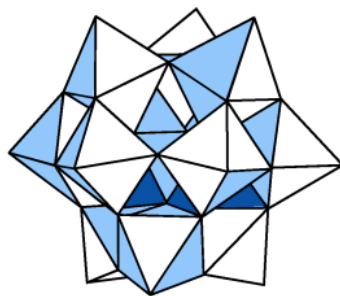


Российская академия наук,
Научный совет РАН по химической физике,
Научный совет РАН по материалам и наноматериалам

Институт проблем химической физики РАН,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова



ТЕЗИСЫ

X Национальной кристаллохимической конференции

Приэльбрусье, 5 - 9 июля 2021 г

Тезисы докладов X Национальной кристаллохимической конференции

В сборнике представлены тезисы пленарных лекций, устных и стендовых докладов X Национальной кристаллохимической конференции (Приэльбрусье 5 – 9 июля 2021 г).

Доклады посвящены современному состоянию исследований в области кристаллохимии - фундаментальным вопросам строения и реакционной способности, взаимосвязи «структура-свойство», созданию новых многофункциональных материалов с заранее заданными свойствами, структурным аспектам твердофазных реакций, вопросам динамической кристаллохимии и химической связи, представлены работы по общим вопросам кристаллохимии, методам рентгеноструктурного анализа и возможностям дифракционных методов исследования наноматериалов.

Сборник издан в авторской редакции

Технический редактор – к.х.н. И.А. Шилова

Организаторы конференции:

Институт проблем химической физики, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Конференция проводится при поддержке Российской академии наук, Научного совета РАН по химической физике, Научного совета РАН по материалам и наноматериалам

ISBN 978-5-6044508-3-3

ISBN 978-5-6044508-3-3



ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ РУТЕНИЯ С РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ И *p*-ЭЛЕМЕНТАМИ

Мурашова Е.В.[@], Турсина А.И., Куренбаева Ж.М., Седельников Д.В.,
Гришина Ю.А., Грехов И.А.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

@lena1960murashova@gmail.com

Из тройных интерметаллических соединений (ИМС) рутения наиболее изучены интерметаллиды с церием из-за наличия у них необычных магнитных и электрофизических свойств: тяжелофермионных, сверхпроводящих, магнетокалорических, переменной валентности и др. Соединения с другими редкоземельными элементами менее изучены, хотя среди них обнаружены уникальные по своим свойствам соединения. Целью данного исследования были интерметаллические соединения рутения, содержащие в составе более 40 ат% редкоземельного элемента, а в качестве *p*-элемента Al, Ga, In. Соединения синтезировали высокотемпературным жидкофазным синтезом из элементарных компонентов в электрической дуге в атмосфере аргона с последующим отжигом при температуре 500-700°C в течение 30 суток.

В результате исследований были получены несколько рядов тройных интерметаллических соединений. С алюминием в качестве *p*-элемента получен ряд ИМС состава $RE_{10}RuAl_3$ ($RE = Gd-Tm$), со структурой производной от *анти*- Co_2Al_5 . Редкоземельные элементы La-Sm не образуют соединений с такой стехиометрией. В структуре $RE_{10}RuAl_3$ тригональные призмы $RuRE_6$ чередуются вдоль параметра с гексагональной ячейки с парой пустых октаэдров RE_6 . Атомы алюминия в этой структуре сгруппированы в треугольники, как в структурах $CePt_6Al_3$ и $Ce_{0.67}Pt_2Al_5$. Соединения $RE_{10}RuAl_3$ с пустотами в структуре могут рассматриваться как потенциальные контейнеры для хранения водорода. С галлием синтезированы два ряда соединений: $RERu_{1-x}Ga_x$ ($RE = Er, Tm, Lu$) и $RE_4Ru_2Ga_3$ ($RE = Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er$). Соединения $RERu_{1-x}Ga_x$ принадлежат к структурному типу CsCl со статистическим заполнением атомами Ru и Ga позиции Cs. В новом структурном типе кристаллизуются соединения состава $RE_4Ru_2Ga_3$. С индием и большим содержанием редкоземельного

элемента получены ИМС следующих составов: RE_2RuIn ($\text{RE} = \text{Tb, Dy, Ho, Tm, Lu}$), $\text{RE}_{26}(\text{Ru}_x\text{In}_{1-x})_{17}$ ($\text{RE} = \text{La-Nd, Sm, Gd-Tm, Lu}$), $\text{RE}_{11}\text{Ru}_4\text{In}_9$ ($\text{RE} = \text{Ce, Pr, Gd, Tb}$), $\text{RE}_{16}\text{Ru}_5\text{In}_{14}$ ($\text{RE} = \text{Ho, Dy, Er}$), $\text{RE}_8\text{Ru}_3\text{In}_7$ ($\text{RE} = \text{La, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb}$), $\text{RE}_3\text{Ru}_{1-x}\text{In}_3$ ($\text{RE} = \text{Tb, Ho, Er, Lu}$). Кроме этих соединений были обнаружены ИМС $\text{RE}_{23}\text{Ru}_{11}\text{In}_4$ ($\text{RE} = \text{Ce, Pr}$) и $\text{Gd}_6\text{Ru}_2\text{In}$. Структура индида RE_2RuIn является производной от CsCl и характеризуется упорядоченным распределением атомов Ru и In в тетрагональных призмах RE_8 . В этой области тройной системы были подтверждены ранее обнаруженные соединения состава RE_4RuX ($\text{X} = \text{Al, In}$), $\text{RE}_5\text{Ru}_3\text{X}_2$ ($\text{RE} = \text{La, Ce, Pr, Nd}$; $\text{X} = \text{Al, Ga}$). Ближайшее окружение атомов рутения в алюминидах и галлидах формируют атомы редкоземельного элемента в форме тригональной призмы. В индидах атомы рутения находятся в центре не только тригональной призмы из атомов RE , но и в тетрагональной призме или тетрагональной антипризме из атомов редкоземельного элемента. Расстояния RE-Ru в исследованных соединениях близки к сумме ковалентных радиусов атомов. Особенностью строения большинства соединений с индием является наличие в структурах фрагментов двух типов структур CsCl и AlB_2 в различных соотношениях. В структурах индидов $\text{RE}_{26}(\text{Ru}_x\text{In}_{1-x})_{17}$ и $\text{Gd}_6\text{Ru}_2\text{In}$ присутствуют одинаковые фрагменты из пары тетрагональных антипризм RuRE_8 с атомом рутения внутри и тетрагональной призмой с атомом индия в центре. Следует заметить, что в соединениях рутения, содержащих в своем составе Ce наблюдалось значительное укорачивание контактов Ce-Ru до расстояний даже меньших, чем сумма их ковалентных радиусов. Согласно магнитным и электрофизическим свойствам такое укорачивание было связано с флуктуациями валентности у атомов Ce . При исследовании соединений с другими редкоземельными элементами не наблюдается аномально коротких расстояний RE-Ru , хотя расстояния в некоторых из них (например, Nd-Ru в $\text{Nd}_4\text{Ru}_2\text{Ga}_3$) короче, чем сумма их ковалентных радиусов. Измерение магнитных и электрофизических свойств новых соединений планируется выполнить в нашей дальнейшей работе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№19-03-00135)