МАТЕРИАЛЫ ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ

IV БАЙКАЛЬСКИЙ МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЙ ФОРУМ

1 – 7 июля 2022
Улан-Удэ – оз. Байкал

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Сибирское отделение РАН
Байкальский институт природопользования Сибирского отделения РАН
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Институт катализа имени Г.К. Борескова СО РАН
Уфимский государственный авиационный технический университет

МАТЕРИАЛЫ
ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
с международным участием

«IV БАЙКАЛЬСКИЙ МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЙ ФОРУМ»
1–7 июля 2022 г., Улан-Удэ – оз. Байкал

Улан-Удэ
Издательство Бурятского научного центра СО РАН
2022

УДК 54
ББК 24
М 341

Маркс Васильевич Мохосоев
(1932–1990)
доктор химических наук,
член-корреспондент АН СССР

Ответственный редактор
д-р хим. наук *Е. Г. Хайкина*

М 341 **Материалы Всероссийской научной конференции с международным участием «IV Байкальский материаловедческий форум» (1–7 июля 2022 г., Улан-Удэ – оз. Байкал)**: электронное издание. – Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН, 2022. – 691 с.

ISBN 978-5-7925-0619-0
DOI 10.31554-978-5-7925-0619-0-2022-4-689

УДК 54
ББК 24

© Коллектив авторов, 2022
© Министерство науки и высшего образования РФ, 2022
© РАН, 2022
© БИП СО РАН, 2022
© Изд-во БНЦ СО РАН, 2022

ISBN 978-5-7925-0619-0

С е к ц и я 1

КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

СВЯЗЬ СТРУКТУРЫ С ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ СВОЙСТВАМИ

НЕСТАНДАРТНАЯ АНИЗОТРОПИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ И / ИЛИ ДАВЛЕНИЯХ

М. Г. Кржижановская[1, 2], Н. А. Жук[3], С. Н. Бритвин[1], Л. А. Горелова[1]
[1] *Санкт-Петербургский государственный университет*
[2] *Институт химии силикатов имени И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург*
[3] *Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар*
mariya.krzhizhanovskaya@spbu.ru

Анизотропное поведение кристаллической структуры при изменении температуры и давления, как правило, можно объяснить с точки зрения строения кристаллической решетки и распределения сильных и слабых химических связей. Это особенно хорошо работает, когда структурный мотив явно выражен, как, например, в слоистых или цепочечных силикатах, и, в таком случае, именно структурный мотив является определяющим фактором анизотропии физических свойств вещества. Однако довольно часто встречаются «исключения из правил», и слоистая или цепочечная структура при нагревании сильно расширяется не перпендикулярно слою / цепи, а, наоборот, вдоль слоя или цепочки, где вроде бы должны быть сконцентрированы наиболее прочные связи. Или другой вариант: в структуре с практически изотропным распределением межатомных взаимодействий вдруг возникает заметное анизотропное тепловое расширение или барическое сжатие. Такие отклонения от стандартов могут быть вызваны сдвиговым или шарнирным характером деформаций [1], ангармонизмом термических вибраций атомов [2] или другими факторами.

В данном исследовании на примере боросиликатов группы стиллуэллита *RE*$BSiO_5$ (*RE* = La, Ce, Nd), содержащих B–Si–O цепи, окаямалита $Ca_2B_2SiO_7$ с тетраэдрическими B–Si–O слоями, оксидов висмута Bi*R*O_4 (*R* = Nb, Ta) [3, 4] с октаэдрическими слоями из *R*O_6-полиэдров и фосфидов типа Me_2P *Me* = Fe, Ni, Mo [5] с практически изотропным распределением связей в решетке, рассматривается нестандартное анизотропное термическое поведение их кристаллических структур при нагревании и/или изменении давления по данным порошковой и монокристальной дифрактометрии и приводятся возможные интерпретации этих феноменов. Проанализированные в данной работе минералы и соединения имеют симметрию не ниже ромбической, что упрощает интерпретацию термического поведения, так как минимизированы эффекты сдвиговых деформаций, наиболее характерные для низкосимметричных моноклинных и триклинных структур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-27-00430).

Литература

1. *Filatov S.K.* // Crystallogr. Rep. 2011. Vol. 56. P. 953.
2. *Bubnova R.S., Volkov S. Albert B., Filatov S.K.* // Crystals. 2017. Vol. 7. P. 93.
3. *Zhuk N.A., Krzhizhanovskaya M.G., Belyy V.A., Makeev B.A.* // Inorg. Chem. 2019. Vol. 58. P. 1518.
4. *Zhuk N.A., Krzhizhanovskaya M.G., Belyy V.A. et al.* // Chem. Mater. 2020. Vol. 32. P. 5493.
5. *Britvin S.N., Vereshchagin O.S., Shilovskikh V.V. et al.* // Am. Mineral. 2021. Vol. 106. P. 944.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ФОСФАТОВ СО СТРУКТУРОЙ ТИПА НАСИКОН

Н. Р. Крутяк[1, 2], Д. А. Спасский[1, 2], Д. В. Дейнеко[1], В. Нагирный[2], В. А. Морозов[1]
[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Россия*
[2] *Тартуский университет, Тарту, Эстония*
kruna@mail.ru

Развитие индустрии источников света ставит всё больше задач в области люминофоров, которые применяются для белых светодиодов. Основной вызов связан с достижением высокой температурной стабильности свечения люминофоров и идеальных цветовых характеристик. На сегодняшний день фосфаты являются отличной матрицей среди неорганических люминофоров благодаря простым условиям синтеза, хорошей химической стабильности и низкой стоимости. Недавно фосфаты

со структурой типа НАСИКОН продемонстрировали перспективность для применения в качестве люминофоров для белых светодиодов. Так, $Na_3Sc_2(PO_4)_3$: Eu^{2+} показал практически полное отсутствие температурного тушения [1], а $Na_{3.6}Y_{1.8}(PO_4)_3$: Eu^{3+} – высокие температурную стабильность и цветовые параметры [2]. В данной работе представлены результаты изучения структурных и люминесцентных свойств люминофоров $Na_{3.6}Lu_{1.8}(PO_4)_3$, как беспримесных, так и легированных редкоземельными элементами (РЗЭ) Eu^{3+}, Dy^{3+} или Tb^{3+}.

Серии $Na_{3.6}Lu_{1.8-x}(PO_4)_3$: $x\,Eu^{3+}$ (x = 0.01–0.7), $Na_{3.6}Lu_{1.8-x}(PO_4)_3$: $x\,Dy^{3+}$ (x = 0.01–0.4) и $Na_{3.6}Lu_{1.8-x}(PO_4)_3$: $x\,Tb^{3+}$ (x = 0.01–0.4), а также беспримесный фосфат $Na_{3.6}Lu_{1.8}(PO_4)_3$ получены методом высокотемпературного твердофазного синтеза. Структура образцов исследована методом рентгеновской дифракции. Спектры люминесценции и возбуждения люминесценции измерены в широком диапазоне температур 5–500 К и энергий возбуждения 2.5–41 эВ методами УФ- и ВУФ-спектроскопии.

Структурный анализ подтвердил, что все синтезированные образцы однофазны и кристаллизуются в структурном типе НАСИКОН с пр. гр. $R\bar{3}$. Показано, что в спектрах люминесценции образцов, легированных РЗЭ, при УФ- и ВУФ-возбуждении доминируют полосы свечения, соответствующие внутриконфигурационным переходам в ионах Eu^{3+}, Dy^{3+} или Tb^{3+}. Определена оптимальная концентрация примеси в каждой серии и показан тип тушения. На основе анализа кинетики затухания получены характерные времена затухания примесного свечения, определены цветовые характеристики люминесценции. Установлено, что при ВУФ возбуждении спектры люминесценции беспримесного образца характеризуются неэлементарной широкой полосой при 370 нм, природа которой связана с дефектами кристаллической структуры $Na_{3.6}Lu_{1.8}(PO_4)_3$. Также изучена температурная стабильность люминесценции для наиболее интенсивных образцов.

Работа выполнена в рамках проекта MOBJD613.

Литература

1. *Kim Y.H. et al.* // Nat. Mater. 2017. Vol. 16. P. 543.
2. *Zhang W.N. et al.* // Ceram. Int. 2021. Vol. 47. P. 284.

ВЗАИМОСВЯЗЬ «СТРУКТУРА – СВОЙСТВО» В РЯДУ АРОМАТИЧЕСКИХ АЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

С. В. Курбатова, М. В. Чекулаев
Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева
curbatsv@gmail.com

Прогнозирование свойств химических соединений и различных материалов до настоящего времени остается одной из наиболее важных проблем современных химии и материаловедения. Для нахождения взаимосвязи между структурой и свойствами используются различные методы компьютерного моделирования, выбор которых зависит от природы исследуемых химических соединений и анализируемых свойств. Среди этих методов особое место занимают квантово-химические методы, которые в последние годы превратились в мощный инструмент исследований в различных областях, что существенно повышает скорость и точность расчетов различных физико-химических характеристик исследуемых объектов и процессов и во многих случаях позволяет достичь прецизионного согласия с экспериментальными данными. Подобное прогнозирование свойств разнообразных химических соединений осуществляется с помощью дескрипторов молекулярной структуры – топологических индексов, физико-химических характеристик, квантово-химических параметров и др.

Квантово-химический подход к установлению механизмов химических реакций основан на моделировании переходных состояний и оценке их энергии в зависимости от геометрических характеристик (длины связей, величины валентных углов) и распределения электронной плотности. Наиболее вероятным с точки зрения данного подхода является механизм, при котором реализуется переходное состояние с наименьшей энергией, то есть реакция характеризуется наименьшей энергией активации. Если реакция многостадийная, наиболее вероятным механизмом является тот, при котором энергия активации лимитирующей стадии является наименьшей. При этом наиболее

Материалы Всероссийской научной конференции с международным участием «IV Байкальский материаловедческий форум»

1–7 июля 2022 г.
г. Улан-Удэ – оз. Байкал

Научное издание

Утверждено к печати ученым советом
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Байкальский институт природопользования
Сибирского отделения Российской академии наук

Статьи даны в авторской редакции

Художник – *Д. Т. Олоев*
Компьютерная верстка – *Т. С. Спиридонова*

Формат 60×84 1/8. Гарнитура Таймс.
Усл. печ. л. 80,4. Уч.-изд. л. 70,0.

Редакционно-издательский отдел
Издательства БНЦ СО РАН
Адрес: 670047 Республика Бурятия
г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 8.