

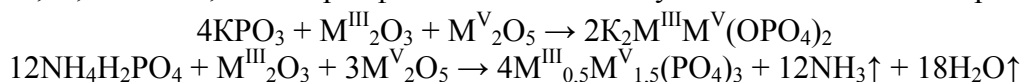
# ГЕТЕРОЗАМІЩЕНІ ФОСФАТИ З КРИСТАЛІЧНИМИ КАРКАСАМИ ТИПУ $M^{III}_{0,5}M^V_{1,5}(PO_4)_3$ ТА $KTiPO_4$

*Бабарик А.А., Затовський І.В., Тереміленко К.В., Слободяник М.С.*

Київський національний університет імені Тараса Шевченка  
vtatyanav@mail.ru

Успіхи в створенні оксидних сполук та матеріалів на їх основі з заданими електрофізичними та оптичними характеристиками в значній мірі залежать від з'ясування взаємозв'язків між складом, структурою та властивостями конкретних сполук. При моделюванні та синтезі нових фосфатних фаз на базі кристалохімічних даних, на першому етапі важливим є не лише визначення структурного типу каркасу у кожному конкретному випадку, а й аналіз геометрії оксидних поліедрів та можливих вакантних кристалографічних позицій. Як результат, ми одержуємо кристалохімічну формулу для конкретної структури або структурного типу, на основі якої (шляхом ізо- або гетеровалентних заміщень) можливо передбачити основні шляхи фазоформування для синтезу нових сполук.

Базуючись на даних принципах, методом твердофазного синтезу нами одержано гетеровалентно заміщені складні фосфати двох типів – ізоструктурні  $KTiPO_4$  (КТР) та з кристалічними каркасами загального складу  $M^{III}_{0,5}M^V_{1,5}(PO_4)_3$ . В обох випадках позиції  $MO_6$  комбінували (за принципом електронейтральності) трьох- та п'ятивалентними металами. Склад ізоструктурних КТР фосфатів відповідає формулі  $K_2M^{III}M^V(OPO_4)_2$ , де  $M^{III} = Fe, Cr, Ga, In$ ;  $M^V = Nb, Ta$ . Другий тип складних фосфатів має загальний склад  $M^{III}_{0,5}M^V_{1,5}(PO_4)_3$ , де  $M^{III} = Fe, Cr, Y$ ;  $M^V = Nb, Ta$ . Твердофазна взаємодія відбувається відповідно до рівнянь:



Вихідні шихти ступінчато нагрівали в межах від 700 до 1270°C (залежно від поєднання  $M^{III} + M^V$ ). Час взаємодії при максимальній температурі становив 7-13 год. Утворення гетеровалентно заміщених кристалічних матриць типу КТР в інтервалі температур 700-1000°C, в той час як для завершення фазоформування сполук складу  $M^{III}_{0,5}M^V_{1,5}(PO_4)_3$  необхідна більш висока температура (1000-1270°C). Контроль за повнотою проходження взаємодії при певних умовах проводили методом РФА та ІЧ-спектроскопії. Умови проведення твердофазного синтезу також в значній мірі залежать від природи тривалентного металу в межах кожного з кристалічних типів.

Для одержаних сполук за даними порошкової рентгенографії проведено розрахунок параметрів кристалічних ґраток. Як було виявлено, ортофосфати типу  $M^{III}_{0,5}M^V_{1,5}(PO_4)_3$  можуть належати до моноклінної або гексагональної сингонії в залежності від іонного радіусу тривалентного металу.