

УДК 544.2

Л. А. Шеповалова

Студент, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

научный руководитель – доктор физико-математических наук **Л.И. Квеглис**

Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

КЛАСТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ TiO₂+BeO КЕРАМИКИ И ИЗУЧЕНИЕ ЕЕ СВОЙСТВ

Сегодня очень активно развиваются исследования свойств оксидной керамики. Стоит отметить, что изделия из оксидной керамики находят чрезвычайно широкое и постоянно возрастающее практическое применение. Среди широко известных оксидных материалов: MgO, BeO, Al₂O₃, SiO₂, ZrO и другие. Следует особо выделить BeO-керамику, которая имеет в 3 раза большую теплопроводность чем MgO и в 4-6 раз большую, чем Al₂O₃-керамика.

Наиболее эффективным материалом, обладающим хорошей теплопроводностью и способностью поглощать микроволновое излучение, является BeO +30% массы TiO₂ (BT-30). Увеличение значения теплопроводности при условии сохранения поглощающих характеристик представляет большой интерес для электронной промышленности.

TiO₂ – полиморфен и встречается в трех основных кристаллических формах: анатаз (октаэдрит), брукит и рутил. Именно рутильную форму мы используем в данной работе.

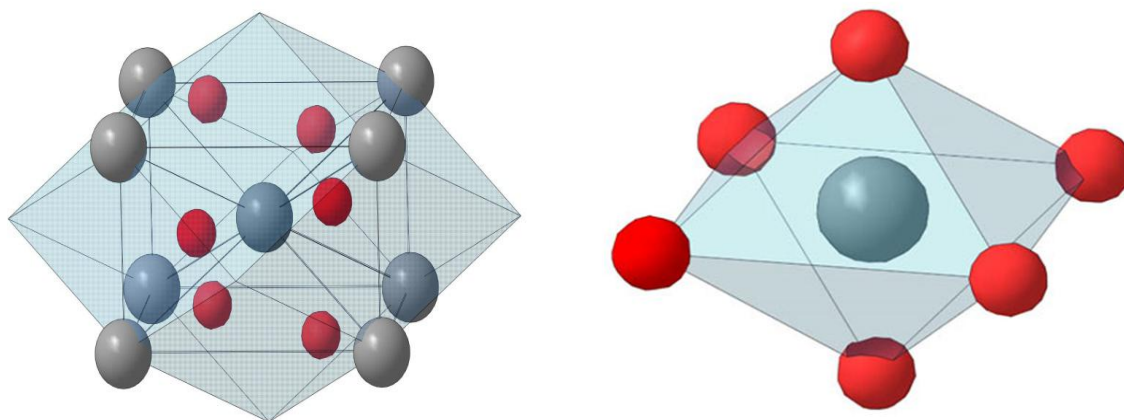


Рис.1 Кластерная модель TiO₂

На рисунке 1 изображена кластерная структура TiO₂, построенная на основе расшифровки спектра рентгеновской дифракции, экспериментально полученном при исследовании продуктов спекания с BeO. Атомы титана покрашены в серый цвет, кислорода в красный. Видно, что в состав кристаллической решётки входит кислородный октаэдр, внутри которого находится атом титана.

В экспериментах, на которые мы опирались, рутильная форма оксида титана была заменена на нано-порошок.

Известно, что электропроводность икосаэдрической фазы может иметь электронную природу. Можно предположить, что повышение электропроводности, обнаруженное в эксперименте при спекании нанопорошка TiO_2 , порошка рутила и порошка оксида бериллия, © Шеповалова Л.А., 2019

связано с формированием икосаэдрической фазы в нанопорошке TiO_2 и далее в структуре перовскита, где 12-вершинник заменяется на икосаэдр. В нашем эксперименте добавление нанопорошка TiO_2 в состав BeO -керамики существенно изменило проводящие и другие свойства BeO -керамики.

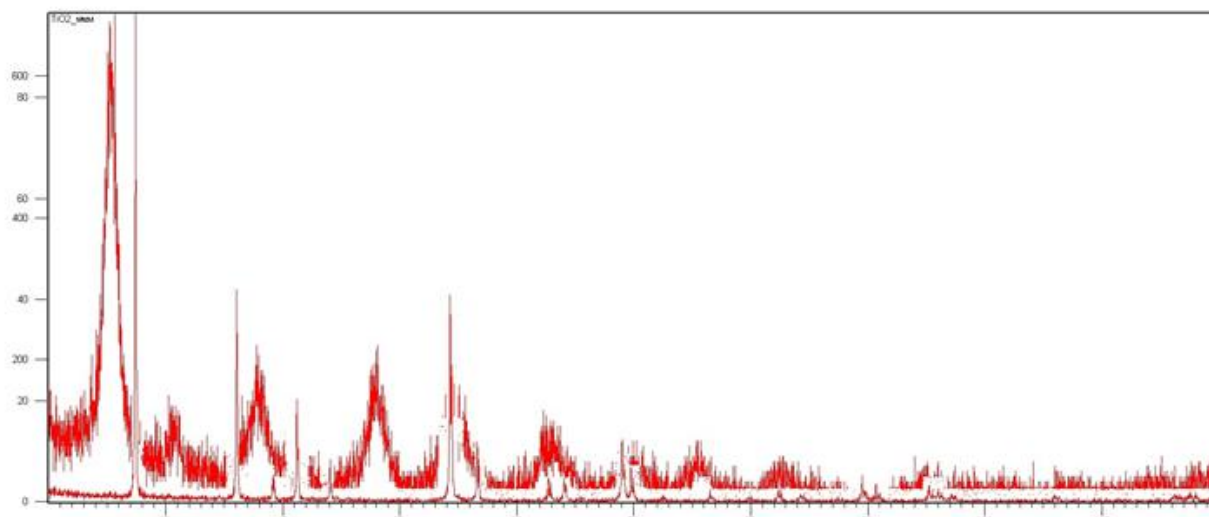


Рис. 2 Рентгенограммы BeTiO

Икосаэдрическая фаза образуется в нанопорошке двуокиси титана и отличается от структуры рутила наличием тетраэдров вместо октаэдров. Из тетраэдров и формируется икосаэдрическая структура в первой координационной сфере, о чем свидетельствует смещение первой линии на картине рентгеновской дифракции.

Вторая линия на рентгеновской дифракции смещена в сторону уменьшения параметра решетки - первая и вторая смещены в разные стороны. Это свидетельствует, о значительном изменении ближнего порядка в расположении атомов. Третья и четвертая линии не смещены - значит дальний порядок не изменился, а значит электропроводность стала не ионной а электронной, что и обнаружено в эксперименте - проводимость бериллиевого перовскита больше $1 \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$

Можно предположить, что повышение электропроводности, обнаруженное в эксперименте при спекании нанопорошка TiO_2 , порошка рутила и порошка оксида бериллия, связано с формированием икосаэдрической фазы в нанопорошке TiO_2 и далее в структуре перовскита, где 12-вершинник заменяется на икосаэдр. В нашем эксперименте добавление нанопорошка TiO_2 в состав BeO -керамики существенно изменило проводящие и другие свойства BeO -керамики.

Изображения Be -керамики под микроскопом. Изображение в точном фокусе, нижние изображения это снимки в пере-фокусе или недо-фокусе. Видны концентрические окружности, что показывает магнитный контраст.

Структура TiO_2 состоит из плотно-упакованных октаэдров. Понижение симметрии кристаллической решетки, а также хаотичное расположение кластеров в кристалле приводит к появлению некомпенсированного магнитного момента и появлению ферромагнетизма. То

есть плотность электронов в такой структуре очень высока на уровне Ферми. Этот факт может объяснить высокую электропроводность фаз с икосаэдрической структурой.

Это позволяет широко применять ВеО керамику в электронной промышленности. Высокая теплопроводность, малая величина диэлектрических потерь, высокая электрическая прочность, высокая стабильность электрофизических свойств позволяют использовать ВеО-керамику в высокочастотных электронных схемах.

© Шеповалова Л.А., 2019

1. Обнаружено появление ферромагнетизма и уменьшение электросопротивления в 1000 раз в образцах керамики, отожженных при 1800 градусов Цельсия.

2. Высокая плотность электронных состояний на уровне Ферми является причиной появления ферромагнетизма, такая плотность возможна в икосаэдрической фазе.

3. Понижение симметрии кристаллической решетки, а также хаотичное расположение кластеров в кристалле приводит к появлению некомпенсированного магнитного момента и появлению ферромагнетизма.

4. Предложены кластерные модели, построенные в графическом редакторе КОМПАС 3D, для описания структуры TiO₂ в массивном состоянии. Кластерные 3d модели используются для объяснения кристаллических преобразований.

Список использованных источников

1. Кийко В.С., Горбунова М.А., Макурин Ю.Н. и др. Микроструктура и электропроводность композиционной (ВеО+TiO₂)-керамики, *Новые огнеупоры*, 2007, 11, 68-74.

2. Бетехтин А.Г. *Минералогия* — М.: Государственное издательство геологической литературы, 1950. 956 с.

3. Некрасов Б. В. *Основы общей химии*. Т. I. — Изд. 3-е, испр. и доп. М.: Химия, 1973. — С. 644, 648.

4. *Химическая энциклопедия* (электронная версия). — С. 593, 594

5. *Химия: Справ.изд.* / В. Шретер, К.-Х. Лаутеншлегер, Х. Бибрак и др.: Пер. с нем. 2-е изд., стереотип. — М.: Химия, 2000. С. 411.

6. Ч.Пул-мл., Ф. Оуэнс , *Мир материалов и технологий*. 4-е издание ,исправленное и дополненное, издательство Техносфера Москва,2009.336 с.

© Шеповалова Л.А., 2019