



ОРГАНИЗАТОРЫ:
Национальный комитет кристаллографов России
Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт»
Федеральный научно-исследовательский
центр «Кристаллография и
фотоника» РАН

ПЕРВЫЙ РОССИЙСКИЙ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ КОНГРЕСС

От конвергенции наук
к природоподобным технологиям

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ КОНГРЕССА
М.В. Ковальчук



Москва, ВДНХ
21–26 ноября 2016 г.

**МОРФОЛОГИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА
ОСНОВЕ AgI В УГЛЕРОДНЫХ
НАНОТРУБКАХ: МОЛЕКУЛЯРНО-
ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Иванов-Шиц А.К.¹, Петров А.В.², Мурин И.В.²,
Готлиб И.Ю.²

¹ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

² Санкт-Петербургский государственный университет
e-mail: ivanov@crys.ras.ru

Внедрённые в углеродные нанотрубки твёрдые электролиты представляют собой новый класс композиционных материалов. Исследование взаимодействия электронной структуры углеродной нанотрубки и характеристик ионного связывания во внедренной неорганической наноразмерной фазе также объединяет в себе фундаментальную составляющую (в частности, изучение особенностей совместного ионно-электронного транспорта) и прикладные аспекты, связанные с созданием новых электродных материалов.

В данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование композиционных материалов на основе AgI и углеродных нанотрубок (AgI-Si₃O₆@SWNT). Модельная система создавалась из углеродной нанотрубки (12,12), в которую вводились катионы серебра и анионы иода, а сформированные нанокластеры оксида Si₃O₆. На первом этапе атомные заряды были рассчитаны методом DFT с функционалом PBE; а MD-расчеты проводились с использованием программного пакета Materials Studio.

Было показано, что введение кластеров Si₃O₆ приводит к изменению как коэффициентов диффузии ионов серебра, так и морфологии твердого электролита внутри нанотрубки. Было изучено влияние типа нанокластеров Si₃O₆ – линейных или циклических, на диффузию ионов серебра определены зависимости межатомных расстояний в композите AgI-SiO₂, находящемуся внутри углеродной нанотрубки от типа наночастиц Si₃O₆.

Расчеты были проведены с использованием вычислительных мощностей Ресурсного Центра «Вычислительный центр СПбГУ» (<http://cc.spbu.ru>).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №14-03-01051

**ФАЗООБРАЗОВАНИЕ, СТРУКТУРА,
МИКРОСТРУКТУРА И
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ КЕРАМИКИ
МОДИФИЦИРОВАННОГО ГАЛЛАТА
ЛАНТАНА**

Калева Г.М., Сухарева И.П., Мосунов А.В.,
Садовская Н.В., Политова Е.Д.

Научно-исследовательский физико-химический институт
им. Л.Я. Карпова

e-mail: kaleva@nifhi.ru

Гетерозамещенный галлат лантана La_{0.9}Sr_{0.1}Ga_{0.8}Mg_{0.2}O_{3-y} является перспективным альтернативным материалом электролита для твердооксидных топливных элементов, функционирующих в области промежуточных температур, ввиду его высокой ионной проводимости в широком диапазоне парциальных давлений кислорода и незначительной электронной проводимости. Одним из эффективных подходов к оптимизации функциональных характеристик керамических материалов является гетероэлементам замещение катионов в базовом составе.

В данной работе методом твердофазного синтеза получены керамические образцы в системе (La_{0.8}Sr_{0.2}){[Ga_{0.8-x}(Si_{0.5}Mg_{0.5})_x]Mg_{0.2}}O_{3-d} (x=0÷0.8) и изучены их фазообразование, структура, микроструктура и электропроводность.

Установлено формирование фазы со структурой перовскита в образцах с x=0÷0.6. Указанные составы характеризуются ромбической структурой (пространственная группа Pbnm). Фрагменты дифрактограмм образцов с замещением части катионов галлия на катионы кремния и магния демонстрируют последовательное смещение дифракционных пиков в область меньших углов, что указывает на небольшое увеличение параметров элементарной ячейки в результате замещения катионов Ga на катионы Si и Mg.

Выявлено, что керамика характеризуется однородной микроструктурой с зёрнами квадратной формы размером (10x10) мкм с проявлением эффекта подплавления границ зёрен, что отражает факт жидкофазного механизма спекания в процессе высокотемпературной обработки. Изучены температурные зависимости полной электропроводности синтезированных керамических образцов и подтверждены ее высокие значения в области температур вблизи 1000 К.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 16-03-00581).