

**Рентгеноструктурное исследование нового борофосфата цезия и алюминия**

**Белик Владислава Игоревна**

*Студент (бакалавр)*

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

*E-mail: vladislava.belik@mail.ru*

Класс борофосфатов на сегодняшний день насчитывает около 40 структурно изученных представителей, большинство из которых получено методом гидротермального синтеза и содержат в кристаллических структурах молекулы воды и/или ОН-группы. Интерес к данному классу соединений обусловлен обнаружением каталитических, нелинейно-оптических, сорбционных и других технологически важных свойств. Наличие в составе борофосфатов воды, ОН-групп отрицательно влияет на их термическую и химическую устойчивость. Поэтому получение новых безводных представителей данного класса и исследование их кристаллохимических особенностей и свойств является весьма перспективным.

Монокристаллы нового соединения  $\text{CsAl}_2\text{BP}_6\text{O}_{20}$  были получены методом спонтанной кристаллизации в многокомпонентной системе Cs-Al-P-B-O. Исходные реактивы  $\text{CsH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{B}_2\text{O}_3$  и  $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$  смешивались в стехиометрическом соотношении и помещались в алундовые тигли. Нагрев осуществлялся до максимальной температуры 950 degree C, с последующей выдержкой в течение 20 часов и дальнейшим медленным охлаждением до 600 degree C. Бесцветные, прозрачные, столбчатые кристаллы размером до 0.1x0.2x0.4 мм<sup>3</sup> отбирали механическим способом. Качественный рентгеноспектральный микроанализ (Jeol JSM-6480LV, энергодисперсионный спектрометр INCA Energy-350) монокристаллов, подтвердил наличие в его составе атомов Cs, Al, P и O.

Экспериментальный набор интенсивностей дифракционных отражений получен на дифрактометре Xcalibur-S-CCD (MoK $\alpha$  излучение,  $\lambda=0.71073$ ). Зарегистрированные интенсивности отражений скорректированы с учетом фактора Лоренца и поляризационного эффекта. Эмпирическая поправка на поглощение введена с учетом формы кристалла. Все расчеты проводились в рамках программного комплекса Wingx 32. Кристаллическая структура решена прямыми методами с помощью программы Sir-92 и уточнена в анизотропном приближении колебаний атомов ( $R_1 = 0.043$ ) с использованием программы SHELXL. Новый борофосфат  $\text{CsAl}_2\text{BP}_6\text{O}_{20}$  кристаллизуется в ромбической сингонии с параметрами элементарной ячейки:  $a = 11.815(2)$ ,  $b = 10.042(2)$ ,  $c = 26.630(4)$  Å; пр. гр.  $Pbca$ ,  $Z = 8$ ,  $V = 3159.5(10)$  Å<sup>3</sup>.

В исследованном соединении установлен новый тип анионного борофосфатного 2D-радикала с максимально низким отношением В : Р = 1 : 6, содержащего фосфатные триортогруппы ( $\text{P}_3\text{O}_{10}$ ). Кристаллическая структура изученного борофосфата характеризуется анионным каркасом смешанного типа, состоящим из связанных вершинами  $\text{BO}_4^-$ ,  $\text{PO}_4^-$  тетраэдров и  $\text{AlO}_6$ -октаэдров, в пустотах которого расположены крупные атомы цезия. Выявлены топологические связи между структурами отличающихся катионным составом фаз  $\text{CsAl}_3(\text{P}_3\text{O}_{10})_2$  и  $\text{CsAl}_2\text{BP}_6\text{O}_{20}$ . Эти соединения можно рассматривать как квазиполи-типные фазы.

**Слова благодарности**

Хочу выразить благодарность за руководство и помощь в написании работы моему руководителю Шванской Л.В и всем сотрудникам кафедры кристаллографии за помощь при выполнении работы.