

Рентгенофазовая диагностика соединений, полученных в гидротермальных условиях в комплексных системах и кристаллическая структура нового силиката-германата свинца и цезия.

Научный руководитель – Белоконева Елена Леонидовна

Морозов Иван Аркадьевич

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: ivan.morozov@yandex.ru

Интерес к синтезу новых неорганических соединений в гидротермальных условиях определяется тем, что среди них могут быть получены кристаллы с пиро-, сегнето-, нелинейно-оптическими и пьезоэлектрическими свойствами. К настоящему времени накоплен большой материал по достаточно простым системам, и ведется поиск в системах комплексных, содержащих многие компоненты. Подобные условия приближены к природным.

Была проведена отборка и анализ 22-х опытов, в которых морфологически и рентгенографически диагностирован ряд фаз силикатов, германатов, боратов, карбонатов и других соединений. Диагностика выполнена методом рентгенофазового анализа, определением параметров ячеек кристаллов, а также установлением их составов на микрозондовом комплексе на базе растрового электронного микроскопа Jeol JSM-6480LV. Помимо многих ранее известных, была выделена перспективная для изучения фаза силиката-германата свинца с параметрами, которых не было в базах данных [1]. Получение экспериментального материала с отобранного монокристалла проводилось на дифрактометре XCalibur. Обработка данных с помощью программы CrysAlis показала, что структура гексагональная с параметрами решетки: $a=5.8175(2)$, $c=8.4019(4)$, пр. группа $P-3$. Расшифровка структуры проводилась в комплексе SHELX прямыми методами. Была найдена основная часть модели по тяжелым атомам, дополненная до заключительной атомами О. Заключительная формула определена в процессе расшифровки как $Cs_2Pb_2[(Ge_{0.4}Si_{0.6})_2O_7]$. В структуре содержатся тетраэдрические диорто-группы, в которых в тетраэдре изоморфно представлены атомы Si и Ge. Крупные ионы Cs и Pb находятся на тройных осях в каналах структуры между диортогруппами. Наиболее интересным является совместное заполнение тетраэдрической позиции двумя сортами атомов, а также зонтичная координация атомов Pb лишь тремя атомами О. Зонтичная координация Pb четырьмя атомами О известна в минерале литаргите PbO, а наиболее типичны для Pb в исследованных соединениях высокие координационные числа (7-9), в то время, как в данной структуре это три атома.

Источники и литература

- 1) Inorganic Crystal Structure Data Base – ICSD. Fachinformationzentrum (FIZ) Karlsruhe. 2011. I version.