

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. Ломоносова
ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОХИМИИ

Бучинский Владимир Витальевич

Курсовая работа:

Образование кристаллов: бораты

Научные руководители:

Ст.преп., к.х.н. Д.А. Напрасников,

н.с., к.х.н. Е.И. Марченко

Актуальность темы

БОРАТЫ

- Обладают рядом полезных свойств: нелинейно-оптические, лазерные, активно-нелинейные и др.
- Имеют широкое практическое применение: в ядерной энергетике, обрабатывающей промышленности, высокотехнологичном секторе, медицине и других областях
- Имеют потенциал создания перспективных материалов на их основе и внедрения их в промышленность

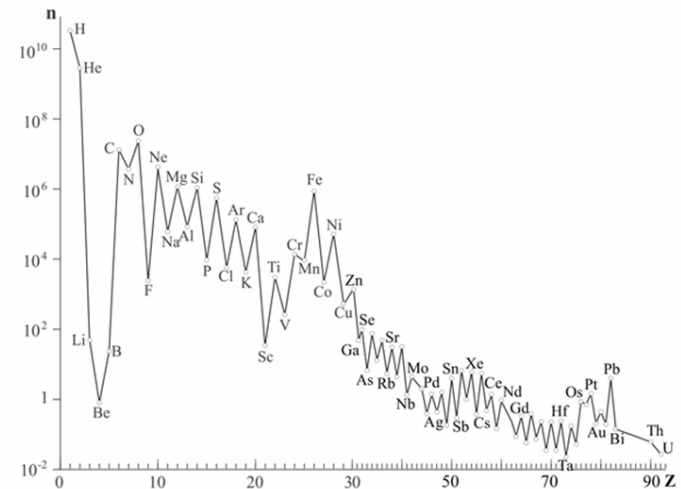
Цели работы

- Ознакомление с классом боратов, его минералогическими, химическими и кристаллохимическими особенностями, сферами применения этих материалов.
- Рассмотрение основных методов синтеза боратных соединений, их анализ и сравнение между собой.
- Изучение базовых принципов компьютерных методов прогнозирования кристаллических структур. Построение модели межатомных потенциалов взаимодействия для $RAI_3(BO_3)_4$ – бората с СТ хантита

Общая характеристика

БОР

- Относительно редкий элемент, кларк $1.2 \cdot 10^{-3}$ масс.%
- Образует более 240 минералов
- По совокупности свойств резко отличается от других элементов 13 группы



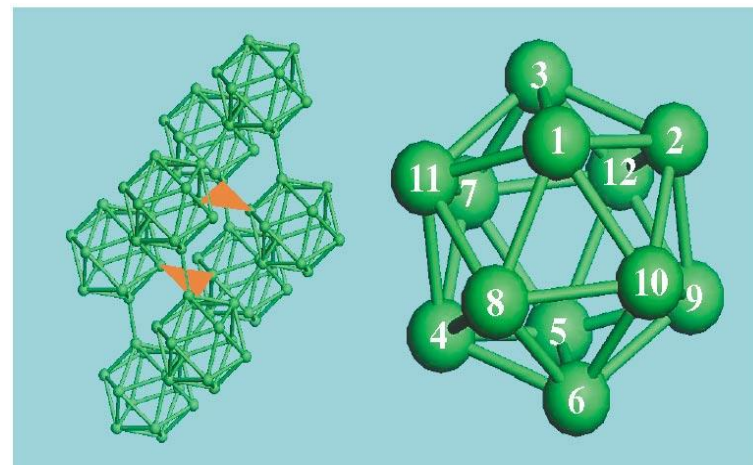
Общая характеристика

- Основной КП бора – икосаэдр.
Структура очень устойчивая

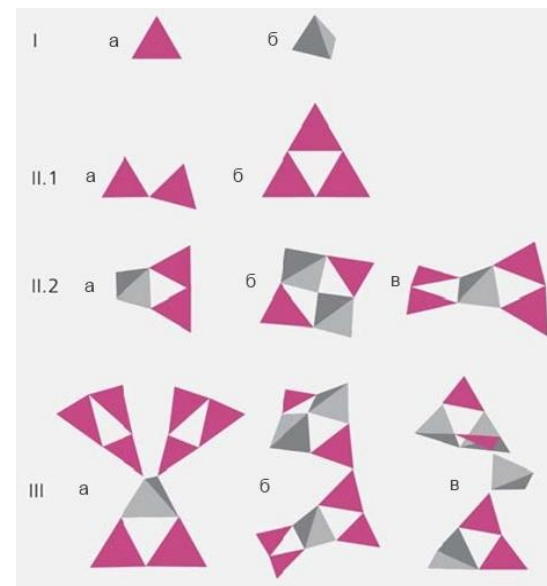


$T_{пл} = 2093^{\circ} \text{C}$,

твердость ≈ 9.5 ед. по шкале Мооса



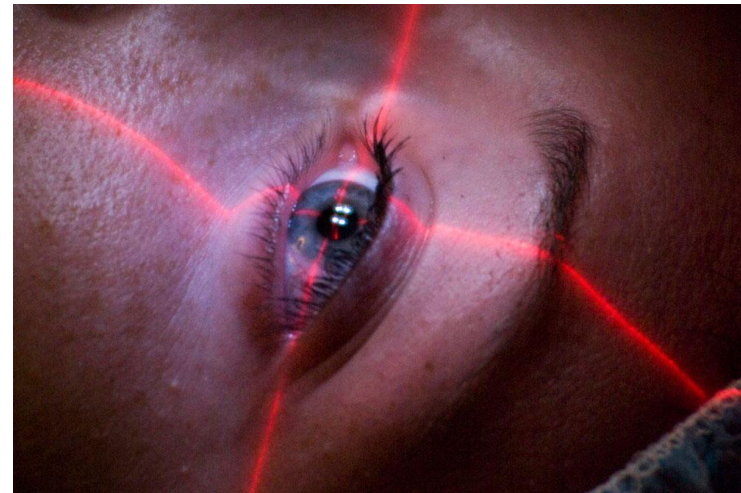
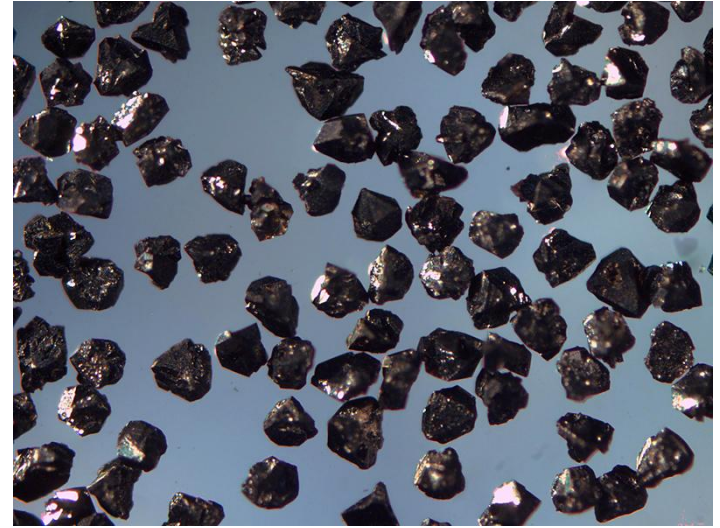
- Два типа КП – $[\text{BO}_3]^{3-}$ -треугольник и $[\text{BO}_4]^{5-}$ -тетраэдр, способных формировать полианионные комплексы



Сферы применения

Соединения бора применяются

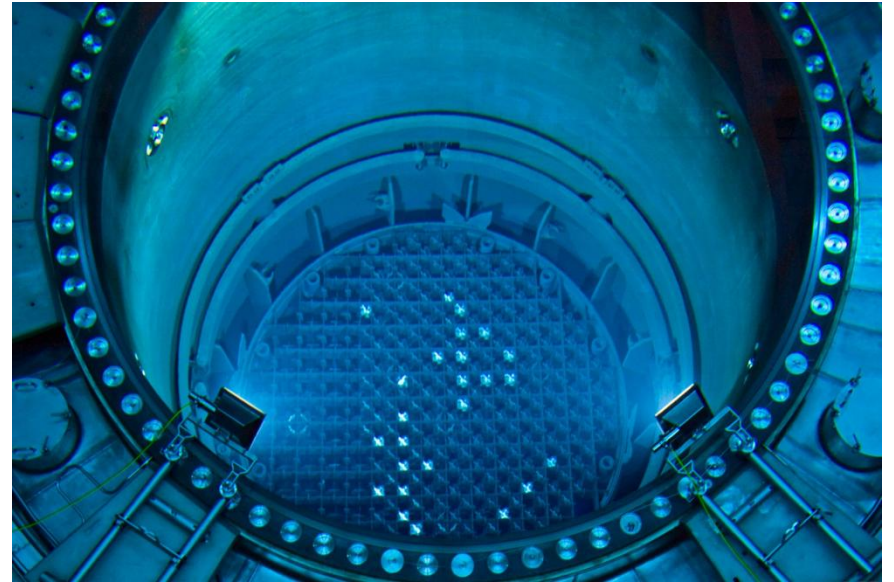
- В медицине
- При создании огнеупорных и абразивных материалов
- В лазерных технологиях



Сферы применения

Бораты применяются

- В ядерной энергетике
- высокотехнологичном секторе
- И многих других областях



Получение кристаллов

Существует 3 основных метода выращивания кристаллов боратов:

- Гидротермальный
- Растворный
- Раствор-расплавный

Получение кристаллов. Гидротермальный метод

- Условия, максимально приближенные к природным
- Температуры 250° - 280° С
- Давления 70-100 атм.

Выделяют 3 разновидности:

Метод температурного перепада

- Создание температурного градиента в автоклаве

Метод общего снижения температуры

- Плавное снижение температуры во всем объеме реактора

Метод «метастабильной фазы»

- Основан на разной растворимости двух фаз

Получение кристаллов. Растворный метод

- Осуществляется при стандартных условиях.
- Легко управляется
- Свободные от механических напряжений кристаллы
- Несмотря на низкую скорость роста, за несколько месяцев можно вырастить крупные кристаллы

Получение кристаллов. Раствор-расплавный метод

- Один из наиболее универсальных
- Широкий интервал используемых температур (500-1500° С)
- Многообразие растворителей

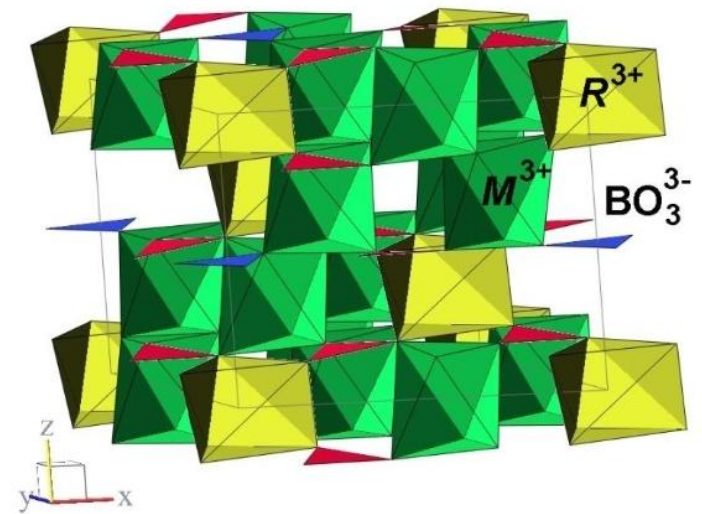
Недостатки

- Сложность выбора растворителя
- Сложность контроля процессов роста

Метод атомистического моделирования

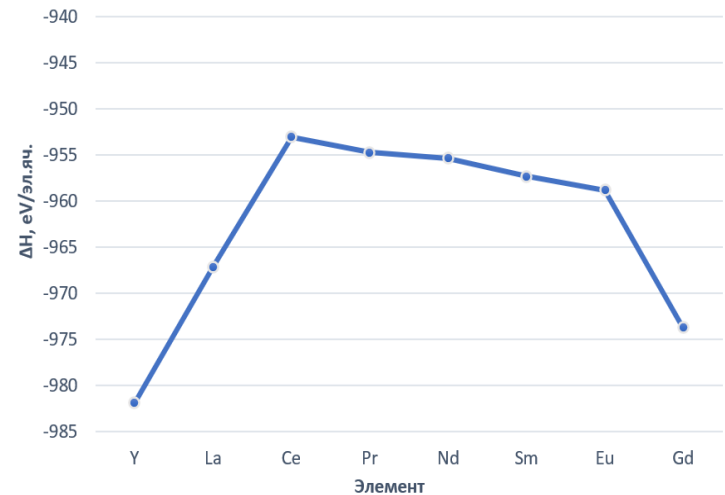
- В качестве объектов для моделирования использовались $RAI_3(BO_3)_4$, где R – это Y и редкоземельные элементы
- Расчеты производились в программе GULP. Была построена модель межатомных потенциалов взаимодействия на основе имеющихся данных из литературы с последующей оптимизацией значений потенциалов
- Для расчетов использовались потенциалы Морзе вида:

$$V(r) = D[\exp(-2\sigma(r - r_0)) - 2 \exp(-\sigma(r - r_0))]$$



Метод атомистического моделирования. Результаты

- В результате расчета, отклонения полученных значений параметров, углов элементарных ячеек и координат атомов от экспериментальных данных составило не более 3%
- Наименьшее значение энергии у кристаллической структуры $YAl_3(BO_3)_4$. Наиболее близкой к ней по значению является структура $GdAl_3(BO_3)_4$
- Остальные структуры этого ряда менее выгодны по энергии. Полученные значения отражены на графике



Заключение

В ходе работы:

- Проанализирована литература, посвященная классу боратов. Рассмотрены минералогические, химические и кристаллохимические особенности, основные методики получения кристаллов боратов, сферы их применения.
- В программе GULP (general utility lattice program) произведен расчет энтальпий образования для $YAl_3(BO_3)_4$

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!