

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ $REVO_3$

Докладчик: Сийдра Екатерина, студент 1 курса магистратуры

Ортобораты редкоземельных элементов $RE_2O_3 : B_2O_3 = 1 : 1$ представляют собой морфотропный ряд, в котором, в зависимости от ионного радиуса редкоземельного элемента, соединения кристаллизуются в структурных типах кальцита, арагонита и фатерита, распространенных среди карбонатов (бораты фатеритового типа часто называют псевдофатеритовыми, так как структура таких боратов не полностью соответствует структуре фатерита), а также в виде H-фазы (высокотемпературная моноклинная), L-фазы (триклинная модификация), ν - и χ -фазы высоких давлений.

Большинство структурных типов ортоборатов содержит изолированные борокислородные треугольники. С возрастанием температуры координационные числа катиона обычно уменьшаются, с увеличением давления их координационные числа, напротив – увеличиваются: в фазах высоких давлений встречаются тетраэдры BO_4 .

Из принципов высокотемпературной кристаллохимии боратов следует, что максимальное термическое расширение будет наблюдаться перпендикулярно к плоскости треугольников, а минимальное – в этой плоскости, что ранее подтверждалось исследованиями двух соединений - $Bi_4B_2O_9$ и $BaNaMe(BO_3)_2$, $Me = Sc, Y$, и изучение термического поведения ортоборатов редких земель пополняет этот список.

На семинаре я планирую рассказать о том,

- как в лаборатории Института Химии Силикатов и на базе ресурсного центра СПбГУ проходило это исследование в рамках моей бакалаврской работы, от синтеза монофазного образца до терморентгенографии;
- почему для одной из фаз было три структурных модели и так и не удалось выбрать нужную и о других проблемах, с которыми можно столкнуться при должном везении;
- что можно сделать, если соединение невозможно найти в порошковой базе данных;
- и как устанавливается связь термического поведения с кристаллической структурой, что и было задачей этой работы.