 444
Буякова С.П. 144, 427, 460		Габриелян Д.А.	405
Буянова Е.С.	90	Гавриков А.А.	265
Бызов И.В.	251	Гавриков А.В.	63
Ваганов Г.В.	263	Гаврилова Л.Я.	22
Вагизов Ф.Г.	123	Гавричев К.С.	47, 188
Вагин В.А.	463	Гагарин П.Г.	181, 188
Ваграмян Т.А.	483	Гагис Г.С.	445
Вайнштейн И.А.	264	Гаджимурадов С.Г.	189, 194, 234
Валеева А.А.	107, 216	Гайдадин А.Н.	195
Ванина П.Ю.	121	Гайдамака А.А.	127, 128
Вартиайнен В.В.	475, 486	Гардер А.Д.	190
Василевич А.Е.	255	Гасенкова И.В.	243
Васильев А.В. 33, 418		Гатиатулин А.К.	30, 191, 444, 493
Васильев А.Л. 14, 87, 405		Гафор М.	77
Васильев Б.В.	262	Гафуров М.М.	56
Васильев В.И.	445	Гафуров М.Р.	235
Васильев И.П. 69, 70		Гельфонд Н.В.	183, 192, 211, 232
Васильева А.А.	154	Генералова К.Н.	260, 261
Васин А.А.	41	Герасимов Е.Ю.	129
Вахрушев Н.Е.	342	Герасимов С.А.	369
Верещагина К.В.	64	Гиниятуллина Ю.Р.	148
Верченко В.Ю. 27, 159, 299, 361, 404, 412		Гипшиус А.А.	142
Веселова И.А.	12	Глазунова М.Ю.	68
Вечерская В.И.	64	Глазунова Т.Ю.	255
Видюк Т.М.	271	Глебов И.С.	473
		Гнеденков А.С.	29