

Синтез и кристаллическая структура $\text{Cs}_2\text{CaCu}_6\text{O}_2(\text{PO}_4)_4$ – нового представителя семейства щуровскиита**Научный руководитель – Шванская Лариса Викторовна*****Пирназарова Комила Назаралиевна****Студент (магистр)*

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

E-mail: komila.pirnazarova.04@mail.ru

Минерал щуровскиит, $\text{K}_2\text{CaCu}_6\text{O}_2(\text{AsO}_4)_4$, образуется в fumarольных условиях [1]. Его кристаллическая структура уникальна благодаря сочетанию трех типов полиэдров меди: искаженные октаэдры CuO_6 , пирамиды CuO_5 и плоские квадраты CuO_4 . Объединяясь через общие ребра и вершины, эти полиэдры образуют слои, которые объединяются в каркас AsO_4 тетраэдрами. «Мозаика» из полиэдров двухвалентной меди создает предпосылки для возникновения конкурирующих магнитных обменных взаимодействий, что делает щуровскиит и его аналоги перспективными кандидатами для изучения низкоразмерного магнетизма. Помимо щуровскиита, в его семейство входит редкий минерал дмисоколовит и ряд синтетических фаз. Большинство представителей семейства не являются изоструктурными и могут кристаллизоваться как в centrosимметричных, так и в ацентричных пространственных группах моноклинной и триклинной сингоний [2]. Все соединения описываются химической формулой $\text{A}_2\text{B}[\text{M}_6\text{O}_2](\text{TO}_4)_4$, где А - K^+ , Rb^+ ; В - Ca^{2+} , $(\text{Cu}^{2+} \text{K}^+)$; Т – Р, As; М - Cu, или (Cu, Al). Цель данной работы определить пределы изоморфного замещения в структурном архетипе щуровскиита. Поскольку на сегодняшний день из числа щелочных катионов были реализованы лишь K- и Rb- аналоги, интерес представлял синтез Cs-фазы, позволяющий оценить влияние максимального по размеру щелочного катиона на стабильность и трансформацию кристаллической структуры.

Монокристаллы нового представителя семейства щуровскиита, $\text{Cs}_2\text{CaCu}_6\text{O}_2(\text{PO}_4)_4$, получены методом твердофазного синтеза. Навески исходных реагентов CsH_2PO_4 , CaCO_3 , CuO, $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$, взятые в стехиометрическом соотношении, перетирали в фарфоровой ступке и помещали в тигель. Тигель нагревали в печи до 850 °С и охлаждали со скоростью 6°С/ч до комнатной температуры. Экспериментальный набор интенсивностей дифракционных отражений получен на дифрактометре Xcalibur-S-CCD (MoK [U+1D6FC] излучение, [U+1D706]=0.71073). Кристаллическая структура решена и уточнена с помощью программного комплекса SHELX в анизотропном приближении для всех атомов до $R_1 = 0.042\%$. Соединение кристаллизуется в новом структурном типе, пр. гр. $I2/a$, параметры элементарной ячейки: $a = 16.6210(7) \text{ \AA}$, $b = 5.7838(2) \text{ \AA}$, $c = 16.9112(7) \text{ \AA}$, $\beta = 94.401(4)$, $V = 1620.92 \text{ \AA}^3$, $Z = 4$. Будут рассмотрены кристаллохимические особенности $\text{Cs}_2\text{CaCu}_6\text{O}_2(\text{PO}_4)_4$ в сравнении с родственными фосфатами.

Литература

1. Pekov I.V., Zubkova N.V., Belakovskiy D.I. et.al. New arsenate minerals from the Arsenatnaya fumarole, Tolbachik volcano, Kamchatka, Russia. IV. Shchurovskyite, $\text{K}_2\text{CaCu}_6\text{O}_2(\text{AsO}_4)_4$ and dmisokolovite, $\text{K}_3\text{Cu}_5\text{AlO}_2(\text{AsO}_4)_4$, Mineral. Mag., 2015,79,1737-1753.
2. Crystal structure and physical properties of shchurovskyite-related $\text{K}_2\text{CaCu}_6\text{O}_2(\text{PO}_4)_4$ / G.V. Kiriukhina, O.V. Yakubovich, L.V. Shvanskaya, A.N. Vasiliev // Dalton Trans. — 2026.