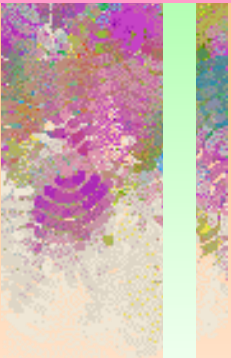


ВОДА В Ta_2O_5 и КОЭСИТЕ SiO_2

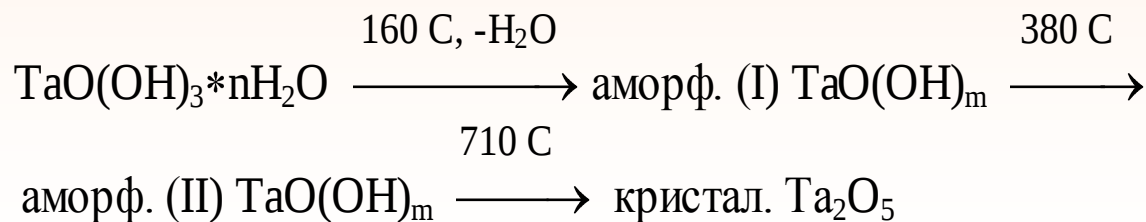
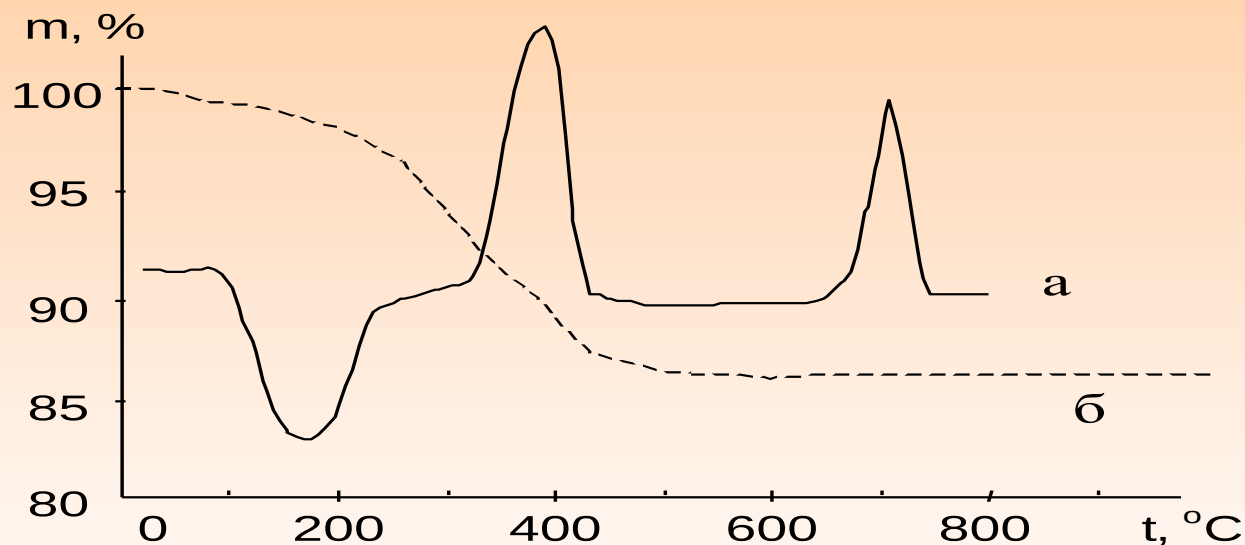


И.П.ЗИБРОВ^{1,2}, В.П.ФИЛОНЕНКО²

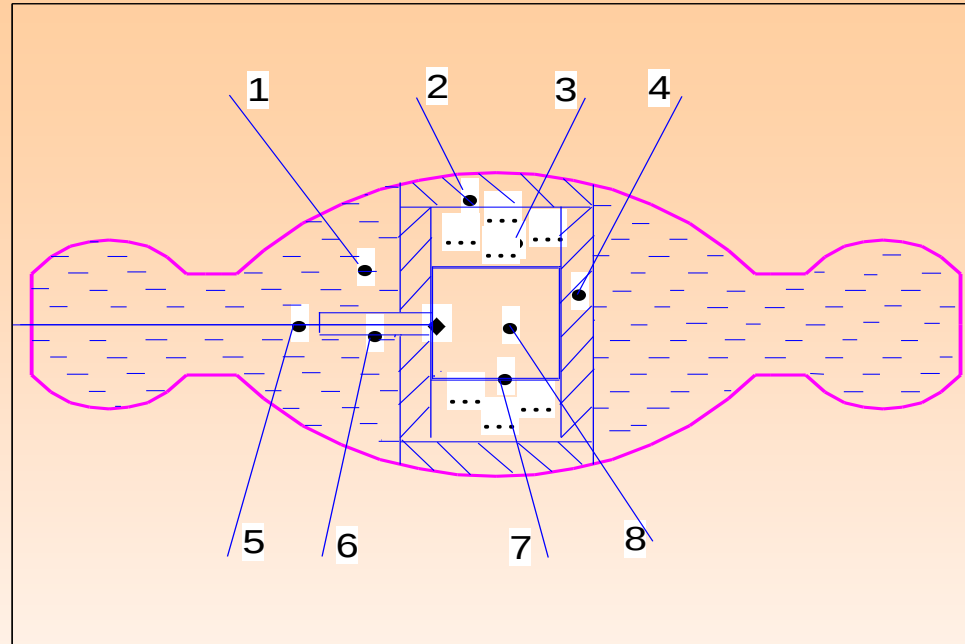
¹⁾Институт кристаллографии РАН, Москва

*²⁾Институт физики высоких давлений РАН,
Троицк Московской обл.*

ПОЛУЧЕНИЕ ИСХОДНОГО АМОРФНОГО МАТЕРИАЛА



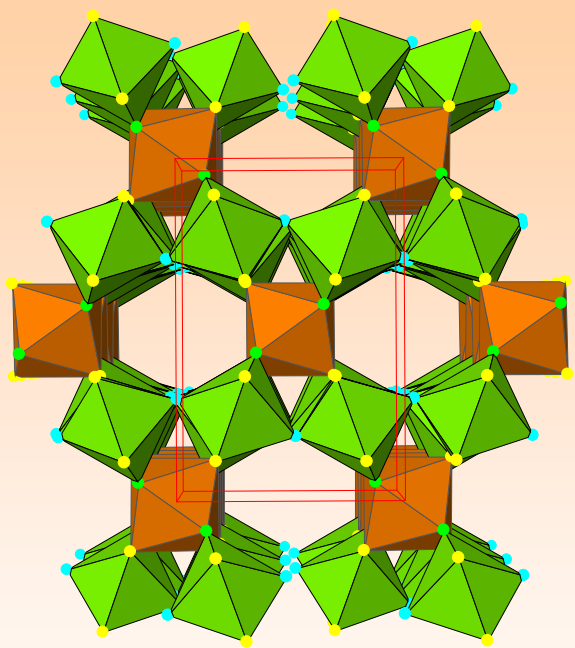
High-pressure toroid-type cell



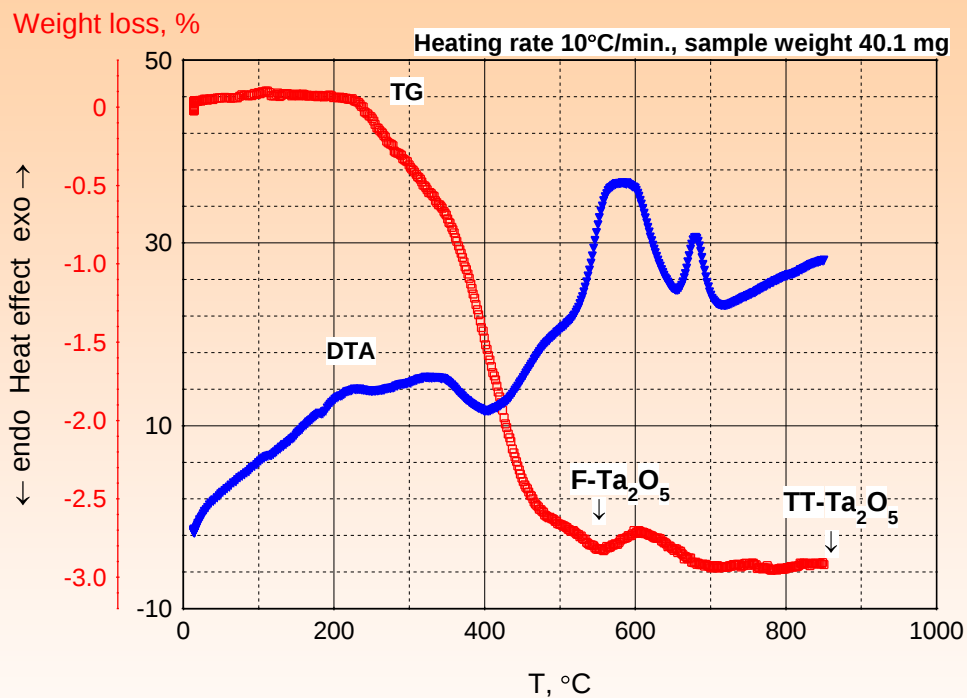
- 1 - limestone container, 2- graphitic caps, 3- BNg pellets,
4 – graphitic heater, 5 – thermocouple, 6 – Al_2O_3 tube,
7 – tungsten foil, 8 - sample

Высокотемпературная фаза F-Ta₂O₅•2/3H₂O

(P=5.0-8.0 GPa, T=1000-1100 C)

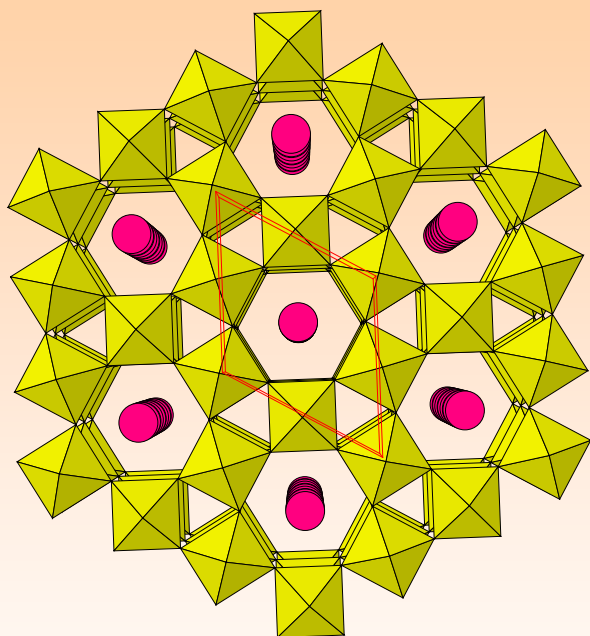


$$a=10.9039 \text{ \AA}, b=7.2774 \text{ \AA}, \\ c=6.8529 \text{ \AA}$$

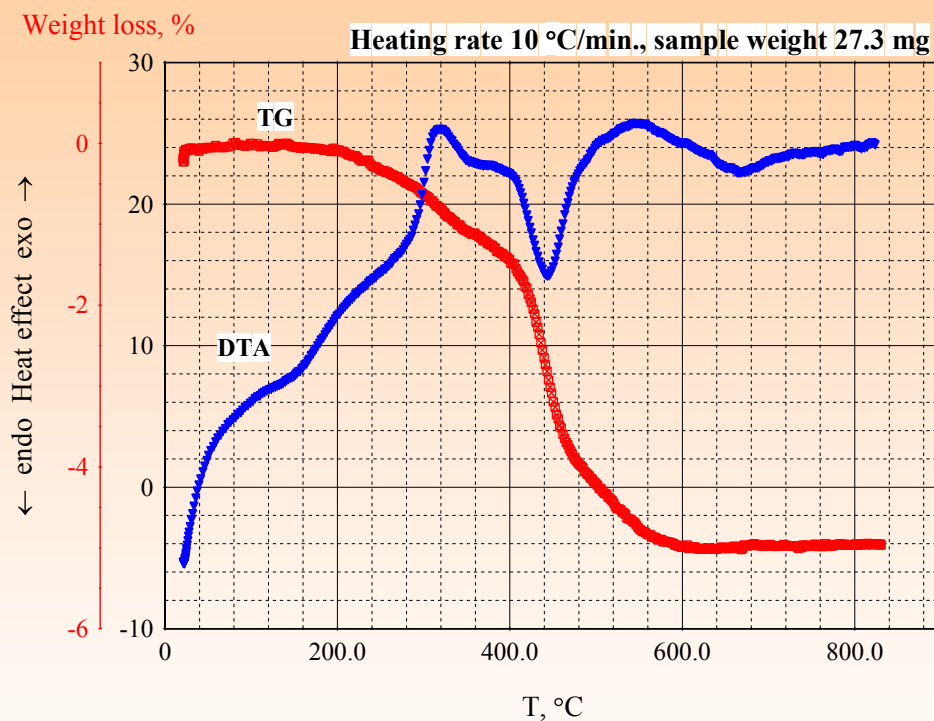


Среднетемпературная фаза $\text{Ta}_2\text{O}_5 \cdot x\text{H}_2\text{O}$

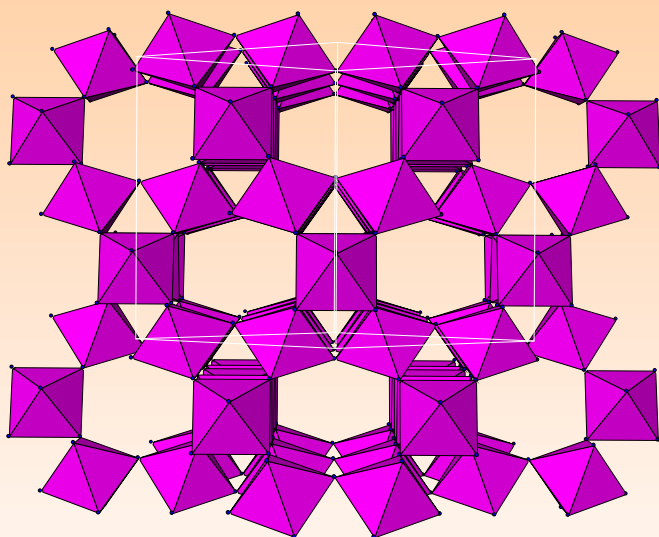
($P=5.0-8.0$ GPa, $T=800-900$ C)



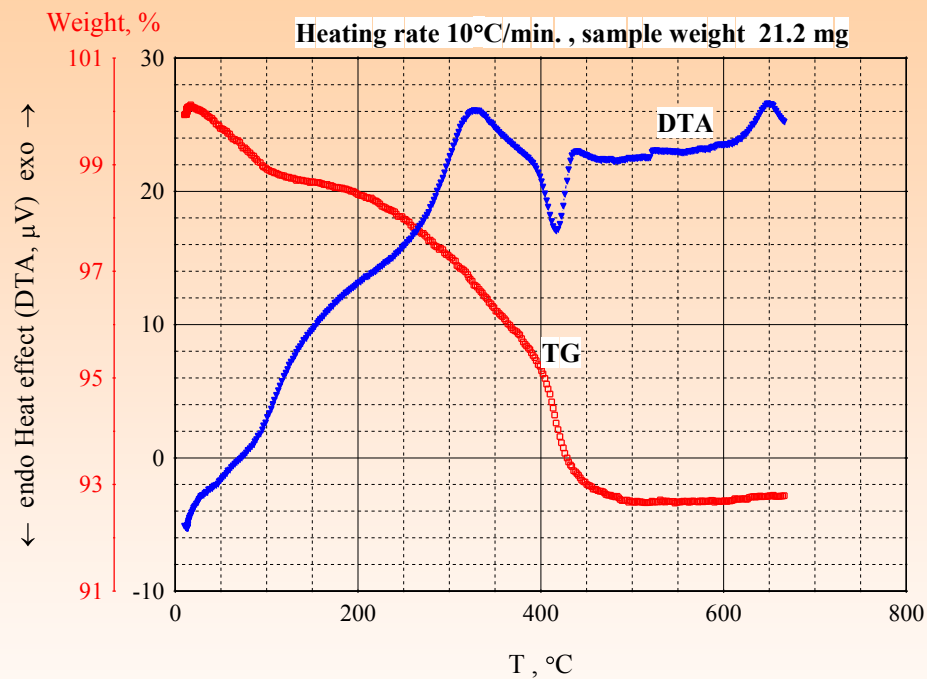
$$a=7.50 \text{ \AA}, c=7.65 \text{ \AA}$$



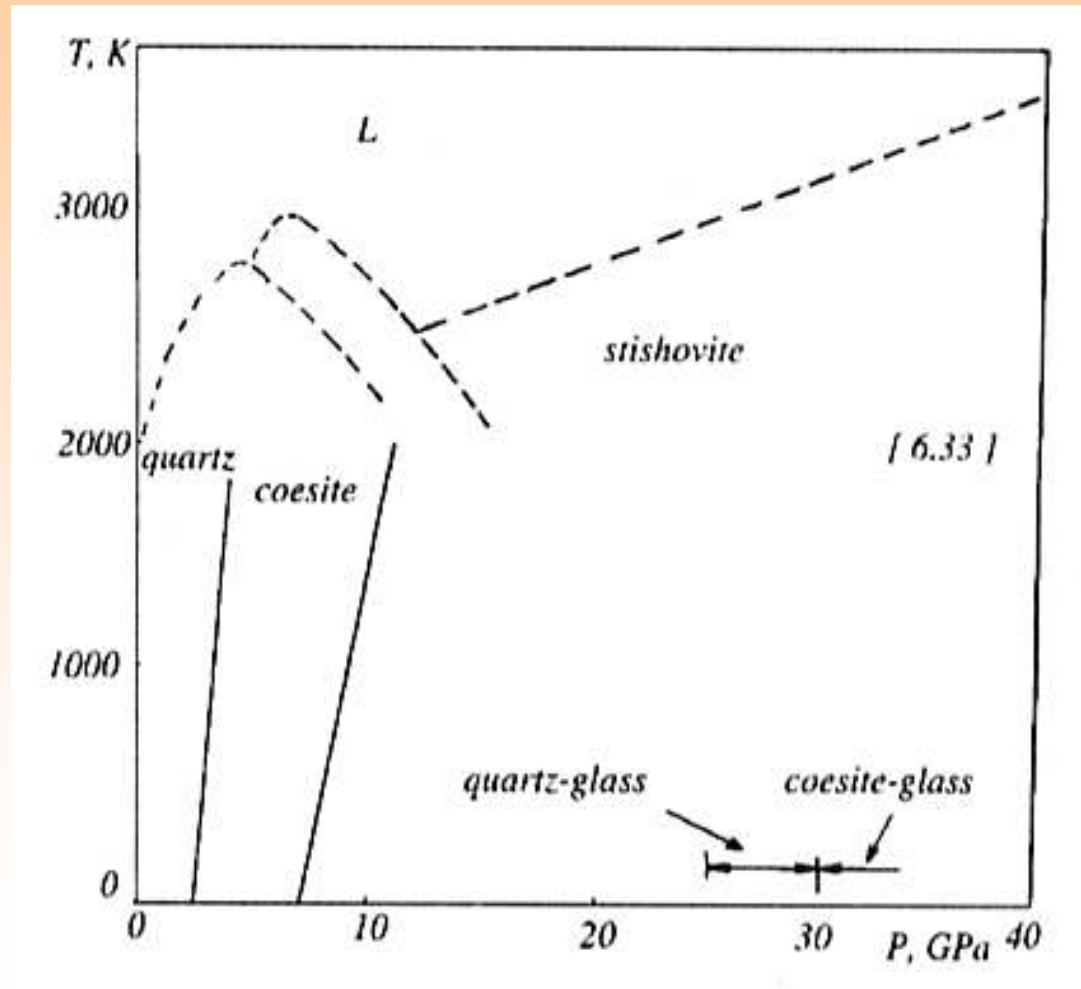
Низкотемпературная фаза $\text{H}_2\text{Ta}_2\text{O}_6 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ($P=5.0\text{-}8.0\text{ GPa}$, $T=600\text{-}700\text{ C}$)



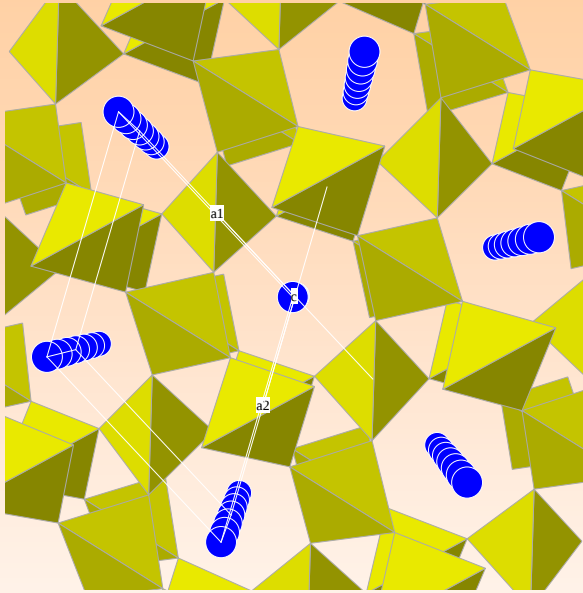
$$a=10.6004 \text{ \AA} \quad [110]$$



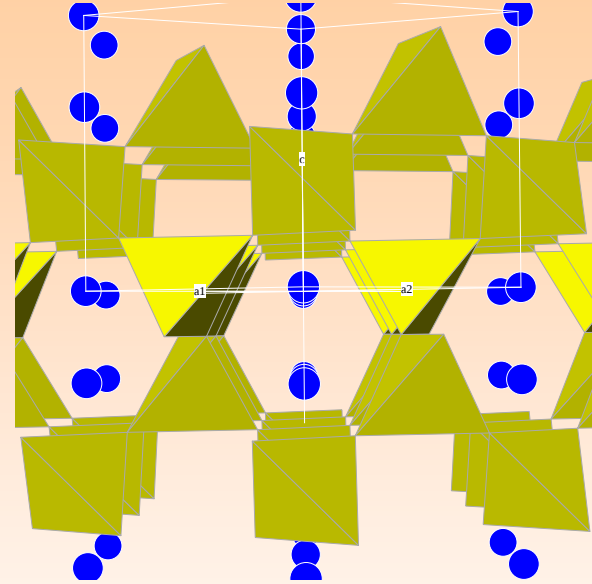
Р-Т фазовая диаграмма SiO_2



Структура кварца



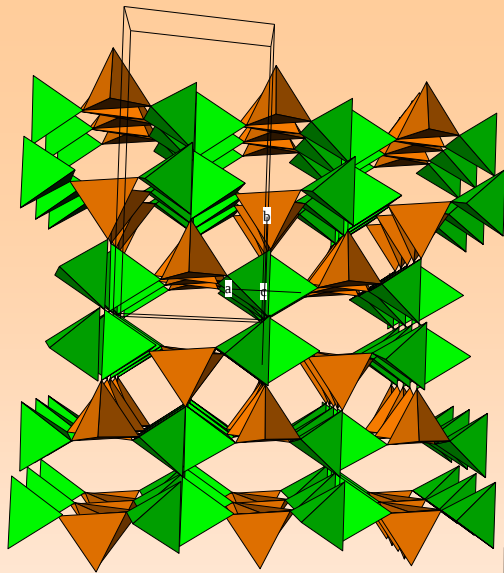
[001]



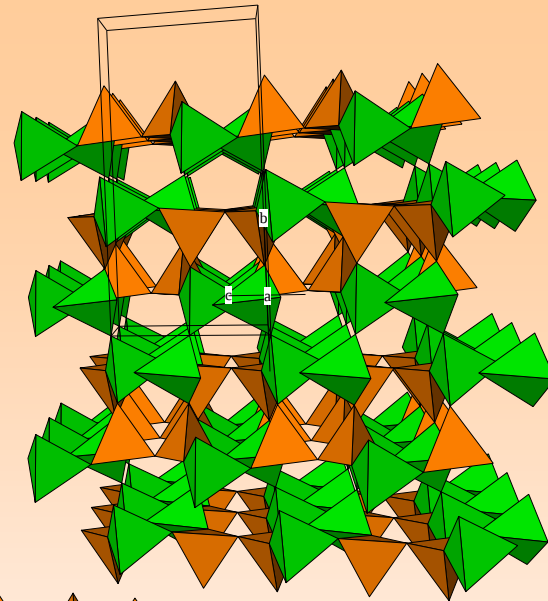
[110]

$a = 4.9149 \text{ \AA}$, $c = 5.4059 \text{ \AA}$

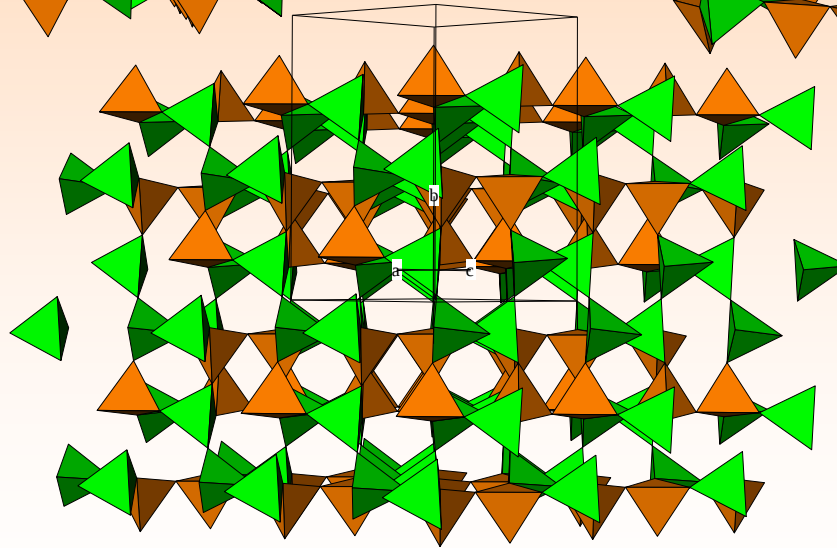
СТРУКТУРА КОЭСИТА



[001]



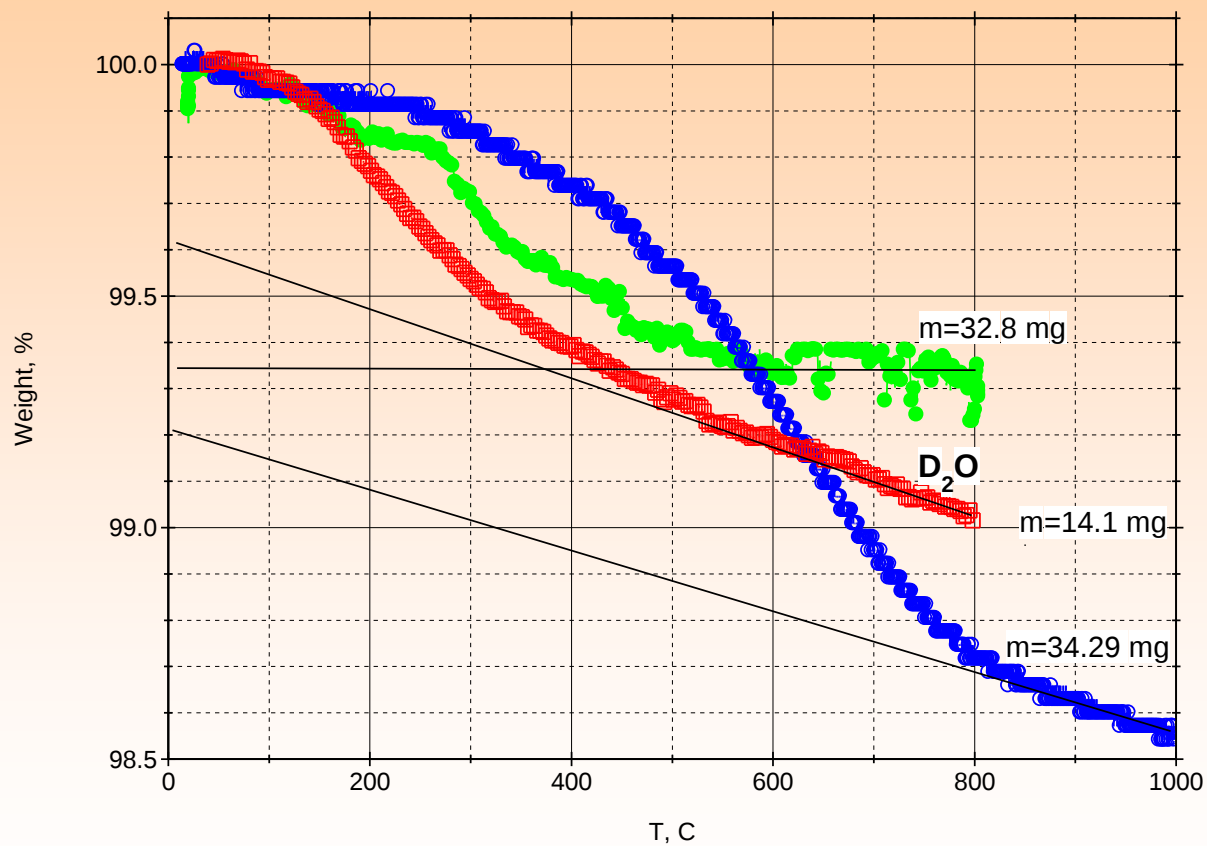
[100]



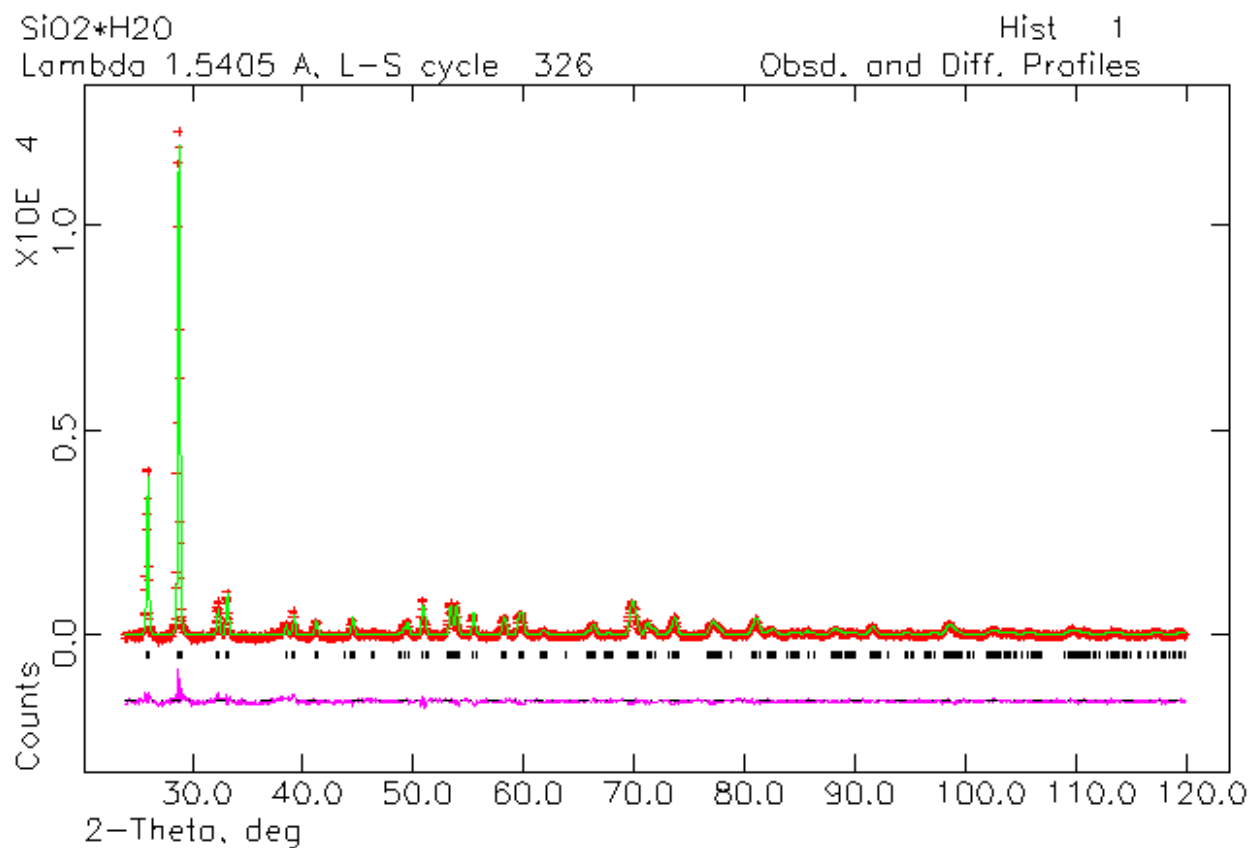
[101]

$$a = 7.1364(2) \text{ \AA} , b = 12.3805(3) \text{ \AA} , c = 7.1774(2) \text{ \AA} , \beta = 120.325(1)^\circ$$

Термогравиметрический анализ $\text{SiO}_2 \cdot \text{H}(\text{D})_2\text{O}$



Результаты полнопрофильного анализа



Результаты уточнения структуры

	SiO ₂ + H ₂ O	SiO ₂ -после TG
a, Å	7.1365(1)	7.1369(3)
b, Å	12.3808(2)	12.3773(4)
c, Å	7.1775(1)	7.1748(2)
β, °	120.325(1)	120.318(2)
V, Å ³	547.40(1)	547.12(2)
R _F	0.0608	0.0560
d-Durbin-Watson	0.759	0.983

Условия синтеза и объемы элементарных ячеек коэсита

	P, GPa	T, C	τ , min.	V, Å ³
SiO ₂ + H ₂ O	6.0	700	3	547.40(1)
SiO ₂				547.12(2)
SiO ₂ + H ₂ O	6.5	700	3	547.92(5)
SiO ₂				547.89(6)
SiO ₂ + D ₂ O	5.0	900	3	546.55(3)
SiO ₂				547.29(1)

В Ы В О Д Ы

- Показано, что термобарическая обработка маловодного аморфного пентаоксида тантала приводит к кристаллизации трех различных гидратных соединений в зависимости от условий обработки.
- По результатам термогравиметрии образцов коэсита, полученного термобарической обработкой аморфного SiO_2 с водой, показана возможность присутствия воды в его структуре.



**СПАСИБО
ЗА ВНИМАНИЕ**