

Теоретический расчет параметров элементарных ячеек редкоземельных гранатов

Научный руководитель – Никольский Максимилиан Сергеевич

Товстопят София Владимировна

Студент (бакалавр)

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

E-mail: tovstopyat.sofiya@mail.ru

Изучение зависимости параметров элементарной ячейки соединения от его состава является естественной задачей кристаллохимии. Наиболее часто для решения этой задачи используют метод множественной линейной регрессии. Результатом применения регрессионного анализа является уравнение, связывающее параметр элементарной ячейки с радиусами катионов или с расстояниями катион-анион. Ранее было предложено несколько моделей для предсказания параметров элементарных ячеек для соединений со структурным типом граната, с общей формулой $^{VIII}A_3^{VI}B_2^{IV}C_3X_{12}$ (пр. гр. *Ia3d*). Для силикатных гранатов Novak & Gibbs (1971) предложили уравнение: $a_{calc} = 1.61 \times R_A + 1.89 \times R_B + 9.04$, где R_A , R_B - ионные радиусы катионов в позициях 24c и 16a[4,5]. Для германиевых и силикатных гранатов Hrichova & Feixova (1971) получили следующее уравнение $a_{calc} = 8.940 + 1.286 \times R_A + 1.524 \times R_B + 2.100 \times R_C$, где R_C - ионный радиус катиона в позиции 24d. При выводе уравнения использовались ионные радиусы по Ahrens L. H. (1952) [1,2]. Особенностью модели Lanley & Sturgeon (1979) является учет ионного радиуса аниона, что позволяет использовать уравнение $a_{calc} = 1.750 \times R_A + 1.653 \times R_B + 1.904 \times R_C + 6.225 \times R_X$, где R_X - ионный радиус аниона, для анализа как оксидных, так фторидных соединений [3,5]. Сравнение экспериментально определенных параметров элементарных ячеек редкоземельных гранатов с вычисленными по указанным уравнениям значениями показало сильную линейную зависимость ошибок вычисления от размера элементарной ячейки. В общем случае гетероскедастичность указывает на неадекватность статистической модели. В связи с этим нами было получено новое уравнение: $a_{calc} = 7.18174 + 2.47810 \times R_A + 8.08377 \times R_B - 5.1669 \times R_C$. В качестве предикторов использовались ионные радиусы по (Shannon & Prewitt, 1969). вычисленные регрессионные коэффициенты статистически значимы при $p < 0.05$. Коэффициент детерминации 0.99, стандартная ошибка модели 0.008.

Источники и литература

- 1) Ahrens L. H. The use of ionization potentials Part 1. Ionic radii of the elements // *Geochimica et cosmochimica Acta*. – 1952. – Т. 2. – №. 3. – С. 155-169.
- 2) Hrichova / Hrichova, and R, J.. // *Sb. Vys. Sk. Chem. Technol. Praze Mineral*. – 1971. – № 13. – С. 29-50.
- 3) Langley R. H., Sturgeon G. D. Lattice parameters and ionic radii of the oxide and fluoride garnets // *Journal of Solid State Chemistry*. – 1979. – Т. 30. – №. 1. – С. 79-82.
- 4) Novak G. A., Gibbs G. V. The crystal chemistry of the silicate garnets // *American Mineralogist: Journal of Earth and Planetary Materials*. – 1971. – Т. 56. – №. 5-6. – С. 791-825.
- 5) Shannon R. D. T., Prewitt C. T. Effective ionic radii in oxides and fluorides // *Acta Crystallographica Section B: Structural Crystallography and Crystal Chemistry*. – 1969. – Т. 25. – №. 5. – С. 925-946.