

## Кристаллическая структура $\text{Ln}_5\text{Ti}_4\text{GaO}_{17}$ ( $\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}$ )

*Чумак В.В., Титов Ю.А., Белявина Н.Н., Маркив В.Я., Слободяник Н.С.*

*Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Украина*

*E-mail: vvchumak@univ.kiev.ua*

Повышенный интерес к соединениям типа  $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$  со слоистой перовскитоподобной структурой (СПС) обусловлен их разнообразными физическими (пьезо-, сегнетоэлектрическими, электретыными, магнитными, оптическими, каталитическими) свойствами. Одним из основных факторов, оказывающих влияние на их свойства, является строение их СПС.

В данной работе методом порошковой рентгеновской дифракции проведено определение кристаллической структуры первых индивидуальных соединений типа  $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$  с атомами р – элемента в В-подрешетке СПС -  $\text{Ln}_5\text{Ti}_4\text{GaO}_{17}$  ( $\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}$ ), синтезированных путем термообработки (1620 К,  $\tau = 2$  часа) совместноосажденных гидроксооксалатов.

Индицирование дифракционных спектров  $\text{Ln}_5\text{Ti}_4\text{GaO}_{17}$  ( $\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}$ ) показало принадлежность кристаллической структуры  $\text{Ln}_5\text{Ti}_4\text{GaO}_{17}$  ( $\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}$ ) к пр. гр.  $\text{P2}_1/\text{b}$ . Периоды элементарных ячеек и значения факторов недостоверности  $R_w$  для  $\text{Ln}_5\text{Ti}_4\text{GaO}_{17}$  ( $\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}$ ) составляют  $a = 7,726(2)\text{\AA}$ ,  $b = 31,455(5)\text{\AA}$ ,  $c = 5,4708(9)\text{\AA}$ ,  $\angle\gamma = 96,993(8)$ ,  $R_w = 0,082$ ;  $a = 7,689(1)\text{\AA}$ ,  $b = 31,438(5)\text{\AA}$ ,  $c = 5,456(1)\text{\AA}$ ,  $\angle\gamma = 97,03(1)$ ,  $R_w = 0,078$  соответственно. СПС  $\text{Ln}_5\text{Ti}_4\text{GaO}_{17}$  ( $\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}$ ) образована двумерными, бесконечными в двух направлениях перовскитоподобными блоками, состоящими из пяти слоев соединенных вершинами деформированных октаэдров  $(\text{Ti}, \text{Ga})\text{O}_6$ . Блоки смещены один относительно другого вдоль оси X на половину ребра перовскитового куба и последовательно чередуются вдоль оси Y. Соединение соседних перовскитоподобных блоков происходит при помощи смещенных к краю блока атомов Ln посредством связей  $-\text{O} - \text{Ln} - \text{O} -$ .

Характерной особенностью пятислойной СПС  $\text{Ln}_5\text{Ti}_4\text{GaO}_{17}$  есть упорядоченный характер размещения атомов Ti и Ga. Так, половина центральных и четверть промежуточных позиций перовскитоподобных блоков заселена атомами галлия, а граничные позиции заселены исключительно атомами титана. Поскольку разница размеров ионов  $\text{Ga}^{3+}$  и  $\text{Ti}^{4+}$  составляет лишь 4%, а разница их зарядов минимальна, можно предполагать, что основной причиной частично упорядоченного характера распределения катионов  $\text{Ga}^{3+}$  и  $\text{Ti}^{4+}$  в СПС исследованных пятислойных соединений является различие их электронного строения.