

## КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ПОДВІЙНОГО ДИФОСФАТУ $\text{Li}_2\text{MnP}_2\text{O}_7$

Лаврик Р.В. \*, Нагорний П.Г., Корнієнко З.І., Бойко Р.В.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

\*Національний аграрний університет

При дослідженні взаємодії та розчинності  $\text{Mn}_2\text{O}_3$  в розплавах системи  $\text{Li}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5$  синтезовано подвійний дифосфат  $\text{Li}_2\text{MnP}_2\text{O}_7$ . Кристалічну будову сполуки було встановлено методом повного рентгеноструктурного аналізу. Структура  $\text{Li}_2\text{MnP}_2\text{O}_7$  належить до моноклінної сингонії, пр. гр.  $\text{P}2_1/a$ , параметри кристалічної решітки дорівнюють:  $a=9,883(2)$ ,  $b=9,800(2)$ ,  $c=11,147(2)$  Å;  $\beta=102,44^\circ$ ;  $Z=6$ ,  $\rho_{\text{виррах}}=2,414$  г/см<sup>3</sup>.

Інтегральні інтенсивності вимірювали  $2\theta:\theta$  методом в інтервалі кутів  $7,48^\circ < 2\theta < 50,10^\circ$  із змінною швидкістю сканування  $2-28^\circ/\text{хв}$ . В результаті рентгеноструктурного дослідження одержано 1625 рефлексів (в інтервалі  $-1 \leq h \leq 11$ ,  $0 \leq k \leq 11$ ,  $0 \leq l \leq 13$ ), з яких для обрахунку використано 1267 незалежних рефлексів із  $I > 2\delta(I)$ . У масив даних введена поправка на поляризацію та фактор Лоренца. Структура вирішена методом важкого атома, уточнення проводили повноматричним МНК в анізотропному наближенні для всіх атомів. ( $R_w=0,048$ ).

На рис. 1 зображено проекцію структури  $\text{Li}_2\text{MnP}_2\text{O}_7$ . До складу структури входять поліедри мангану двох типів: октаедри  $\text{Mn}(1)\text{O}_6$  та п'ятивершинники  $\text{Mn}(2)\text{O}_5$ , які з'єднуються між собою спільним ребром  $\text{O}(1)-\text{O}(12)$ . Довжина зв'язків  $\text{Mn}-\text{O}$  в октаедрі та п'ятивершиннику лежить в межах  $2,109-2,294$  Å та  $2,113-2,240$  Å відповідно.

Структура  $\text{Li}_2\text{MnP}_2\text{O}_7$  містить дві кристалографічно різні дифосфатні групи з містками  $\text{P}(1)-\text{O}(4)-\text{P}(2)$  ( $\angle 131,2^\circ$ ) та  $\text{P}(3)-\text{O}(11)-\text{P}(4)$  ( $\angle 128,2^\circ$ ), довжина зв'язків у містку  $\text{P}-\text{O}-\text{P}$  становить  $3,215$  Å та  $3,213$  Å відповідно. Дві групи  $\text{P}(1)\text{P}(2)\text{O}_7$  та  $\text{P}(3)\text{P}(4)\text{O}_7$  кінцевими атомами оксигену стягують поліедри  $\text{Mn}(1)\text{O}_6$  та  $\text{Mn}(2)\text{O}_5$ , надаючи жорсткості каркасу структури. Атоми літію формують тетраедри  $\text{Li}(2)$ ,  $\text{Li}(3)$  та п'ятивершинники  $\text{Li}(1)$ ,  $\text{Li}(4)$ . У структурі  $\text{Li}_2\text{MnP}_2\text{O}_7$  в пустотах між поліедрами мангану та фосфору вздовж осі  $oy$  проходять канали, які заповнені поліедрами літію.

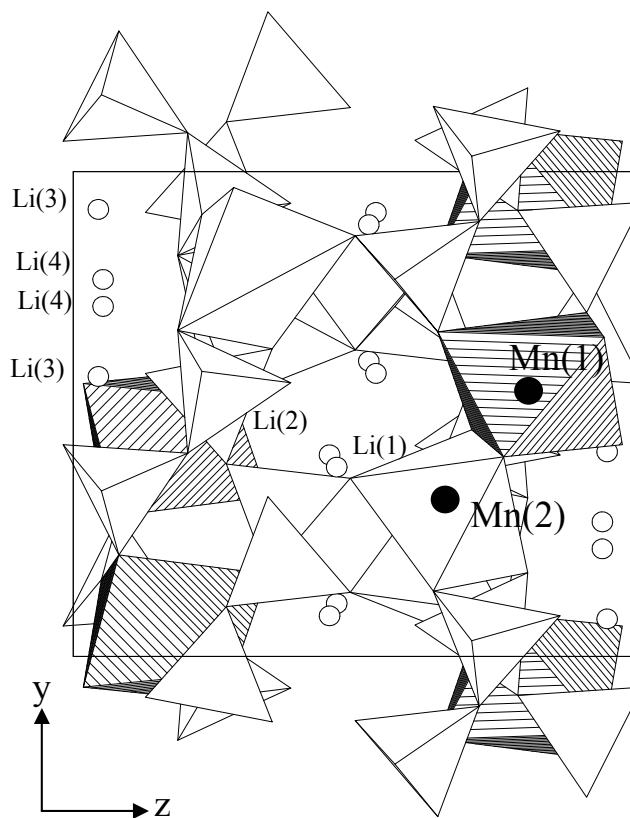


Рис. 1. Проекція структури  $\text{Li}_2\text{MnP}_2\text{O}_7$ .