

**Гидротермальная кристаллизация йодатов и кристаллическая структура
нового триклинного йодата свинца и бария**

Научный руководитель – Димитрова Ольга Владимировна

Реутова Ольга Валерьевна

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический
факультет, Москва, Россия

E-mail: reutova.olia@yandex.ru

Йодаты в настоящее время представляют интерес для науки благодаря наличию в их структурах зонтичных и пирамидальных группировок $[\text{IO}_3]^-$, обуславливающих возможность проявления нелинейно-оптических, пьезо- и пьезоэлектрических свойств [1]. Одним из основных методов получения новых йодатов является метод гидротермального синтеза, использованный в работе. Синтез производился в сложных многокомпонентных системах.

Полученные в результате гидротермального синтеза кристаллы исследовались методами рентгеноструктурного и микрорентгеноспектрального анализа. Удалось определить среди них аналоги природных минералов аламосита PbSiO_3 и хиератита $\text{K}_2[\text{SiF}_6]$, фосфат лития Li_3PO_4 , иодиды AgI и CsPbI_3 , карбонат иттербия $\text{Yb}_2\text{CO}_3\text{OH}_4$ и ряд йодатов: $\text{Pb}(\text{IO}_3)_2$, новый представитель семейства тригональных йодатов с группой R-3, а также новый триклинный йодат с катионами бария и свинца $(\text{Ba}, \text{Pb})[\text{IO}_3]_2$, послуживший объектом дальнейших исследований.

Экспериментальные данные для нового соединения были получены на монокристалле на дифрактометре XCalibur. Параметры его ячейки $a=7.01 \text{ \AA}$, $b=7.15 \text{ \AA}$, $c=13.401 \text{ \AA}$, $\alpha=85^\circ$, $\beta=85^\circ$, $\gamma=64^\circ$ близки к значениям параметров элементарной ячейки триклинной модификации йодата стронция $\text{Sr}(\text{IO}_3)_2$ [1]. Это позволило взять за основу структурную модель $\text{Sr}(\text{IO}_3)_2$ и провести уточнение координат атомов Ba с заданием их в две независимые позиции Sr1, Sr2, в то время как атомы I и O занимали аналогичные позиции. Расчёты производились в программе SHELX. Несмотря на явное сходство фаз, был получен достаточно высокий фактор расходимости, после чего был выполнен анализ обратной решётки кристалла и выявлено двойникование. Массив данных был разделён на два подмассива, объединённых в один файл. В ходе нескольких циклов уточнения с учётом двойникования был получен удовлетворительный результат. На основе тепловых поправок были исследованы изоморфные замещения Ba и Pb с различным заполнением двух позиций. В итоге получен фактор расходимости $R=0.0613$ (двойниковая компонента составила 0.46) и подтверждено структурное сходство нового йодата со $\text{Sr}(\text{IO}_3)_2$.

В структуре $(\text{Pb}_{0.6}\text{Ba}_{0.4})(\text{Pb}_{0.4}\text{Ba}_{0.6})[\text{IO}_3]_4$ имеются традиционные зонтичные $[\text{IO}_3]^-$ группировки, атомы бария и свинца заполняют изоморфно две позиции, но в различных соотношениях. Обе позиции координированы атомами O, образующими крупные девятивершинники.

Автор выражает благодарность Зубковой Н.В. за помощь в получении экспериментальных данных и введение поправки на двойникование, а также своим научным руководителям Белоконовой Е.Л. и Димитровой О.В.

Источники и литература

- 1) Xuean Chen, Weiqiang Xiao, Xinan Chang, Hegui Zang. Hydrothermal synthesis and crystal structure of strontium iodate, $\text{Sr}(\text{IO}_3)_2$ // Journal of Alloys and Compounds. 2004, Vol.381. p.229-233.