

Кристаллические структуры новых йодатов, полученных в гидротермальных условиях

Карамышева Алина Сергеевна

Студент (бакалавр)

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

E-mail: Karamelka-9494@mail.ru

- В кристаллической структуре йодатов на кратчайшем расстоянии от атома йода находятся три атома кислорода в треугольной зонтичной координации, что позволяет разместить неподеленные электронные пары йода в четвертой вершине псевдотетраэдра (по другую сторону), т.е. создать полярное расположение электронной плотности. Это определяет интерес к синтезу йодатов, среди которых могут быть получены кристаллы с пиро-, сегнето-, нелинейно-оптическими и пьезоэлектрическими свойствами [1].
- Была проведена отборка и анализ 30-ти опытов, в которых морфологически и рентгенографически диагностирован ряд фаз йодатов и других соединений. Также был проведен кристаллохимический анализ строения йодатов на примере известных ранее и исследованных в самое последнее время структур. Помимо ранее известных, была выделена перспективная для изучения структура нового йодата, обладавшего близкими к кубическим параметрами, которых не было в базах данных. Исследование состава на микронзондовом комплексе на базе растрового электронного микроскопа Jeol JSM-6480LV показало присутствие атомов Bi, Ag и I. Получение экспериментального материала с отобранного монокристалла проводилось на дифрактометре XCalibur. Анализ сходимости эквивалентных отражений с помощью программы CrysAlis показал ее истинную моноклинную симметрию с выбором осей из псевдокубической с параметрами решетки: $a=15.5216(4)$, $b=21.9489(3)$, $c=13.4422(4)$, $\beta=125.267(4)$. Расшифровка структуры проводилась в комплексе SHELX в группе симметрии Cs прямыми методами. Была найдена основная часть модели, дополненная до заключительной атомами O с использованием зонтичной координации атомов I. Заключительная формула определена в процессе расшифровки как $Bi_3[IO_3]_{12}Ag_4I$. В структуре содержится группы IO_3 , крупные Bi-полиэдры и кластер серебра с йодом заполняющий канал структуры. Соединение обладает нелинейными свойствами. Установлен Tb-аналог и ведется анализ соотношения структура-свойства в данном полярном кристалле [2].

Источники и литература

- 1) D.Phanon, Y.Suffren, M.B.Taouti, D. Benbortal, A.Brenier, I.Gautier-Luneau, Journ of Material Chemistry, C, 2014. V.2. P. 2715.
- 2) K.M.Ok, P.S.Halasyamani, Angew. Chem. Int. Ed. 2004, V.43. p.5489.

Слова благодарности

Выражаю благодарность своему научному руководителю за помощь во всех начинаниях