

## **Тезисы докладов X Национальной кристаллохимической конференции**

В сборнике представлены тезисы пленарных лекций, устных и стендовых докладов X Национальной кристаллохимической конференции (Приэльбрусье 5 – 9 июля 2021 г).

Доклады посвящены современному состоянию исследований в области кристаллохимии - фундаментальным вопросам строения и реакционной способности, взаимосвязи «структура-свойство», созданию новых многофункциональных материалов с заранее заданными свойствами, структурным аспектам твердофазных реакций, вопросам динамической кристаллохимии и химической связи, представлены работы по общим вопросам кристаллохимии, методам рентгеноструктурного анализа и возможностям дифракционных методов исследования наноматериалов.

Сборник издан в авторской редакции

Технический редактор – к.х.н. И.А. Шилова

Организаторы конференции:

Институт проблем химической физики, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Конференция проводится при поддержке Российской академии наук, Научного совета РАН по химической физике, Научного совета РАН по материалам и наноматериалам

ISBN 978-5-6044508-3-3

ISBN 978-5-6044508-3-3



9 785604 450833

## ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА И ВАЛЕНТНОСТИ КАТИОНОВ НА ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТУРМАЛИНОВ

Чернышова И.А.<sup>1,@</sup>, Франк-Каменецкая О.В.<sup>1</sup>, Верещагин О.С.<sup>1</sup>,  
Гончаров А.Г.<sup>1</sup>, Мальшкينا О.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский Государственный Университет,  
г. Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Тверской Государственный Университет, г. Тверь, Россия,  
@i.a.chernyshova@yandex.ru

Турмалины являются наиболее распространенными в природе боратосиликатами и представляют собой обширную группу минералов, насчитывающих более 40 минеральных видов. Турмалин кристаллизуется в группе *R3m*, т.е. принадлежит к полярному классу симметрии. Именно в кристалле турмалина впервые был обнаружен пирозлектрический эффект [1]. Интерес к турмалинам связан с поиском линейных пирозлектриков, обладающих спонтанной поляризацией во всей температурной области существования в кристаллическом состоянии и стабильных к воздействию электрических полей. Согласно предыдущим исследованиям [2-3], пирокоэффициент турмалина ( $\gamma$ ) уменьшается с увеличением количества катионов железа. Пирокоэффициент турмалина также должен зависеть от валентности катионов, однако их влияние ранее не изучалось. Целью настоящей работы является изучение влияния химического состава и валентного состояния катионов на пирозлектрические свойства турмалинов.

В ходе настоящей работы было исследовано 5 природных (Fe-, Mg-содержащих), и 2 образца синтетических (Ni- / Cu-содержащих) турмалинов. Природные и синтетические турмалины были изучены методами электронно-зондового микроанализа,  $\theta$ - $2\theta$  сканирования, кривых качания, Мёссбауэровской спектроскопии. Пирокоэффициент турмалинов был измерен на базе Тверского государственного университета динамическим методом [4].

По данным электронно-зондового микроанализа все природные турмалины относятся к натриевой подгруппе, Fe и Mg изменяются от 1.0 до 18.06 масс.% и от 8.12 до 0.48 масс.% соответственно. По результатам Мёссбауэровской спектроскопии в природных турмалинах преобладает  $Fe^{2+}$ , количество  $Fe^{3+}$  не превышает 2.51 масс.%. Значение пирокоэффициента исследованных образцов варьирует от 1.3 до 4.5  $\mu\text{Клм}^{-2}\text{К}^{-1}$ , что совпадает с ранее опубликованными данными [2-3].

Проанализировав опубликованные ранее и полученные нами данные, мы обнаружили значимую прямую корреляцию между пирокоэффициентом и количеством катионов  $Al^{3+}$  (Рис.1а). Кроме того, была обнаружена обратная корреляция с количеством двухвалентных катионов Y- и Z-позиций (Рис.1б), содержание которых зависит от количества  $Al^{3+}$ , а также прямая корреляция с количеством трехвалентных катионов в этих позициях. Исключением из полученных закономерностей является кальциевый турмалин (Рис.1,\*), что может быть следствием влияния на  $\gamma$  турмалина заселенности X-позиции. Зависимость  $\gamma$  турмалина от общего содержания железа не подтвердилась.

Полученные нами данные дают предпосылки для создания новых материалов с улучшенными пирозлектрическими свойствами на основе турмалина.

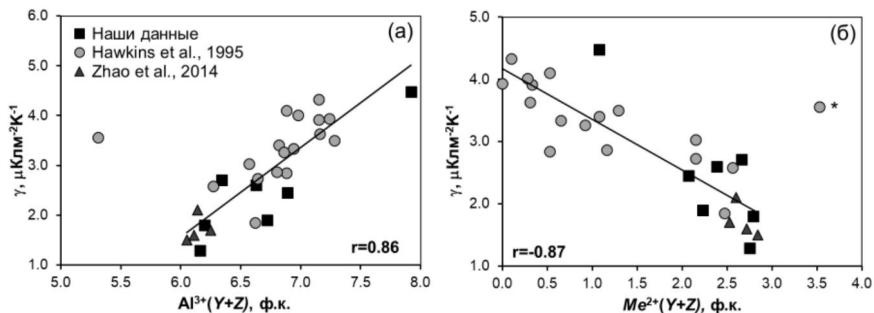


Рисунок 1. Зависимость пирокоэффициента турмалина от содержания катионов в октаэдрических позициях (Y+Z): а)  $Al^{3+}$ ; б)  $Me^{2+}=Fe+Mg+Ni+Cu$ . Образец, помеченный звездочкой, не учитывался при расчете коэффициента корреляции.

Работа проведена при поддержке гранта Президента РФ для молодых кандидатов наук (МК-1832.2021.1.5) в ресурсных центрах СПбГУ («Геомодель», РДМИ) и ИГГД РАН.

- [1] Curie J. et P., 1882, J. de Phys. Th. et app. **1**. 245–251
- [2] Hawkins K.D. et al., 1995, Am. Min. **80**. 491–501
- [3] Zhao C. et al., 2014, Int. J. of Min., Met. and Mat. **21**. 105–112
- [4] Головин В.А. и др., 2013, Техносфера. 271