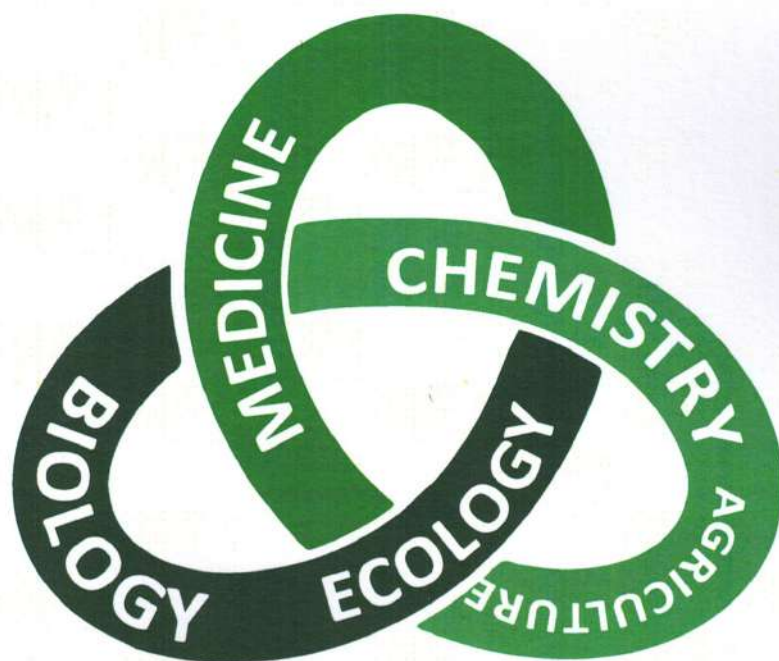


Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Ордена Трудового Красного Знамени
Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова
Российской академии наук

ВТОРОЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ СИМПОЗИУМ «ХИМИЯ ДЛЯ БИОЛОГИИ, МЕДИЦИНЫ, ЭКОЛОГИИ И СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА»

Посвящается 100-летию со дня рождения
академика М.Г. Воронкова



II INTERNATIONAL SYMPOSIUM
ISCHEM 2021

Сборник тезисов докладов

г. Санкт-Петербург
6 - 8 декабря 2021 г.

УДК 54

ББК 24

X46

Второй международный симпозиум «Химия для биологии, медицины, экологии и сельского хозяйства», посвященный 100-летию со дня рождения академика М.Г. Воронкова: Сборник тезисов докладов, г. Санкт-Петербург, 6–8 декабря 2021 г. – СПб: ООО «Издательство «ЛЕМА», 2021. – 190 с.

ISBN 978-5-00105-672-0

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

© Коллектив авторов, 2021

© ООО «Издательство «ЛЕМА», 2021

CaSO₄ // Журнал неорганической химии. 1961. Т.6. В.6. С. 715-717.

2. Erdoes E., Altorfer H. Crystal data for sodium calcium sulphate [Na₄Ca(SO₄)₃] // J.Appl. Cryst. 1978. V.11. P. 159-160.

3. Shablinskii A.P., Filatov S.K., Krivovichev S.V., Vergasova L.P., Moskaleva S.V., Avdontseva E. Yu., Knyazev A.V., Bubnova R.S. Dobrovolskyte, Na₄Ca(SO₄)₃, a new fumarolic sulfate from the Great Tolbachik fissure eruption, Kamchatka Peninsula, Russia // Mineralogical Magazine. 2021. DOI: 10.1180/mgm.2021.9

4. Бубнова Р.С., Фирсова В.А., Волков С.Н., Филатов С.К. RietveldToTensor: программа для обработки порошковых рентгенодифракционных данных, полученных в переменных условиях // Физика и химия стекла. 2018. Т. 44. С. 33–40.

СИНТЕЗ И ИДЕНТИФИКАЦИЯ ОБРАЗЦОВ В СИСТЕМЕ Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂

Юрченко Д.А.¹, Ворожцов В.А.^{1,2}, Богданов О.А.¹, Столярова В.Л.^{1,2}

¹Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

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

Материалы на основе системы Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂ представляют значительный интерес при разработке стеклокерамики, характеризующейся низкими коэффициентами теплового расширения [1] и высокой объемной прочностью [2], для оптической промышленности, медицинского и стоматологического применения [3]. Стекломатериалы на основе рассматриваемой системы имеют уникальный набор следующих физико-химических свойств таких, как высокая химическая устойчивость, термостойкость, низкий ТКЛР, высокие механические и диэлектрические свойства. Однако отсутствие достоверных данных о фазовых равновесиях при высоких температурах в системе Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂ затрудняет синтез и эксплуатацию новых материалов на ее основе.

В настоящей работе выполнен синтез 30 образцов системы Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂, проведена идентификация сосуществующих фаз в полученных образцах методом РФА, результаты которой сопоставлены с соответствующими данными, найденными при моделировании с привлечением базы данных NUCLEA [4, 5].

В качестве исходных реагентов для синтеза образцов системы Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂ были выбраны индивидуальные оксиды алюминия (ХЧ), кремния (ОСЧ) и циркония (ОСЧ). Для проведения твердофазного синтеза смешение указанных компонентов выполнено в среде спирта в течение 8 часов в смесителе «Turbula» с использованием корундовых шаров диаметром 5 мм в пластмассовой таре с коэффициентом заполнения 0.5. Навеска шихты для каждого состава составляла 30 г. Полученные смеси затем были высушены в течение 3 часов при температуре 338 К. Далее полученные образцы системы Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂ просеивались через сито с диаметром ячейки 0.315 мм и прессовались в таблетки массой от 8 до 10 г в стальной форме диаметром 24.88 мм. Синтез исследуемых образцов проводился в два этапа. Сначала было выполнено спекание полученных таблеток на воздухе в печи с нагревателями из фехрала при температуре 1523 К в течение трех часов, а затем после перетиранья в печи с хромитлантановыми нагревателями при температуре 1873 К в течение одного часа на воздухе. В каждом эксперименте нагрев и охлаждение печей проводилось вместе с образцами, причем скорость нагрева и остывания составила 573 К. После первого спекания образцы измельчались в агатовой ступке, просеивались и смешивались в сухом виде в том же смесителе и с использованием той же тары и мелющих тел. Образцы после второго спекания также измельчались и просеивались через сито с диаметром ячейки 0.315 мм.

Идентификация полученных образцов проведена методом рентгенофазового анализа (РФА). Рентгенофазовый анализ исходных компонентов и синтезированных порошков выполнен на многофункциональном порошковом дифрактометре Rigaku SmartLab 3 в диапазоне углов 2θ 5 – 60° при CuKα излучении, с использованием Ni-фильтра и шагом 0.01°. В таблице 1 и на рис. 1 приведены результаты рентгенофазового анализа с указанием сосуществующих фаз для ряда образцов системы Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂.

Секционные доклады

Таблица 1. Фазовые соотношения в образцах системы $Al_2O_3-SiO_2-ZrO_2$, идентифицированные методом РФА и рассчитанные при температуре 1834 К с использованием базы данных NUCLEA [4, 5]

№ образца	Содержание компонентов, $Al_2O_3:SiO_2:ZrO_2$, мол. % (по синтезу)	Фазовые соотношения в системе $Al_2O_3-SiO_2-ZrO_2$	
		По данным РФА при 298 К	Рассчитанные при 1834 К с привлечением базы данных NUCLEA [4, 5]
18	15.5:80.0: 5.0	Муллит и ZrO_2 присутствуют примерно в одинаковых количествах; малое количество $\alpha-SiO_2$; высокое содержание стеклофазы	Муллит, $ZrSiO_4$, расплав
19	22.5:70.0:7.5	Преобладающая фаза – муллит; вторичная фаза – ZrO_2 ; наличие остаточной стеклофазы	Муллит, $ZrSiO_4$, расплав
20	37.5:50.0:12.5	Преобладающая фаза – муллит; вторичная фаза – ZrO_2	Муллит, $ZrSiO_4$, расплав
21	45.0:40.0:15.0	Сопоставимое количество муллита и ZrO_2 ; следы Al_2O_3	Муллит, $ZrSiO_4$, ZrO_2
22	52.5:30.0:17.5	Сопоставимое количество муллита и ZrO_2 ; Al_2O_3	Муллит, ZrO_2 , Al_2O_3
23	60.0:20.0:20.0	Преобладающая фаза – ZrO_2 ; равное количество муллита и Al_2O_3	Муллит, ZrO_2 , Al_2O_3
24	67.5:10.0:22.5	Преобладающая фаза – ZrO_2 ; вторичная фаза – Al_2O_3 ; третичная фаза – муллит	Муллит, ZrO_2 , Al_2O_3

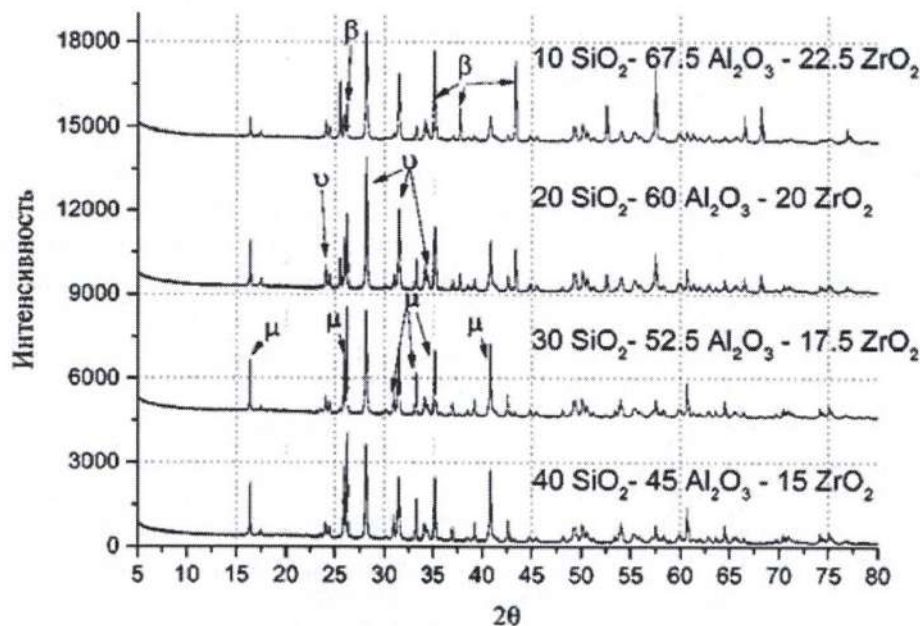


Рис 1. Дифрактограммы образцов №№ 21-24 в системе $Al_2O_3-SiO_2-ZrO_2$

В таблице 1 также приведены данные о сосуществующих фазах, определенных в результате термодинамического моделирования по информации о соответствующих бинарных системах с привлечением базы данных NUCLEA [4] и минимизатора энергии Гиббса Gemini2. База данных NUCLEA [4] представляет собой систематический анализ результатов экспериментального изучения фазовых равновесий и термодинамических свойств в более, чем трёхстах бинарных и трёхкомпонентных системах, представленных в виде самосогласованных диаграмм состояния. Как следует из результатов, приведенных в Таблице 1, наблюдается удовлетворительное соответствие о сосуществующих фазах, идентифицированных методом РФА и предсказанных при моделировании с использованием базы данных NUCLEA.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и КН РА (проект номер 20-53-05013).

1. Höland W., Wange P., Carl G., Vogel W., Heidenreich E., Erxleben H. TiO₂-haltige hochfeste Glaskeramiken aus dem System SiO₂-Al₂O₃-MgO. // Silikattechnik. 1984. V. 35. No. 6. P. 181–184.
2. Frank M., Schweiger M., Rheinberger V., Höland W. High-strength translucent sintered glass-ceramic for dental restorations. // Glas. Ber. Glas. Sci. Technol. 1998. V. 71. P. 345–348.
3. Barry T.I., Cox J.M., Morrell R. Cordierite glass-ceramics-effect of TiO₂ and ZrO₂ content on phase sequence during heat treatment. // J. Mater. Sci. 1978. V. 13. No. 3. P. 594–610.
4. NUCLEA: Thermodynamic database for nuclear applications [Electronic resource]. URL: <http://thermodata.online.fr/nuclea.html> (accessed: 30.03.2020).
5. Ворожцов В.А., Юрченко Д.А., Альмяшев В.И., Столярова В.Л. Фазовые равновесия в системе Al₂O₃-SiO₂-ZrO₂: расчёт и эксперимент. // Физика и химия стекла. 2021. V. 47. No. 5. С. 504–517.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СЛОИСТЫХ ПЕНТАБОРАТОВ

$A^+M^{2+}[B_5O_9]$ ($A = Na, K; M = Ca, Sr, Ba, Pb$)

Южно В.А., Волков С.Н., Бубнова Р.С.

Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

Бораты представляют значительный интерес благодаря наличию у некоторых из них нелинейно-оптических свойств и возможности их применения в качестве матрицы для люминесцентных материалов. Семейство слоистых боратов AMB_5O_9 ($A=Na, K; M=Ca, Sr, Ba, Pb$) [1–5] можно разделить на две структурно близкие группы: $NaMB_5O_9$ и KMB_5O_9 , которые различаются топологически. Различие состоит в ориентировке пентаборатных групп между собой и способе их взаимного сочленения, что приводит к разным элементарным ячейкам.

$NaSrB_5O_9$ синтезирован методом твердофазных реакций, кристаллическая структура определена по монокристалльным данным, а его тепловое расширение измерено методом порошковой терморентгенографии. Данный борат кристаллизуется в моноклинной сингонии, пр. гр. $P2_1/c$. Кристаллическая структура образована параллельными (010) гофрированными слоями из связанных по вершинам пентаборатных групп $[B_5O_9]^{3-}$. Группа $[B_5O_9]^{3-}$ состоит из трех треугольников BO_3 и двух тетраэдров BO_4 , которые конденсируются в двойное кольцо через общий тетраэдр.

Семейство $AM[B_5O_9]$ ($A = Na, K; M = Ca, Sr, Ba, Pb$) представлено двумя структурными типами, которые характеризуются различной ориентацией пентаборатных групп внутри слоев. Проведен топологический анализ слоев и даны соответствующие классификации катионной сетки. Было обнаружено, что тип структуры сильно зависит от разницы ионных радиусов щелочных A^+ и щелочно-земельных M^{2+} катионов. Также обнаружено, что соединение $KCaB_5O_9$ нестабильно в условиях окружающей среды.

Исследования проведены с использованием оборудования ресурсного центра СПбГУ РДМИ. Исследования выполнялись в рамках проекта РФФИ (18-29-12106 мк).

1. Fayos J., Howie R.A., Glasser F.P. Structure of Calcium Sodium Pentaborate // Acta Crystallogr., Sect. C. 1985. C41. P. 1394–1396.
2. Chen X.A., Zuo J.L., Chang X.A., Zang H.G., Xiao W.Q. Synthesis and crystal structure of a novel ternary borate, $NaSrB_5O_9$ // JiegouHuaxue. 2007. No. 26. P. 1081–1086.
3. Wu L., Zhang Y., Chen X. L., Kong Y.F., Sun T. Q., Xu J.J., Xu Y.P. The $Na_2O-SrO-B_2O_3$ diagram in the B-rich part and the crystal structure of $NaSrB_5O_9$ // J. Solid State Chem. 2007. No. 180. P. 1470–1475.
4. Tu J.M. New alkali-metal and aikaiine-eerth metal borates: synthesis, crystal structures, and optical properties (PhD Thesis)//Oregon State University: Corvallis. Oregon. USA. 1995.
5. Zhang M., Pan S., Han J., Zhou Z. Synthesis, crystal structure and optical properties of a novel sodium lead pentaborate, $NaPbB_5O_9$ // J. Solid St. Chem. 2011. No. 184. P. 825–829.

[ХЛОРИД]МЕТИЛ]ЭТИНИЛСИЛАНЫ – НОВЫЕ АЛКИЛИРУЮЩИЕ АГЕНТЫ

Ярош Н.О.¹, Жилицкая Л.В.¹, Ковешникова Е.А.²

¹*Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, Иркутск, Россия*

²*Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия*

Высококонцентрированные кремнеуглеводороды, содержащие многочисленные этинильные группы, представляют собой привлекательные синтетические мишени, поскольку они могут