



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Уральское отделение
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА



ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА В 2005 ГОДУ

*(из доклада директора института д.х.н. В.Л.
Кожевникова)*

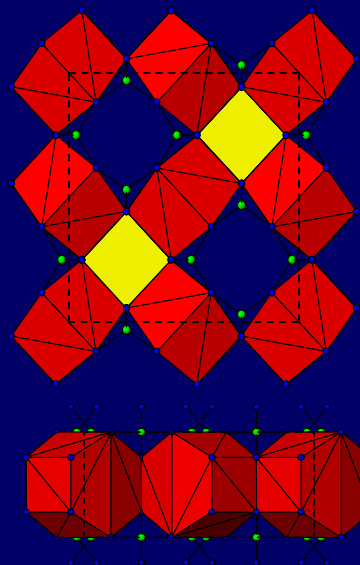
Основные результаты научных и прикладных исследований

Синтез новых люминесцентных материалов

Лаборатории ИХТТ: оксидных материалов, структурного и фазового анализа, ФМИТТ;
Физтех УГТУ-УПИ; Стокгольмский университет

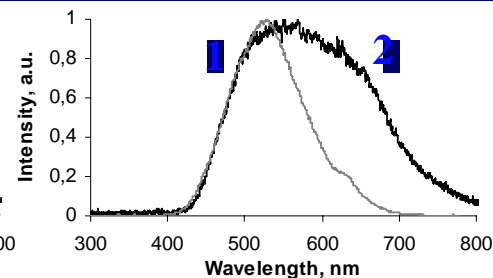
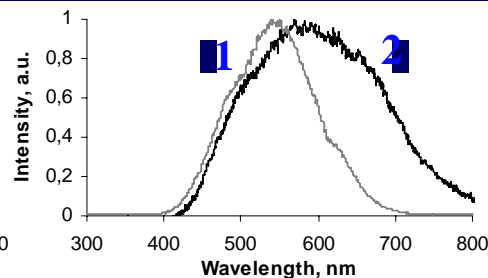
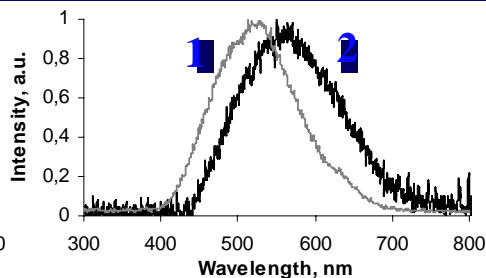
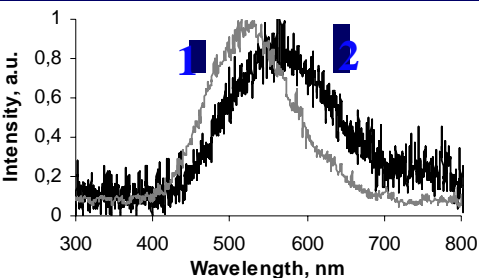
Обнаружено явление селективной чувствительности к фотонным и корпускулярным видам излучений в самоактивируемых сцинтилляционных материалах на основе стронциевых тетраметаванадатов щелочных металлов

*Slobodin B.V et al. Phys. Rev. B, 2005, V. 72.
P. 155205-1 - 155205-12.*

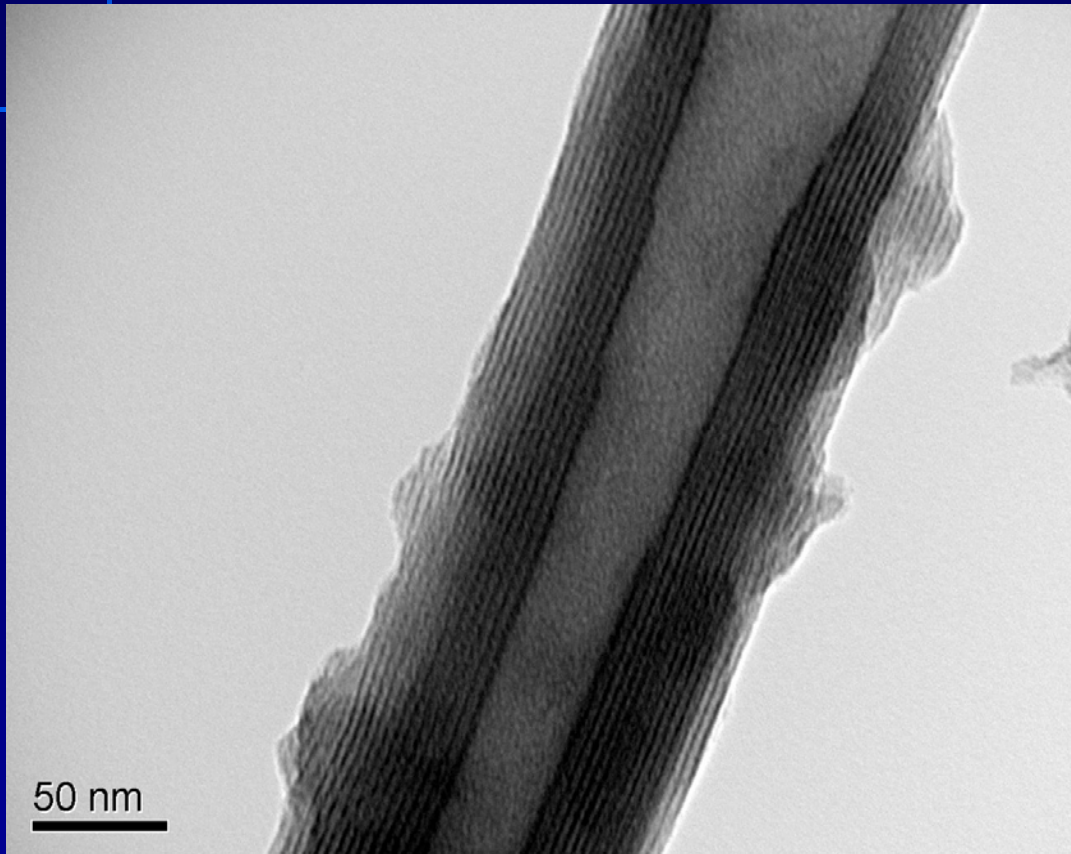


Кристаллическая Cs₂Sr(VO₃)₄:
полиэдры Cs – красный цвет;
полиэдры Sr – желтый цвет;
V - зеленый
O - синий

Спектры флюоресценции при воздействии рентгеновским (1) и электронным (2) пучками



Новые нанотрубчатые формы сложных оксидов переходных металлов

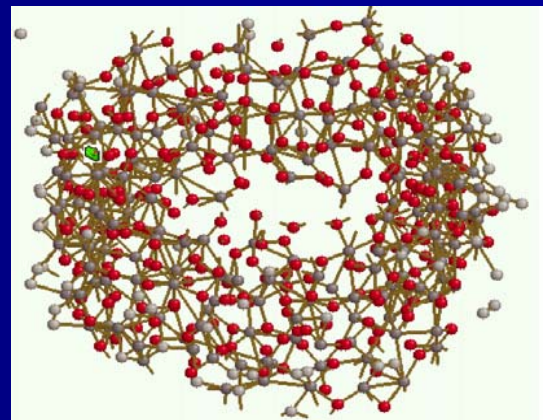
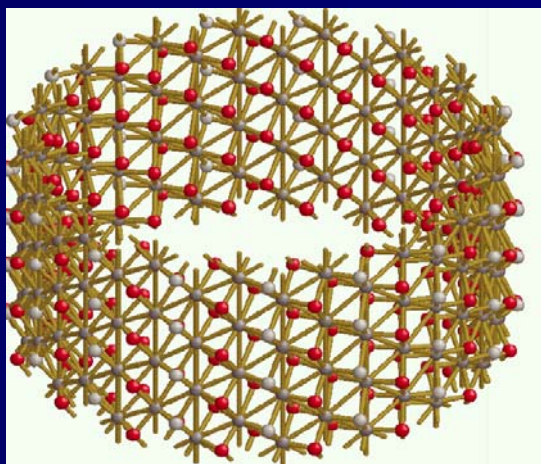


Впервые получены нанотрубки оксида ванадия, легированного хромом и титаном. Материалы представляют интерес для использования в источниках тока.

Многослойная нанотрубка $V_{1.83}Cr_{0.17}O_{5-\delta}$. Внешний диаметр трубки составляет 100-130 нм; диаметр внутреннего канала – 30-35 нм.

Моделирование нанотрубуленов оксикарбидов металлов

С помощью компьютерного моделирования показано, что карботермическое восстановление нанотрубок (НТ) диоксида титана приводит к образованию цилиндрических оксикарбидных нанотрубок с металлическим типом проводимости и аморфной структурой стенок.

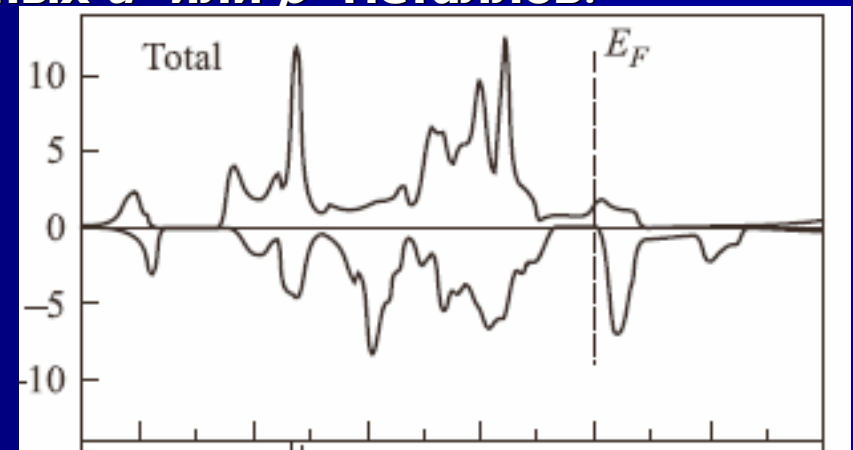
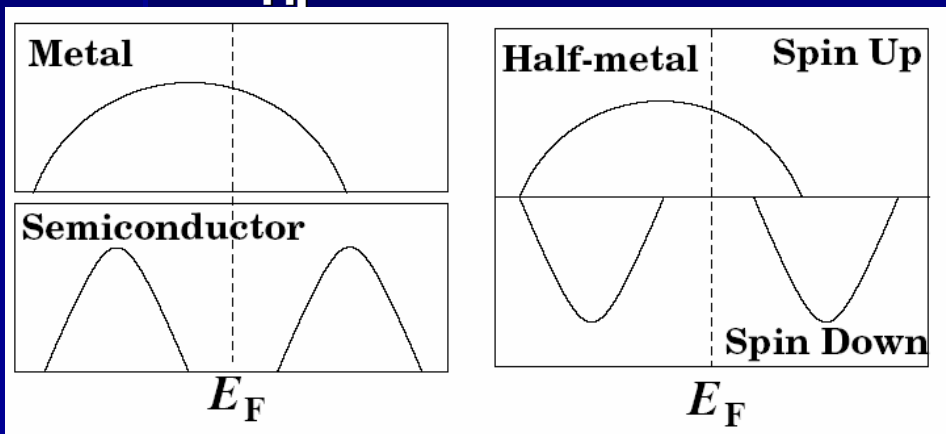


Премия Международной академической издательской компании (МАИК) Наука/Интерпериодика " 2005 года на лучшую публикацию: За цикл статей «Новые наноразмерные неорганические материалы: квантово-химическое моделирование электронного строения и функциональных свойств», опубликованных в Журнале неорганической химии в 2001-2004 гг. присуждена авторам:

Ивановский А.Л., Макурин Ю.Н., Шеин И.Р., Ивановская В.В., Еняшин А.Н., Софронов А.А., Кийко В.С.

Новая группа ферромагнитных полуметаллов как материалов спиновой электроники

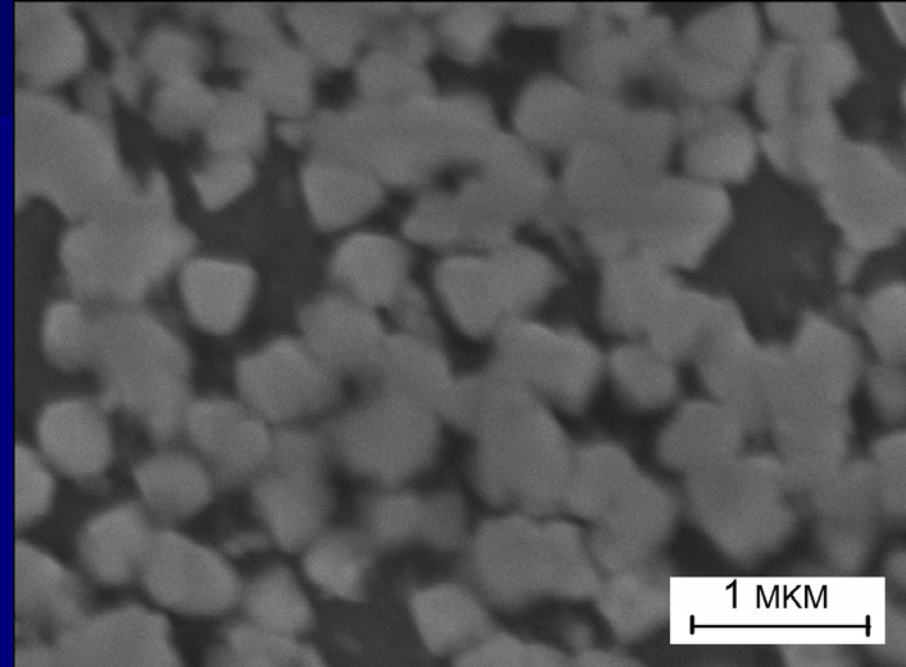
Предложена новая группа перовскитоподобных ферромагнитных полуметаллов как перспективных материалов спиновой электроники. Полуметаллическое состояние перовскитоподобных магнетиков (SrFeO_3 и других) достигается при легировании их магнитной подрешетки ионами немагнитных d - или p -металлов.



Монокристаллический PbS на подложке

*Лаборатория тугоплавких соединений,
Бельгийский Национальный центр атомных исследований, г.Моль*

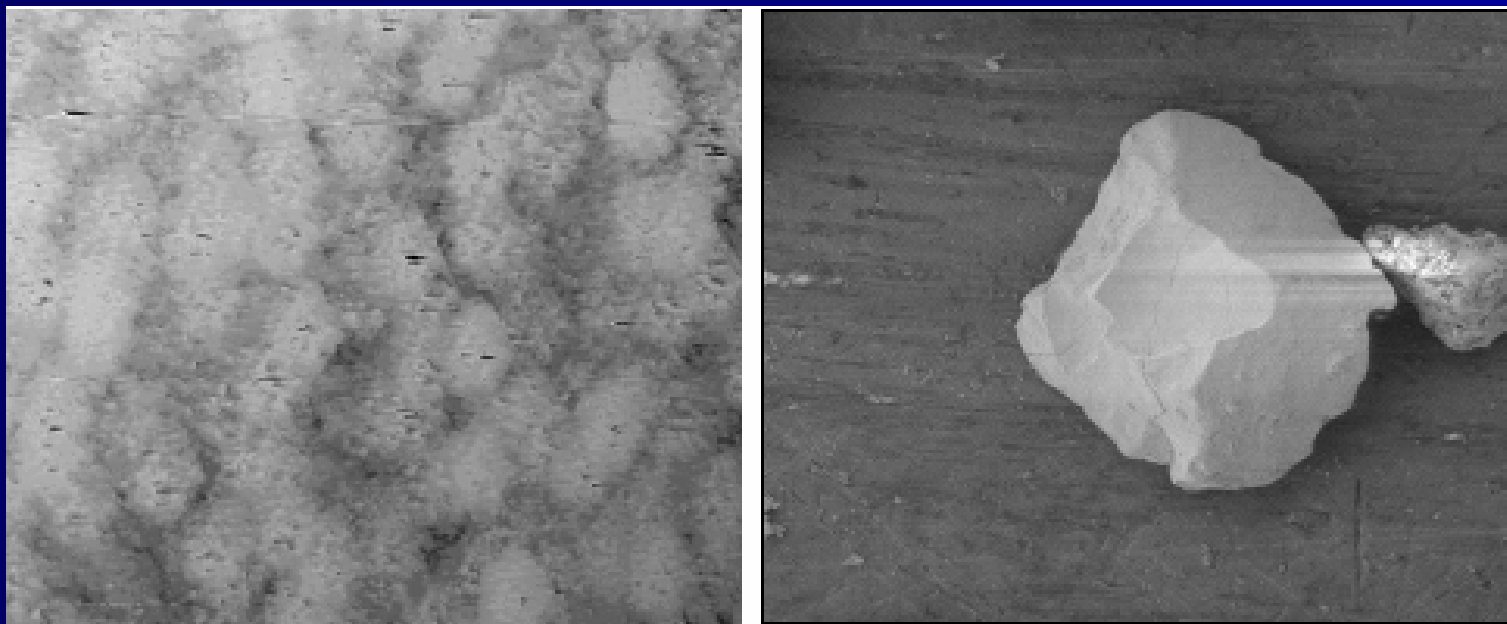
Впервые методом химического осаждения из водных растворов удалось на подложку с широкой запрещенной зоной осадить изолированные друг от друга монокристаллические частицы сульфида свинца со средним размером около 200 нм. Несмотря на то, что частицы довольно велики и превышают размер, при котором наблюдаются квантовые размерные эффекты, предложенный метод можно считать перспективным для получения квантовых точек на основе узкозонных полупроводников.



Изолированные монокристаллические частицы сульфида свинца со средним размером ~200 нм, осажденные на стекло при величине химического сродства 32.5 кДж/моль. Изображение получено методом сканирующей электронной микроскопии.

Нанокompозитные оксидные материалы

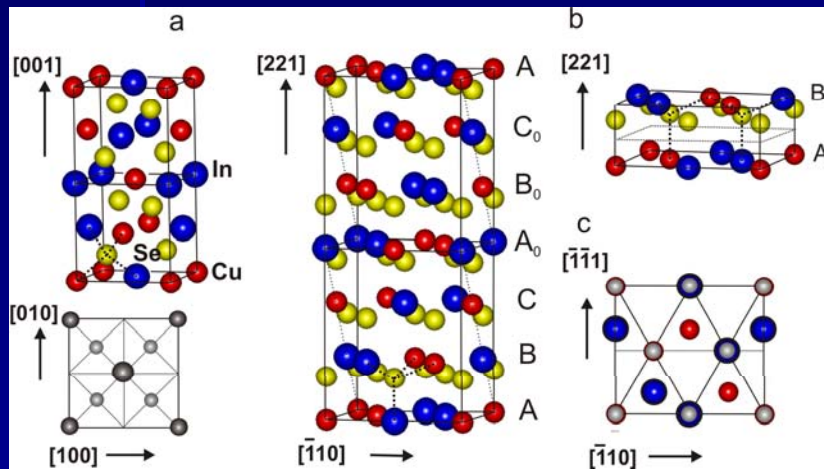
Впервые предложен метод получения нанокompозитных оксидных материалов путем осаждения гидратов металлов из кислых растворов на поверхность инертного носителя, которым является углерод (сажа).



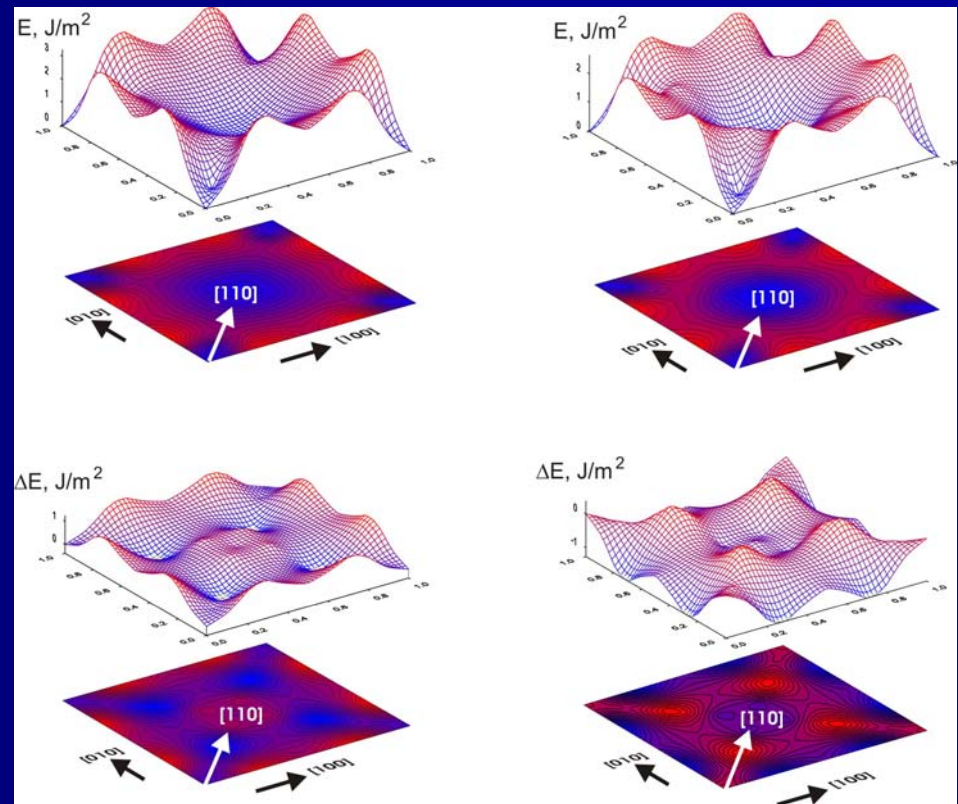
Правильная частица композита $ZrO_2||C$ в форме усеченного октаэдра размером 10-20 мкм, самопроизвольно образующаяся из наночастиц оксида циркония размером около 40 нм.

Механические свойства CuInSe_2 и $\text{Cu}(\text{InGa})\text{Se}_2$ – перспективных материалов солнечных батарей

Впервые изучено деформационное поведение $\text{Cu}(\text{InGa})\text{Se}_2$ – перспективных материалов солнечных батарей, установлен микроскопический механизм хрупкости и предсказана структура дислокаций.

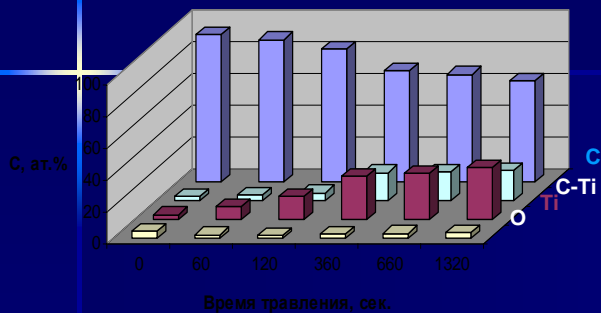


Структура CuInSe_2



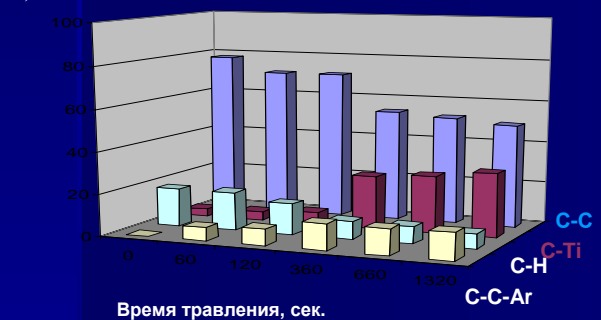
Поверхности энергии сдвиговой деформации CuInSe_2 (слева) и $\text{Cu}(\text{InGa})\text{Se}_2$ (справа)

Бислойные покрытия TiC_xO_y-C как перспективный материал для химического оборудования, работающего в агрессивных средах

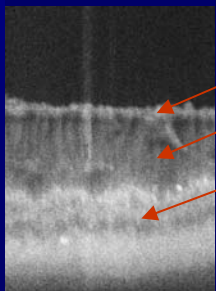


Профиль концентрации элементов по глубине

Химические состояния углерода



Методом ионно-плазменного осаждения созданы и с использованием методов РФЭС и СЭМ проведен анализ состава и морфологии новых перспективных композиционных покрытий на основе оксикарбида титана и аморфного стеклоуглерода, характеризующиеся хорошей адгезией, высокой механической прочностью и химической стойкостью к агрессивным средам.

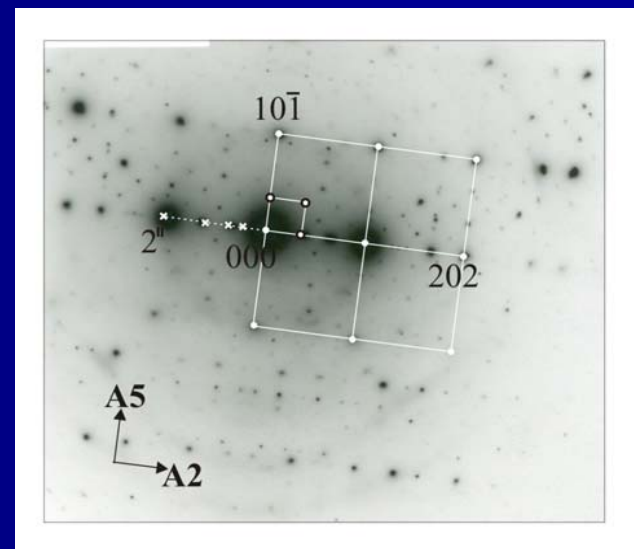
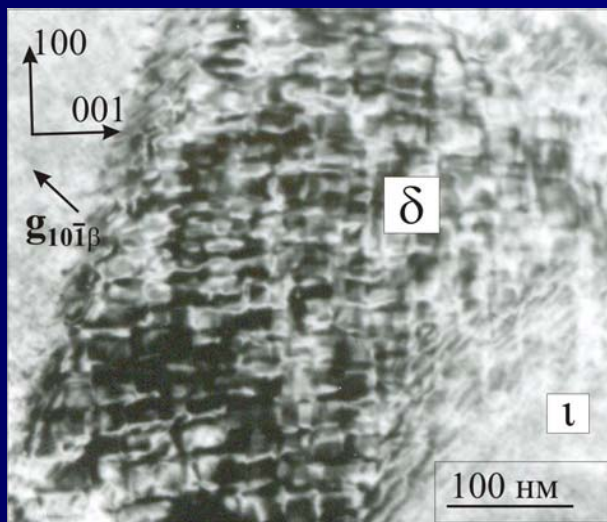


C-C
 TiC_xO_y
сталь

СЭМ-изображение осажденной пленки TiC_xO_y-C

Механизм образования бездефектной икосаэдрической фазы

В β -твердом растворе квазикристаллообразующего сплава $\text{Al}_{61}\text{Cu}_{26}\text{Fe}_{13}$ установлено образование кристаллического аппроксиманта икосаэдрической (i) фазы типа $\delta\text{-Al}_4\text{Cu}_9$, предложена модель начальных стадий превращения $\beta \rightarrow i$

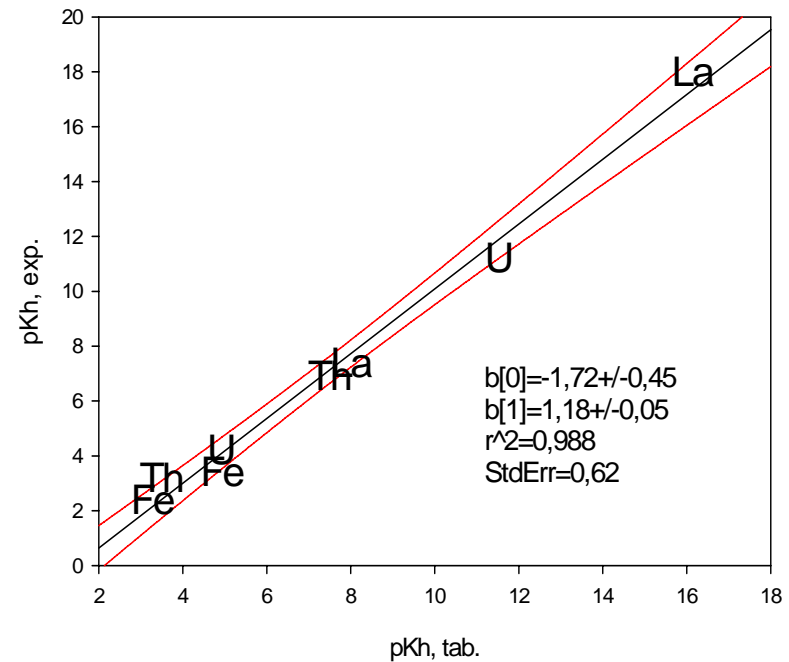


дифракционная картина и электронно-микроскопическое изображение выделения фазы типа $\delta\text{-Al}_4\text{Cu}_9$ в β -твердом растворе Al-Cu-Fe

Сорбция на гуминовых кислотах

При взаимодействии металлов с гуминовыми кислотами методом ионного обмена определен состав гидроксо-комплексов U(VI), La(III), Th(IV), Fe(III) в сернокислых растворах в зависимости от pH. Соответствие определенных экспериментально и табличных констант гидролиза гидроксокомплексов исследованных металлов ($K_{h1,2}$) доказывает, что в изученном диапазоне pH сорбционно активными являются аква-ионы металлов и комплексы состава $M(OH)^{(z-1)+}$, $M(OH)_2^{(z-2)+}$, где M – U, La, Th, Fe, z - валентность металла (верхняя и нижняя кривые у линии регрессии, рис.1). Определено сродство комплексов по отношению к иониту КУ2. Полученные данные будут использованы для последующего определения состава, устойчивости и реакционной способности гуматных комплексов металлов.

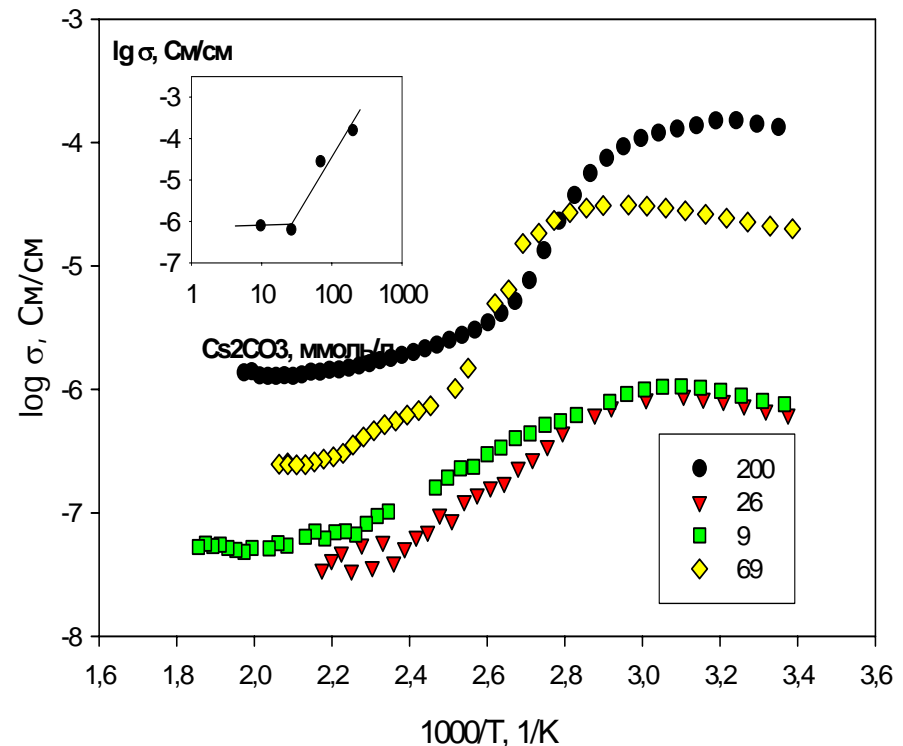
Сравнение экспериментальных и табличных данных по 1-й и 2-й константам гидролиза (pK_h) элементов - продуктов растворения монацита



Молекулярная сорбция на цианоферратах

На примере поликристаллического цианоферрата никеля-цезия экспериментально доказана связь механизма молекулярной сорбции с суперионной проводимостью в области низких и средних температур. Определены энергии ионнообменного и латерального взаимодействия ионов цезия с решеткой цианоферрата никеля, подтвержден латеральный характер молекулярной сорбции карбоната цезия, сопровождающийся сменой механизма ионной проводимости твердофазного продукта в области молекулярной сорбции цезия. Обнаружен концентрационно-зависимый переход фазы в состояние суперионной проводимости.

Политермы удельной электропроводности продуктов сорбции карбоната цезия осадком $\text{Cs}_{1,93}\text{Ni}[\text{Fe}(\text{CN})_6]_4\text{H}_2\text{O}$. Точки - концентрация Cs_2CO_3 в растворе, мМоль/л.



Кристаллизация солей

Впервые доказана возможность описания кинетики кристаллизации соли (на примере хлорида калия) единой системой дифференциальных уравнений вне зависимости от начальных условий кристаллизации. На рис. 3. приведен пример, показывающий согласие между экспериментальными и рассчитанными по предложенной модели (спонтанная кристаллизация хлорида калия).

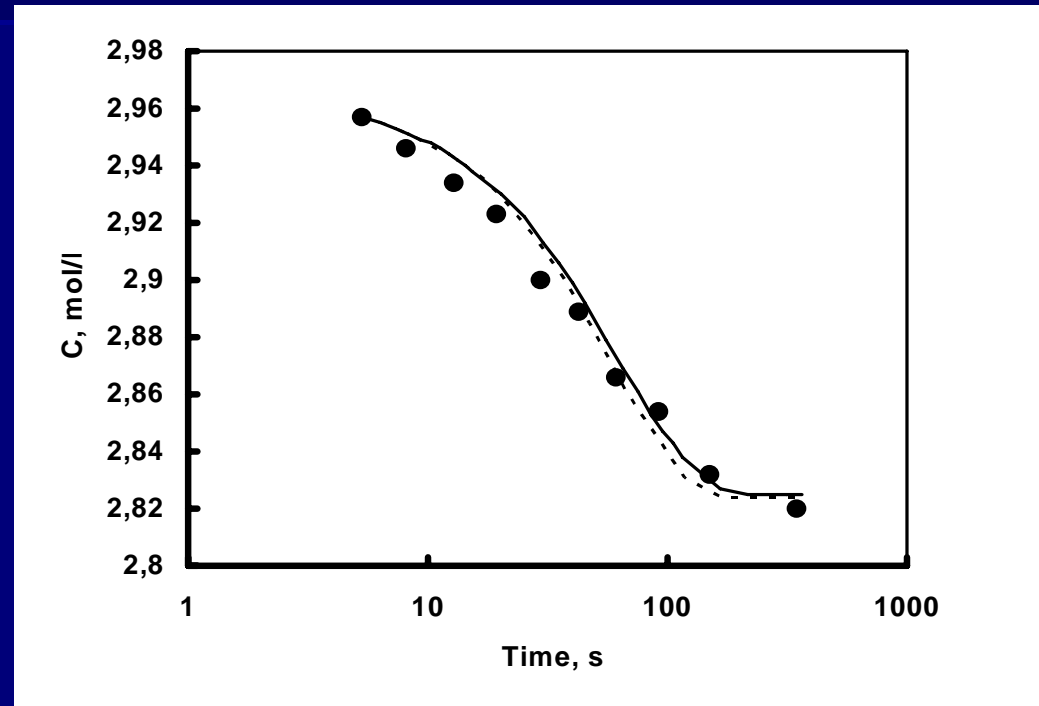


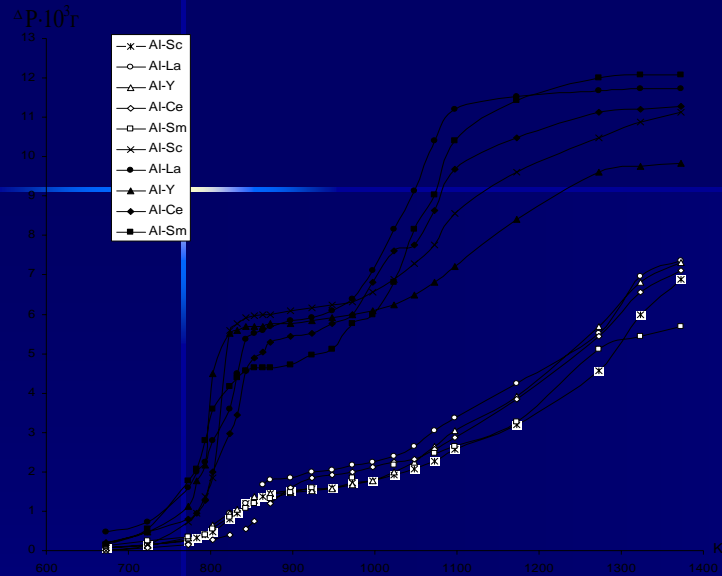
Рис. 3. Изменение концентрации хлорида калия в растворе при кристаллизации.

— эксперимент;

— - теория «1» при $D1=0.6910 \cdot 10^{-2}$, $D2=0.7010 \cdot 10^{-3}$, $K1D3=0.5210 \cdot 10^{-8}$;

- - - теория «1» при средних параметрах модели.

Морфология, состав и структура продуктов окисления порошков сплавов Al – РЗМ и ЦЗМ



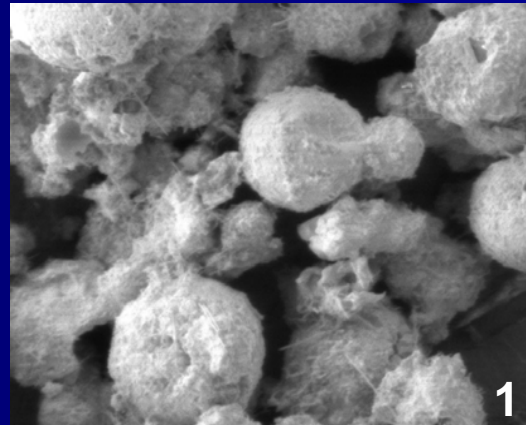
Кривые изменения массы в процессе окисления порошков

Электронно-микроскопическое изображение порошков после их окисления.

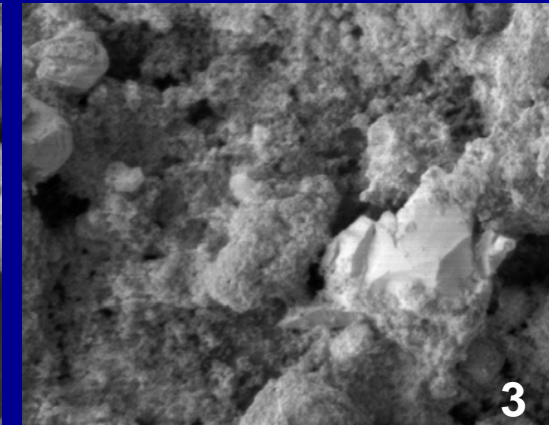
Увеличение 2500 раз.

Обнаружены:

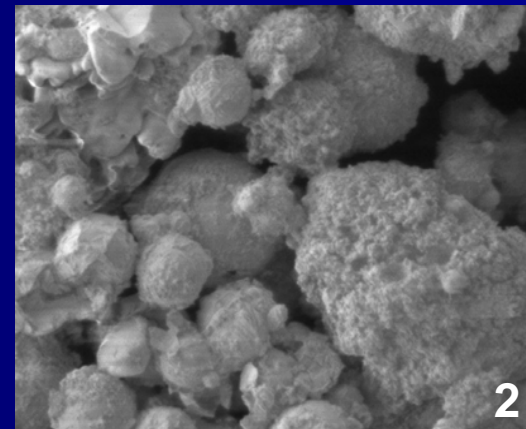
- Агломерация частиц при температурах интенсификации окисления
- Увеличение количества нитридной и оксинитридных составляющих продуктов взаимодействия при росте исходной удельной поверхности
- Увеличение количества аморфных составляющих продуктов взаимодействия при снижении диаметра исходных частиц



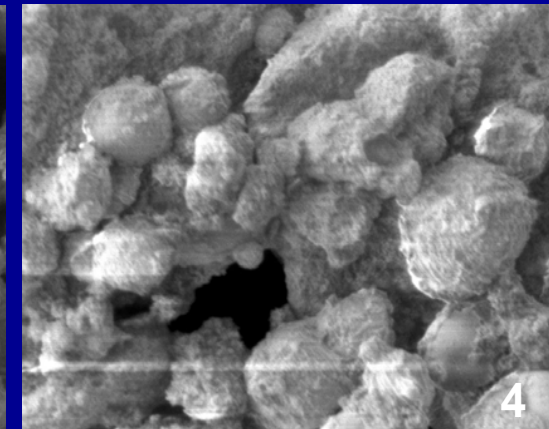
1



3



2



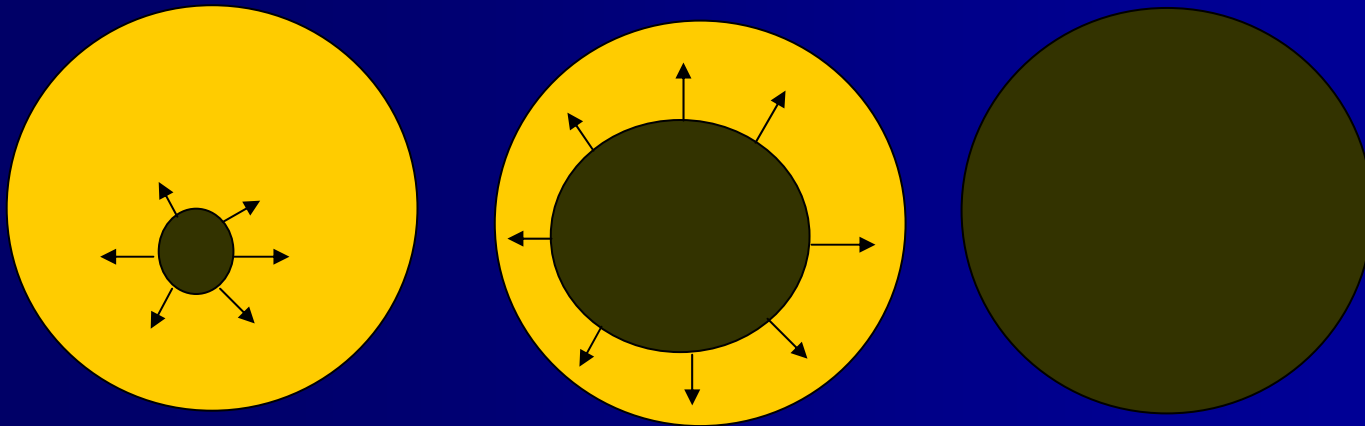
4

Синтезированы и апробированы новые составы катализаторов конверсии СО.

№ п/п	Марка Al-сплава	Удельная поверхность, м ² /г	T _{конверс.} , °C	Конверсия оксида углерода, %.
1.	Al (1)	8,71	490	50
2.	Al(2)	9,19	450	60
3.	Al(3)	7,60	430	97
4.	Al(4)	7,9	490	90
5.	Al(5)	0,17	420	100
6.	Al(6)	0,15	450	100

Самораспространяющийся синтез сложного оксида

Разработана и экспериментально проверена технология получения субмикронных (50-100 нм) оксидных материалов при пиролизе полимерно-солевых композитов. Метод направлен на получение нанометрических оксидов с повышенной реакционной способностью, позволяющей реализовать снижение температуры межфазных взаимодействий на 200-500°C, что позволяет сохранять высокую дисперсность целевых продуктов.



● - сложный оксид

● - сухой полимерно-солевой раствор

Интерметаллидная очистка от примесей

Экспериментально подтверждена модель взаимодействия активных присадок с микропримесями в матрице основного металла, позволяющая описать и регулировать процессы образования интерметаллических соединений в жидкометаллической среде. Выяснение механизма фазообразования позволит эффективно удалять интерметаллические соединения, либо переводить их в форму, обеспечивающую улучшение физико-механических свойств конечных материалов.

Малозатратный вариант блочной технологии

Завершена разработка блочной технологии комплексной переработки красного шлама глиноземного производства. Оптимизация технологии позволяет сократить срок окупаемости инвестиций до 1-1.5 лет, что повышает ее инвестиционную привлекательность и конкурентоспособность.