

Ашбуртонит: гидротермальный синтез и кристаллохимия синтетического аналога минерала

Манохина Елизавета Алексеевна

Студент (бакалавр)

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

E-mail: li.manohina@yandex.ru

В поисках новых низкоразмерных магнетиков наше внимание привлекла кристаллическая структура минерала ашбуртонита $\text{HPb}_4\text{Cu}_4\text{Si}_4\text{O}_{12}(\text{HCO}_3)_4(\text{OH})_4\text{Cl}$ [1]. В его кристаллической структуре искаженные медь-кислородные октаэдры связываются ребрами и образуют цепочки, вытянутые вдоль оси *c*. Такие структурные фрагменты могут быть источником нетривиального магнитного поведения. С использованием данных о минеральных ассоциациях, был поставлен ряд экспериментов по гидротермальному синтезу с целью получения синтетического аналога ашбуртонита для уточнения его кристаллической структуры и изучения магнитных свойств.

Удлиненно-призматические бирюзово-голубые кристаллы синтетического аналога ашбуртонита были получены при температуре 210°C из смеси химически чистых реактивов: 2.43 гр. $\text{Pb}(\text{OH})_2$, 0.5 гр. $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, 0.3 гр. K_2CO_3 , 0.1 гр. Na_2SiO_3 . Смесь тщательно перетирали, засыпали в тефлоновый стакан и заливали дистиллированной водой, с последующей герметизацией в стальном автоклаве. Продолжительность синтеза - 14 дней.

Для монокристалльных исследований был отобран кристалл размером 0.11×0.08×0.03 мм. Экспериментальный набор интенсивностей дифракционных отражений получен на дифрактометре Bruker D8 Quest с детектором Photon III (MoK излучение, $\lambda = 0.71073$) при температуре 100 К. Кристаллическая структура уточнена ($R_1 = 3.3$) с помощью программного комплекса SHELX. По данным уточнения синтетический аналог характеризуется чуть меньшими параметрами тетрагональной элементарной ячейки $a = b = 14.1594(7)$ Å, $c = 6.0504(4)$ Å, $V = 1213(1)$ Å³, $Z = 2$ по сравнению с природной фазой $a = b = 14.234(7)$ Å, $c = 6.103(4)$ Å, $V = 1236(1)$ Å³[1]. Авторами работы по не исключалась возможность кристаллизации ашбуртонита в ацентричной пространственной группе I . Такая модель проверялась и в нашем случае, однако она оказалась не состоятельной ввиду уточняемых отрицательных значений полуосей тепловых эллипсоидов в анизотропном приближении для большинства атомов. Низкотемпературный рентгеновский эксперимент позволил локализовать два атома водорода на основе анализа разностного синтеза Фурье.

На основании полученных в ходе исследований данных кристаллохимическая формула синтетического ашбуртонита записывается, как $\text{Pb}_4\text{Cu}_4\text{Si}_4\text{O}_{12}(\text{HCO}_3)_4(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})\text{Cl}$.

Источники и литература

- 1) Grice J., Nickel H.E., Gault A.R.// American Mineralogist 76 (1991) 1701-1707.