

Изучение термоллиза комплексных пивалатов методами ДСК и ТГ

Грошева Анна Александровна

Студентка 4 курса

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова,

Факультет Наук о Материалах, г. Москва, Россия

[*grosheva@td.chem.msu.ru*](mailto:grosheva@td.chem.msu.ru)

Оксидные материалы на основе d- и f-элементов широко применяются в электронной технике. Практический интерес представляет получение тонких (~мкм) пленок таких материалов из комплексов металлов с органическими кислотами (МОС). Особенно перспективными прекурсорами являются гетероядерные комплексы, в которых мольное соотношение металлов соответствует составу соответствующего сложного оксида. Эмпирический подбор оптимальных условий синтеза требует больших трудозатрат. Экономически более выгодным является расчетно-теоретический путь, основным этапом которого является построение физико-химической модели термоллиза МОС.

В этой связи в настоящей работе были определены следующие цели:

- 1) изучение термоллиза МОС методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и термогравиметрии (ТГ);
- 2) оценка возможности разработки физико-химической модели процесса термоллиза на базе полученных и литературных данных;
- 3) создание такой модели и оптимизация с ее помощью условий синтеза сложных оксидов из изученных гетероядерных комплексов.

В данной работе в качестве объектов исследования использовались полиядерные комплексы ряда редкоземельных металлов и кобальта и никеля с анионами пивалиновой кислоты.

К настоящему времени методами ДСК, ТГ, РФА получены экспериментальные данные по термодеструкции комплексных пивалатов Sm, Gd, Fe и их смесей, а также некоторых гетероядерных пивалатов РЗЭ – Co, РЗЭ – Ni, Sm – Mn. Предложены наиболее вероятные схемы термоллиза изученных комплексов. Показана принципиальная возможность получения смешанных оксидов как из гетерогенных смесей гомоядерных комплексов, так и из гетероядерных комплексов. Изучено влияние механоактивации реагентов на состав и качество продуктов термоллиза.

Построение физико-химической модели термоллиза включает в себя определение термодинамических и кинетических параметров реакции.

К настоящему времени отработана методика определения энтальпии реакций разложения, протекающих с образованием твердой и газовой фаз, из данных ДСК. Получены предварительные результаты по низкотемпературной теплоемкости некоторых исследуемых комплексов. Из этих данных предполагается оценить их энтропию.

Отработана методика определения кинетической модели и ее параметров и оценена возможность оптимизации условий проведения реакций, протекающих с образованием газовой и кристаллической фаз. Достоверность полученной модели определена путем сопоставления расчетов и экспериментальных данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-03-08203, Программы Президиума РАН «Разработка методов получения химических веществ и создание новых материалов».)