

Новые фазы в системах Cs-(Cu, Mn)-V(P)-B-O: синтез и характеристика.**Научный руководитель – Шванская Лариса Викторовна****Сапегина Анна Валерьевна***Студент (бакалавр)*

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

E-mail: ann-sapegina@yandex.ru

Актуальным направлением современной науки остается получение новых соединений, изучение их кристаллохимических особенностей и физических свойств с целью выявления технологически перспективных материалов. Среди них потенциально важными для применения в таких областях, как катализ, сорбция, нелинейная оптика и др. являются сложные соединения: ванадил- и борофосфаты. Одним из возможных методов их получения является раствор-расплавный синтез в присутствии H_3BO_3 . Низкая температура плавления борной кислоты - 170.9°C позволяет получать соединения, которые невозможно наблюдать при высоких температурах вследствие их разложения.

При исследовании фазообразования в системе Cs-Cu-P-B-O (мольное соотношение исходных компонентов $\text{H}_3\text{BO}_3:\text{CsH}_2\text{PO}_4:\text{CuO}=10:1:2$) из раствор-расплава борной кислоты при температуре 180°C были получены бесцветные, прозрачные, пластинчатые кристаллы нового соединения состава $\text{CsV}_5\text{O}_7(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$, являющегося аналогом рубидиевого пентабората [1], кристаллическая структура которого связана со структурой минерала лардереллита $(\text{NH}_4)\text{V}_5\text{O}_7(\text{OH})_2\cdot\text{H}_2\text{O}$. Цезиевый пентаборат кристаллизуется в пространственной группе *P-1* с параметрами элементарной ячейки: $a=7.807(7)\text{\AA}$, $b=9.182(9)$, $c=12.353(1)\text{\AA}$, $\alpha=98.89(8)$, $\beta=106.51(8)$, $\gamma=90.85(8)$, $V=837.1\text{\AA}^3$.

В системе с ванадием ($\text{H}_3\text{BO}_3 - \text{CsH}_2\text{PO}_4 - \text{MnCl}_2 - \text{V}_2\text{O}_5$, взятых в мольных соотношениях 10:5:2:2, соответственно) при температуре 200°C синтезирован новый ванадил-фосфат цезия. Пластинчатые, темно-зеленые кристаллы тетрагонального габитуса характеризуются ромбической симметрией с параметрами элементарной ячейки: $a=6.2508$, $b=15.6683$ и $c=6.2509\text{\AA}$, $V=612.21(7)\text{\AA}^3$, и не имеют аналогов в структурной базе данных ICSD. Получена модель кристаллической структуры: тетраэдры PO_4 и октаэдры VO_6 , связанные вершинами, формируют слои, объединяющиеся в каркас посредством фосфорных тетраэдров. Пустоты каркаса заняты атомами цезия. Подобный мотив наблюдался ранее в кристаллической структуре ванадил-фосфата гуанидиния $(\text{CN}_3\text{H}_6)_2(\text{VO}_2)_3(\text{PO}_4)(\text{HPO}_4)$ [2]. Изучение подобных ванадил-фосфатов интересно вследствие их ярко выраженных ионообменных и абсорбционных свойств. Кроме того, присутствие в их составе ионов ванадия (в степени окисления +4) и катионов других переходных металлов может отвечать за наличие магнитного упорядочения.

Источники и литература

- 1) Belokoneva E., Borisova T.A., Dimitrova O.V. New rubidiumpentaborate $\text{Rb}[\text{B}_5\text{O}_7(\text{OH})_2] \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ with a $5:[4\delta+1t]$ anionic block and its relation to larderellite $(\text{NH}_4)[\text{B}_5\text{O}_7(\text{OH})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ on the basis of the OD theory // Crystallography Reports. — 2003. — Vol. 48, no. 4. — P. 583–590.
- 2) Zsolt Bircsak, William T. A. Harrison. $(\text{CN}_3\text{H}_6)(\text{VO}_2)_3(\text{PO}_4)(\text{HPO}_4)$, a Layered Guanidinium Vanadium(V) Phosphate Related to Hexagonal Tungsten Oxide // Inorg. Chem. 1998. - V. 37. - P. 3204-3208.