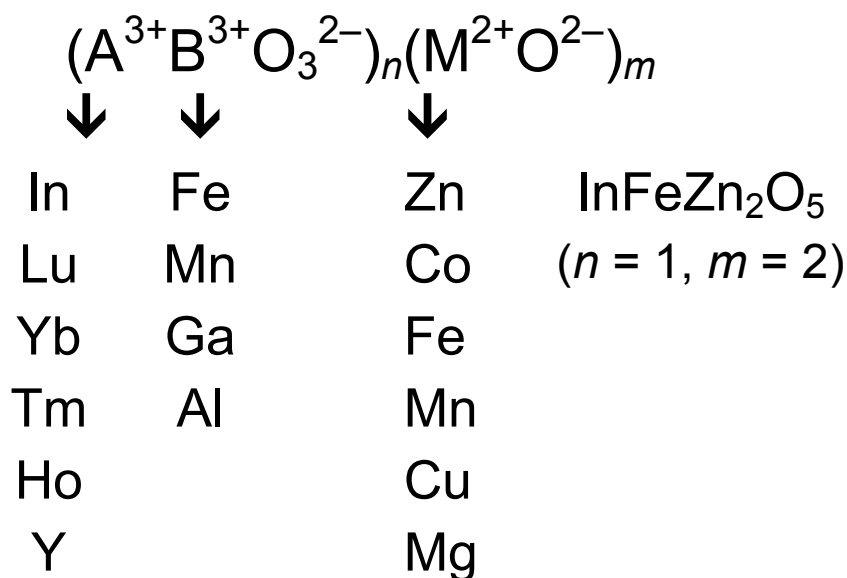


П р е п р и н т № 839 Ф

Кристаллы, родственные $\text{InFeZn}_2\text{O}_5$
(Кристаллохимия, прогноз новых соединений)

Б.В. Безносиков
К.С. Александров



Красноярск
2007

Приводятся результаты кристаллохимического анализа гексагональных слоистых структур, родственных $\text{InFeZn}_2\text{O}_5$, с пространственной группой $R\bar{6}_3/mmc$. Можно синтезировать более 250 новых соединений. Есть вероятность синтеза многослойных соединений и в других составах.

Материал препринта представлен и в электронной версии публикаций Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН на сайте <http://www.kirensky.ru> в разделе «препринты».

О г л а в л е н и е

	Стр.
1. Введение	3
2. Анализ структур	10
3. Прогноз новых соединений	15
4. Заключение	21
5. Список литературы	21

Работа выполнена в лаборатории кристаллофизики Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН в рамках программы ОФН РАН № 2.5 и Программы президента РФ по поддержке ведущих научных школ РФ (грант НШ 4137–2006.2).

1. Введение

До настоящего времени были получены многочисленные окисные соединения с общей формулой $(ABO_3)_n(MO)_m$, где А, В – трёхвалентные металлы, М – двухвалентный металл, n и m – целые числа. В ряде работ [1, 2] проводился синтез и были определены структуры соединений с $A = Sc, In, Lu, Yb, Tm$; $B = Fe^{3+}, Ga, Cr, Al$ и $M = Fe^{2+}, Mn, Co, Zn$ с $n = 1\div 4$ и $m = 1\div 19$. Характерными особенностями этих слоистых соединений является систематическое чередование двух пространственных групп: $R3m$, когда $m = 2k+1$ и $P6_3/mmc$ при $m = 2k$. Кроме того, в соединениях, содержащих парамагнитные ионы железа, обнаружены характерные магнитные свойства, которые связаны как с расположением ионов Fe^{2+} и Fe^{3+} в треугольных плоских сетках, так и с интенсивным перебросом электронов между этими валентными состояниями. Некоторые из соединений, например $ErFe_2O_4$ [3, 4], в зависимости от стехиометрии по кислороду имеют структурные переходы в низкосимметричные фазы и предполагается, что они являются полярными.

Некоторые примеры синтезированных ранее структур приведены в табл. 1. Среди соединений этого семейства широко представлен структурный тип $InFeZn_2O_5$ ($P6_3/mmc$, $Z = 2$). Известны подобные соединения и других составов, где индий заменён на Lu, Yb, Tm, Ho, Er, Y ; железо – на Mn, Ga, Al ; цинк – на Co, Fe, Mn, Cu, Mg [1, 2, 5].

В настоящей работе авторы анализируют кристаллохимические характеристики этих структур и прогнозируют возможности синтеза новых родственных соединений составов ABC_2O_5 и $ABCO_5$, где А, В, С, D – катионы, О – кислород.

Структуры $YbFe_2O_4$ [6] и $Yb_2Fe_3O_7$ [7], построенные по координатам атомов, представлены на рис. 1 и 2. Фрагмент структуры $Yb_3Fe_4O_{10}$ ($R3m$) приведён на рис. 3.

Таблица 1.

Структурные параметры слоистых соединений $(ABO_3)_n(MO)_m$

Соединение	n	m	Пространств. группа	a , Å	c , Å	Z	Литература
*YbFe ₂ O ₄	1	1	$R3m$	3,455	25,05	3	[2, 5]
*Yb ₂ Fe ₃ O ₇	2	1	$P6_3/mmc$	3,476	28,43	2	[2, 5]
*Yb ₃ Fe ₄ O ₁₀	3	1	$R3m$	3,490	60,79	3	[2, 5]
*Yb ₄ Fe ₅ O ₁₃	4	1	$P6_3/mmc$	3,503	53,03	2	[2, 5]
InFeZnO ₄	1	1	$R3m$	3,321	26,09	3	[2, 5]
InFeZn ₂ O ₅	1	2	$P6_3/mmc$	3,309	22,57	2	[2, 5]
InFeZn ₃ O ₆	1	3	$R3m$	3,300	41,68	3	[2, 5]
InFeZn ₄ O ₇	1	4	$P6_3/mmc$	3,294	32,99	2	[2, 5]
InFeZn ₅ O ₈	1	5	$R3m$	3,288	57,28	3	[2, 5]
InFeZn ₆ O ₉	1	6	$P6_3/mmc$	3,283	43,36	2	[2, 5]
InFeZn ₇ O ₁₀	1	7	$R3m$	3,279	72,85	3	[2, 5]
InFeZn ₈ O ₁₁	1	8	$P6_3/mmc$	3,276	53,75	2	[2, 5]
InFeZn ₉ O ₁₂	1	9	$R3m$	3,274	88,41	3	[2, 5]
InFeZn ₁₀ O ₁₃	1	10	$P6_3/mmc$	3,272	64,02	2	[2, 5]
InFeZn ₁₅ O ₁₈	1	15	$R3m$	3,266	135,2	3	[5]
InFeZn ₁₇ O ₂₀	1	17	$R3m$	3,264	150,9	3	[5]
InFeZn ₁₉ O ₂₂	1	19	$R3m$	3,263	166,5	3	[5]

*Эти соединения содержат ионы железа в двух валентностях: Fe³⁺ и Fe²⁺.

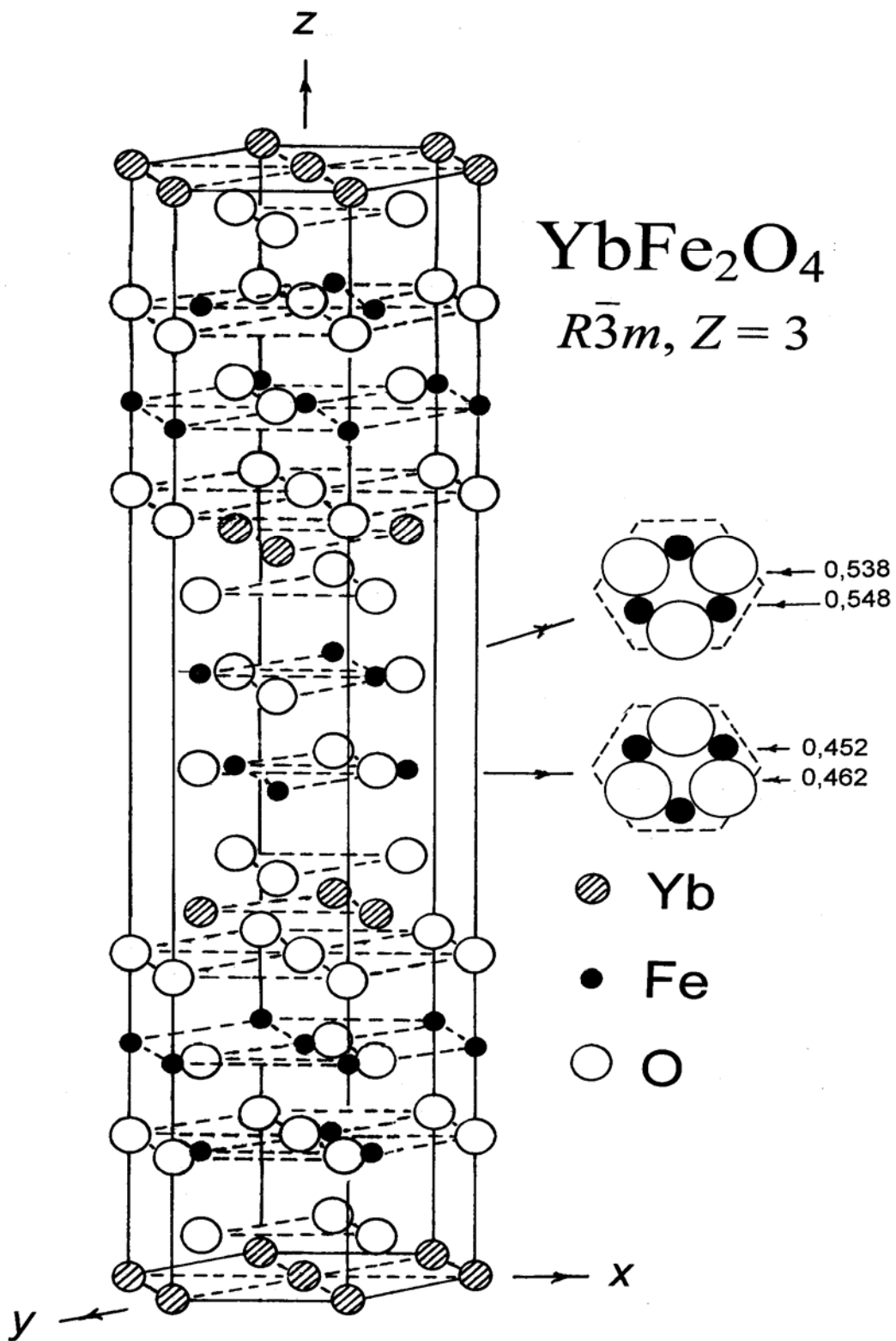


Рис. 1. Структура YbFe_2O_4 [6].

$\text{Yb}_2\text{Fe}_3\text{O}_7$
 $(2\text{Yb}^{3+}\text{Fe}^{3+}\text{O}_3 \cdot \text{Fe}^{2+}\text{O})$
 $P6_3/mmc, Z = 2$

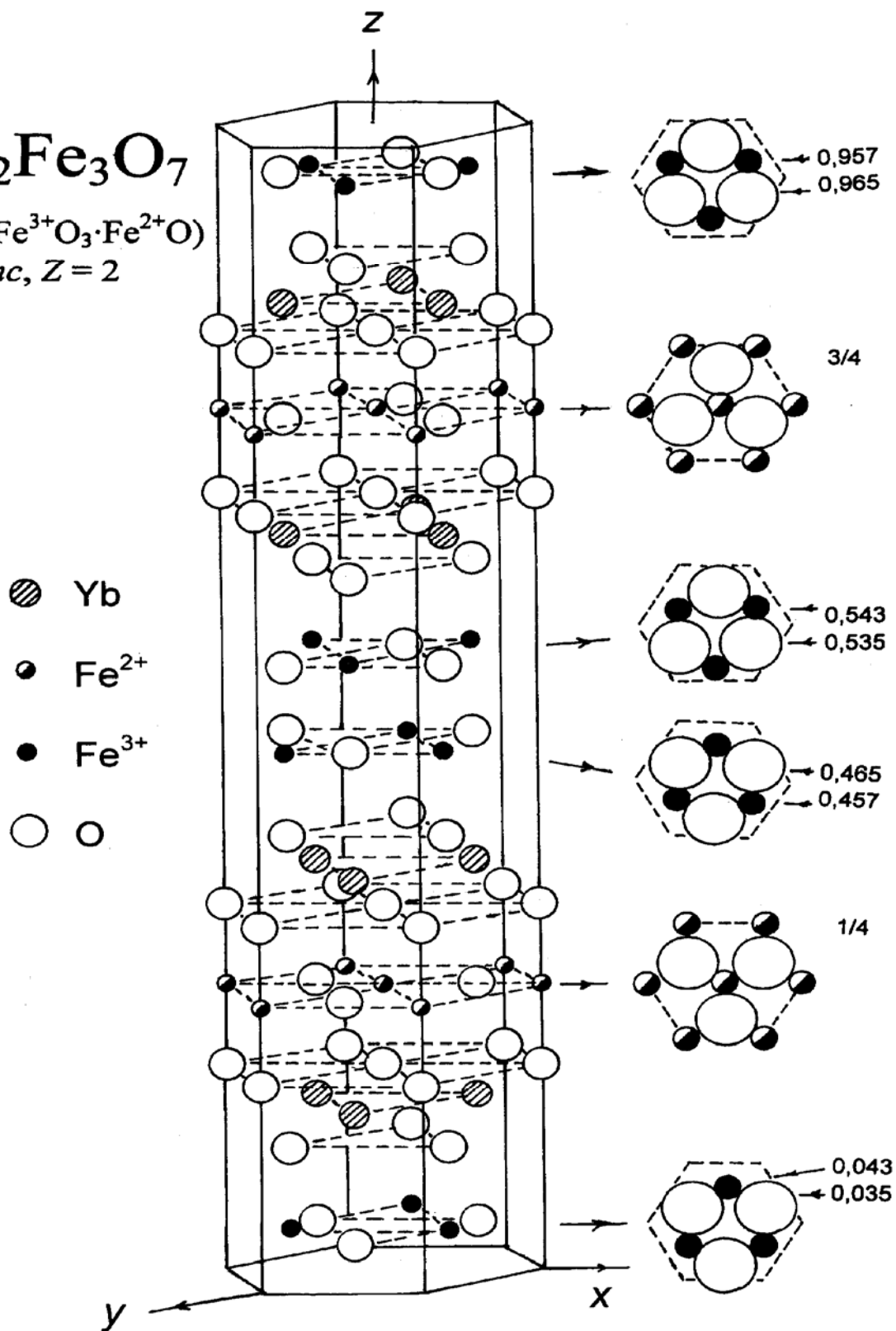


Рис. 2. Структура $\text{Yb}_2\text{Fe}_3\text{O}_7$ [7].

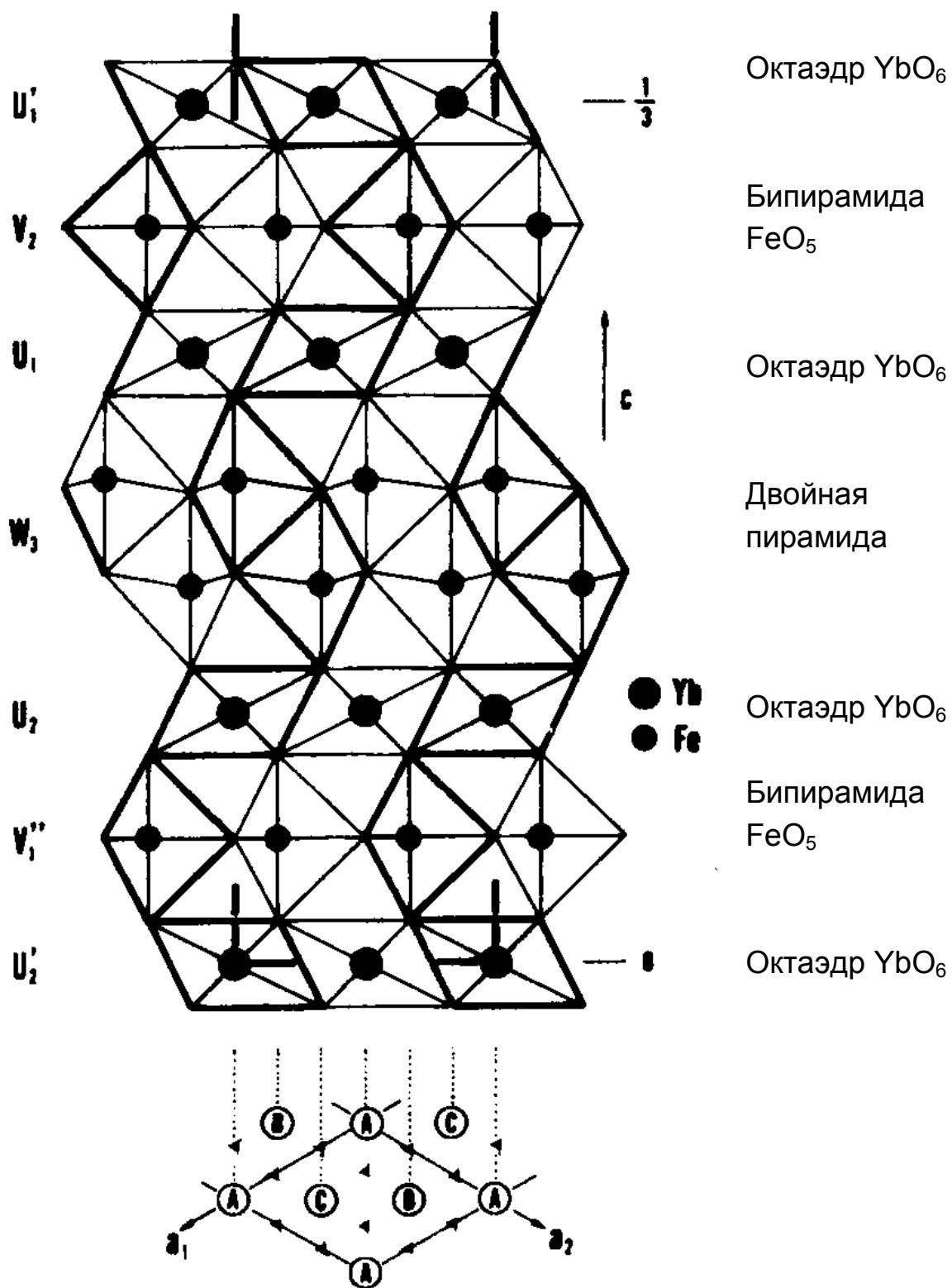


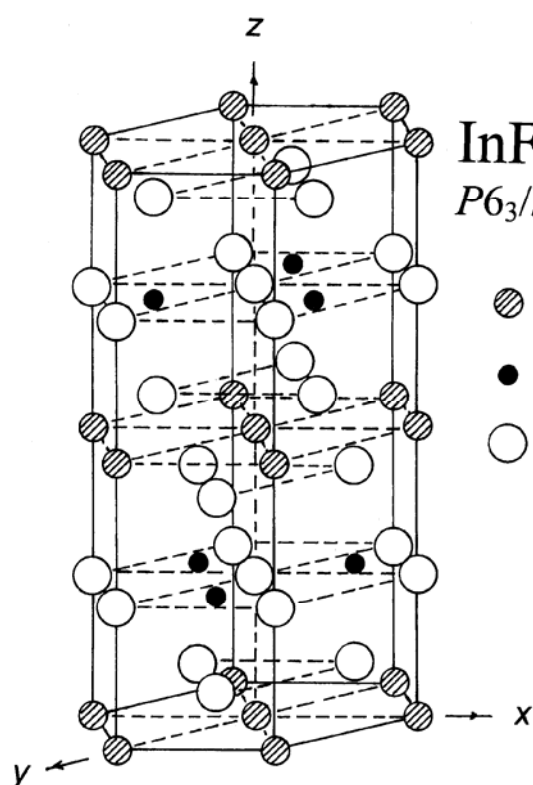
Рис. 3. Фрагмент структуры $Yb_3Fe_4O_{10}$ [8].

Образование соединений, изображённых на рис. 1 – 3, можно представить по схеме $n \cdot \text{YbFeO}_3 + \text{FeO} = \text{Yb}_n\text{Fe}_{n+1}\text{O}_{3n+1}$. Получены соединения с $n = 1 \div 4$ [2],

Синтезированы соединения $\text{InFeO}_3(\text{ZnO})_m$ ($m = 1 \div 19$) [1, 2, 5], (табл. 1). Их образование можно представить по реакции $\text{InFeO}_3 + m \cdot \text{ZnO} = \text{InFeO}_3(\text{ZnO})_m$. Слоистость в структурах выражена не чётко. «Многоэтажные» слои в слоистых структурах иногда называют пакетами [9 – 11]. Наложение слоёв по принципу плотного соприкосновения иногда возможно не одним, а двумя или большим числом способов, очень мало отличающимся по энергии, и поэтому нередко возникают различные модификации таких структур. Данный пример не исключение.

Образование соединений, содержащих несколько слоёв двухвалентных металлов, можно представить по реакции $\text{ABX}_3 + m \cdot \text{MeX} = \text{ABMe}_m\text{X}_{m+3}$. В нашем конкретном случае: $\text{InFeO}_3 + 2\text{ZnO} = \text{InFeZn}_2\text{O}_5$. На этом примере легче увидеть некоторые закономерности. Исходные компоненты имеют структуры:

Соединение	Пространственная группа	Z	a, Å	c, Å	Литература
InFeO_3	$P6_3/mmc$	2	3,334	12,202	[12]
ZnO	$P6_3mc$	2	3,25	5,206	[5, 13]



InFeO_3
 $P6_3/mmc, Z = 2$

Индий находится в кислородном октаэдре.

Железо – в центре тригональной бипирамиды.

Рис. 4. Структура InFeO_3 [12]

ZnO (тип вюртцита)

$P6_3mc, Z = 2$

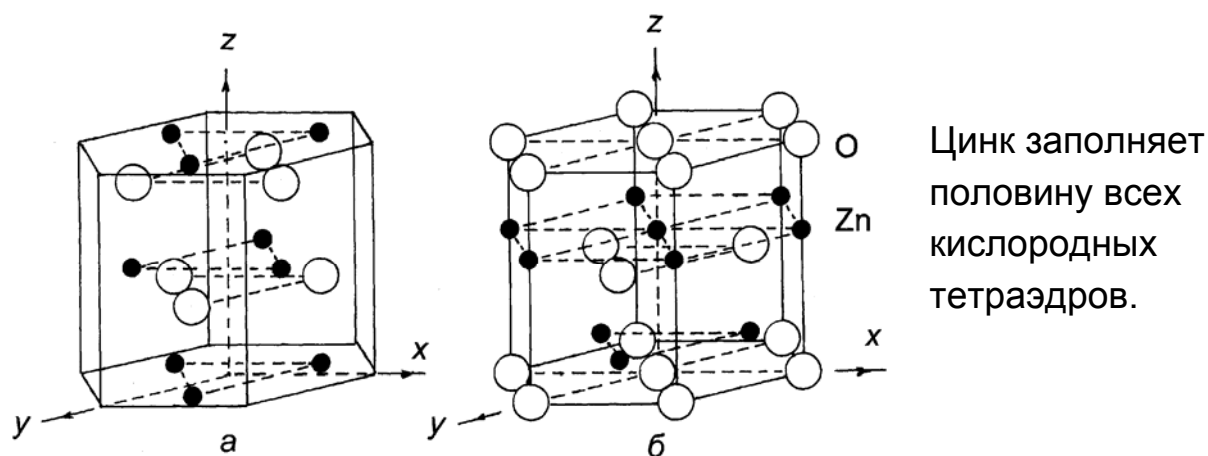


Рис. 5. Структура ZnO (вюртцита) в двух вариантах. В обычной установке (а) [13] и с совмещением начала координат с атомом кислорода (б).

ZnO имеет структуру типа ZnS – вюртцита, в которой все положения, занятые атомами каждого элемента, составляют одну правильную систему точек. Обе системы, занятые атомами цинка и серы, эквивалентны между собой, так же, как и в случае структур типов: NaCl, CsCl и др. Этот структурный тип часто называют структурным типом ZnO [13].

Структурный тип гексагональной модификации ZnS – минерала вюртцита (тип В4) установлен в 1913 году. Для вюртцита характерны пьезоэлектрические свойства. Модификация вюртцита имеет несколько разновидностей, которые различаются порядком следования слоёв в направлении, перпендикулярном главной кристаллографической оси c . Простейшая разновидность сам вюртцит – двухслойный гексагональный; кроме того есть четырёх и шестислойные гексагональные разновидности, а так же трёх и пятнадцати слойные ромбоэдрические политипы [14].

2. Анализ структур

Структуры $\text{InFeO}_3(\text{ZnO})_m$ можно рассматривать как системы прораствания двух структурных типов: InFeO_3 и ZnO (тип вюртцита).

Некоторые закономерности в образовании структур можно видеть на примере строения исходных компонент. Все соединения с индием, представленные в табл. 1, имеют значения параметров элементарных ячеек « a » от 3,321 Å (InFeZnO_4) до 3,263 Å ($\text{InFeZn}_{19}\text{O}_{22}$), т.е. не выходят за пределы соответствующих величин в исходных структурах. А это значит, что срастание исходных ячеек происходит в базисных плоскостях $a - b$. Кроме того величина параметра элементарной ячейки вдоль главной оси u соединений $\text{InFeO}_3(\text{ZnO})_m$ равна сумме параметров « c » исходных компонент с учётом их молярного содержания в элементарной ячейке.

Так для $\text{InFeOZn}_{19}\text{O}_{22}$ (см. табл. 1), содержащего 19 слоёв ZnO , рассчитанный параметр $c = (c_{\text{InFeO}_3} + m \cdot c_{\text{ZnO}}) \times (Z/2) = (12,202 + 5,206 \times 19) \times 1,5 = 166,67$ Å, при экспериментальном значении его 166,5 Å. Разница составляет +0,1 %. Итак. срастание исходных компонент типов InFeO_3 и ZnO происходит целыми элементарными ячейками. Этим и можно объяснить образование слоистых гексагональных структур как с несколькими слоями InFeO_3 при одном слое ZnO , так и с несколькими слоями ZnO при одном слое InFeO_3 .

С упаковочной точки зрения, в этой системе могут быть синтезированы слоистые структуры с любым числом слоёв в пределах одной элементарной ячейки. А поскольку ограничения на число слоёв нет, там, где получены однослойные структуры, там вероятны и многослойные.

Ранее был выполнен анализ и прогноз соединений типов YbFe_2O_4 и $\text{Yb}_2\text{Fe}_3\text{O}_7$ [15, 16], который показал, что новых кристаллов можно синтезировать более 220. В данной публикации приводятся результаты анализа составов с $m > 1$, на примере соединений ABCDX_5 . Структурные данные известных соединений таких составов приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Структуры соединений, родственные $\text{InFeZn}_2\text{O}_5$
(оксиды, $P6_3/mmc$, $Z = 2$). (ρ – плотность).

Представитель	Литература	a , Å	c , Å	ρ (г/см ³)
ABC_2X_5				
$\text{ErGaMn}_2\text{O}_5$	[2, 5]	3,461	22,32	6,122
$\text{HoGaMn}_2\text{O}_5$	[2, 5]	3,472	22,26	6,067
$\text{InAlMg}_2\text{O}_5$	[2, 5]	3,287	21,81	4,401
$\text{InAlZn}_2\text{O}_5$	[5]	3,295	22,56	5,520
$\text{InFeZn}_2\text{O}_5$	[5725]	3,309	22,59	5,919
$\text{InGaMg}_2\text{O}_5$	[2, 5]	3,309	22,08	4,967
$\text{InGaMn}_2\text{O}_5$	[2, 5]	3,364	22,86	5,545
$\text{InGaZn}_2\text{O}_5$	[5]	3,292	22,52	6,211
$\text{LuFeZn}_2\text{O}_5$	[1, 5]	3,377	22,13	6,710
$\text{LuGaMn}_2\text{O}_5$	[2, 5]	3,409	22,47	6,382
$\text{LuGaZn}_2\text{O}_5$	[1, 5]	3,365	22,05	6,995
$\text{ScAlZn}_2\text{O}_5$	[5725]	3,245	22,24	4,629
$\text{ScFeZn}_2\text{O}_5$	[5725]	3,278	22,51	4,940
$\text{ScGaZn}_2\text{O}_5$	[1, 5]	3,262	22,50	5,213
$\text{TmGaMn}_2\text{O}_5$	[2, 5]	3,450	22,36	6,175
$\text{TmGaZn}_2\text{O}_5$	[5]	3,392	21,93	6,830
$\text{YbFeZn}_2\text{O}_5$	[5725]	3,391	22,05	6,649
$\text{YbGaMn}_2\text{O}_5$	[2, 5]	3,438	22,41	6,263
$\text{YbGaZn}_2\text{O}_5$	[5]	3,378	21,98	6,934
YGaMn_2O_5	[2, 5]	3,473	22,24	4,979
ABCDX_5				
InAlCoZnO_5	[2, 5]	3,297	22,29	5,478
InAlMgZnO_5	[2, 5]	3,287	22,15	4,991
InFeCoZnO_5	[2, 5]	3,315	22,46	5,826
$\text{InFeFe}^{2+}\text{ZnO}_5$	[2, 5]	3,323	22,58	5,720
InFeMgZnO_5	[2, 5]	3,324	22,32	5,292
InGaCoMgO_5	[2, 5]	3,306	22,18	5,501

Представитель	Литература	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$\rho (\text{г/см}^3)$
InGaCoZnO_5	[2, 5]	3,300	22,41	6,110
InGaMgZnO_5	[5]	3,300	22,30	5,594
LuAlMgZnO_5	[2, 5]	3,351	21,58	5,881
LuFeMgZnO_5	[2, 5]	3,389	21,90	6,106
LuGaMgZnO_5	[2, 5]	3,367	21,91	6,397
ScAlCoZnO_5	[2, 5]	3,251	22,05	4,546
ScAlMgZnO_5	[2, 5]	3,249	21,88	4,012
ScGaCoZnO_5	[2, 5]	3,270	22,36	
ScGaMgZnO_5	[2, 5]	3,276	22,24	4,569
TmFeMgZnO_5	[2, 5]	3,411	21,81	5,961
TmGaMgZnO_5	[2, 5]	3,391	21,82	6,241
YbAlMgZnO_5	[2, 5]	3,361	21,51	5,835
YbFeMgZnO_5	[2, 5]	3,400	21,82	6,060
YbGaMgZnO_5	[2, 5]	3,378	21,83	6,349

Представленные выше составы содержат в качестве исходных компонент соединения ABX_3 , по строению подобные перовскиту, но имеющие гексагональные или искажённые перовскитные структуры. В составах с большим m содержится много ZnO . И в этом нет ничего удивительного, т.к. структура типа вюртцита способна образовывать политипы [14]. В других составах (без цинка) компонент MeO имеет структуру типа NaCl . Способность этого структурного типа образовывать промежуточные блоки доказана результатами синтеза многочисленных перовскитоподобных слоистых соединений [10, 11].

Структура типа NaCl на рис. 6 представлена в разных вариантах, в том числе и в гексагональной установке. Исходя из рисунка, можно представить, что при совпадении её параметров в гексагональных плоскостях с соответствующими параметрами исходных ABX_3 возможно образование фаз срастания.

Если в перовскитоподобных слоистых структурах пакеты и блоки легко различимы на рисунках структур, то в случаях с гексагональными и ромбоэдрическими структурами этого не видно. Можно в строении рассмотреть элементы исходных фаз (рис. 1), но границы срастания элементарных ячеек пока выявить не удалось.

В строении рассматриваемых структур есть оригинальность и общие закономерности. Катион А имеет октаэдрическое анионное окружение ($KЧ_A = 6$). Остальные катионы (В, С, D) имеют пятикратное окружение – тригональные призмы (можно считать, что это унаследовано от прототипа $InFeO_3$). Фрагмент структуры $Yb_2Fe_3O_7$, характерный для соединений и других составов, представлен на рис. 7.

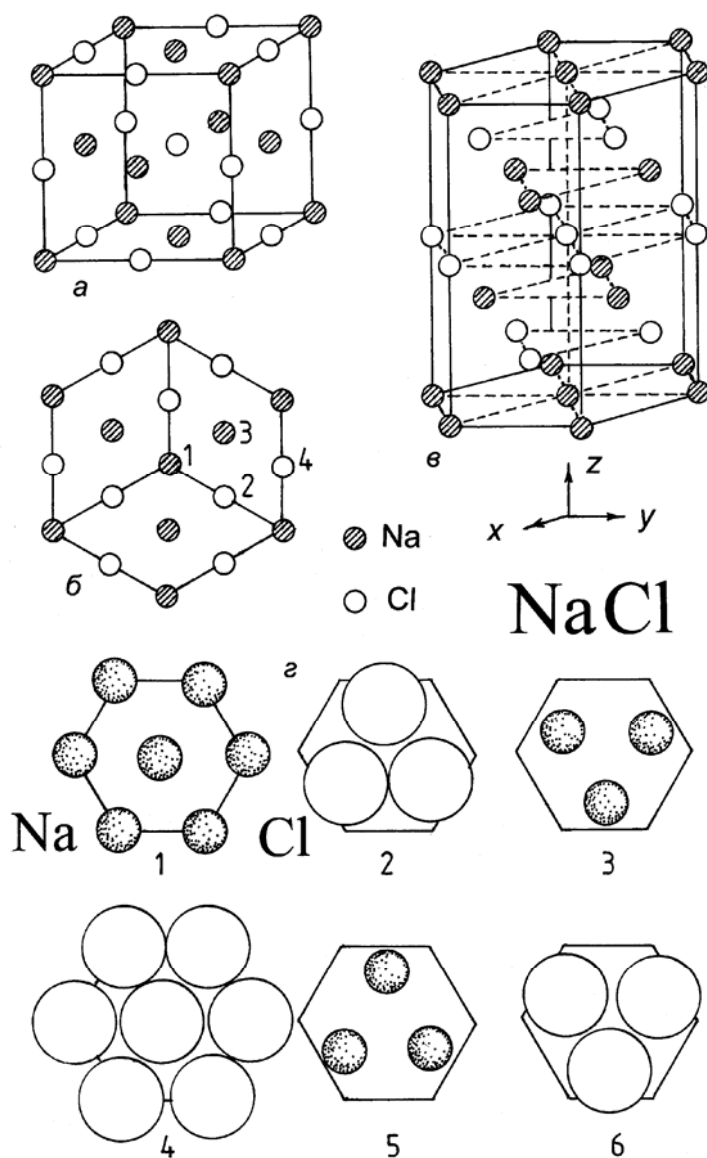


Рис. 6. Структура типа NaCl, представленная в разных вариантах. а – кубическая ячейка, б – вид на ячейку NaCl вдоль пространственной диагонали, в – структура типа NaCl в гексагональной установке, г – структура NaCl в послойном представлении, перпендикулярном пространственной диагонали кубической ячейки.

Все структуры состоят из полиэдров $AХ_6$ и $BХ_5$, сочленённых между собой в разных комбинациях. Исходя из величин ионных радиусов по Шеннону [17], на образование пятикратной координации должны быть способны (в основном) катионы $B^{3+} = Fe, Mn, Ga, Al$, с этими атомами и известны синтезированные соединения (см. табл.

2). Из B^{2+} вероятны Ni, Co, Fe, Mn, Cu, Mg. КЧ = 6 могут иметь многие редкоземельные элементы, иттрий, скандий, таллий.

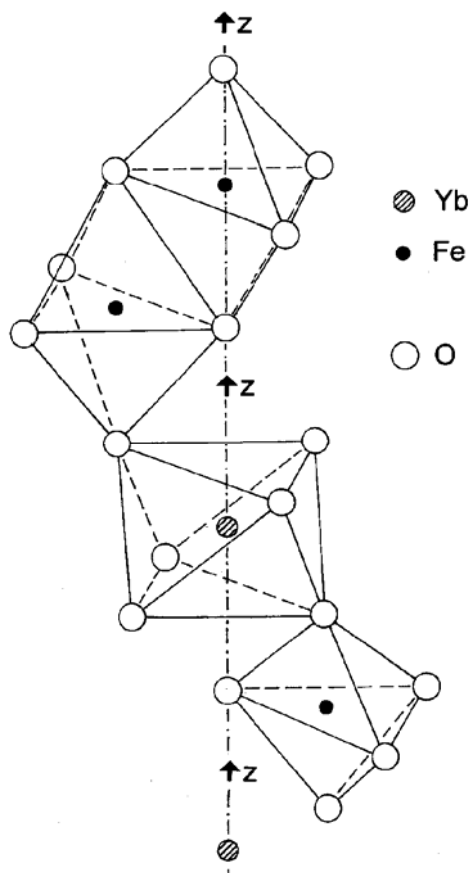


Рис. 7. Фрагмент структуры $Yb_2Fe_3O_7$, характерный для всех рассматриваемых соединений [7].

Далее приводятся результаты прогноза новых соединений, родственных $InFeZn_2O_5$, выполненные на основании выявленных закономерностей строения структур и с учётом составов известных соединений.

Выявленные закономерности:

- 1) Принцип срастания.
- 2) Где есть однослойные структуры, там будут и многослойные.
- 3) Оригинальное сочетание координационных полиэдров, и ограниченное число катионов способных к образованию таких структур.
- 4) Прогноз сделан в основном по наличию известных структур.

3. Прогноз новых соединений

Таблица 3

Прогноз соединений составов ABC_2X_5 ($A^{3+}B^{3+}C_2^{2+}O^{2-}_5$)

	$B^{3+} \rightarrow$	Ga (3+) (0,55 Å)					
	$C^{2+} \rightarrow$	Co	Fe	Mn	Cu	Zn	Mg
	$R_C^{2+} \rightarrow$	0,67	0,63	0,75	0,65	0,68	0,66 (Å)
$A^{3+} \downarrow$	$R_A \downarrow$ (Å)						
La	1,032						
Y	0,900		▲				
Sc	0,745					▲	
Tl	0,885						
In	0,80		▲			▲	▲
Ce	1,01						
Pr	0,99						
Nd	0,983						
Pm	0,97	$A^{3+} Ga^{3+} C_2^{2+} O^{2-}_5$					
Sm	0,958						
Eu	0,947						
Gd	0,938						
Tb	0,923						
Dy	0,912						
Ho	0,901		▲				
Er	0,890		▲				
Tm	0,880		▲			▲	▲
Yb	0,868		▲			▲	▲
Lu	0,861		▲			▲	

▲ Соединения типа $InFeZn_2O_5$ известны

▭ Область, в которой возможно образование новых соединений

R – радиусы катионов по Шеннону [17].

Таблица 3 (продолжение)

Прогноз соединений составов ABC_2X_5 ($A^{3+}B^{3+}C_2^{2+}O^{2-}_5$)

	$B^{3+} \rightarrow$	Fe (3+) (0,58 Å)											
	$C^{2+} \rightarrow$	Co	Fe	Mn	Cu	Zn	Mg						
	$R_{C^{2+}} \rightarrow$	0,67	0,63	0,75	0,65	0,68	0,66 (Å)						
$A^{3+} \downarrow$	$R_A \downarrow$ (Å)												
La	1,032												
Y	0,900												
Sc	0,745											▲	
Tl	0,885												
In	0,80											▲	
Ce	1,01	$A^{3+}Fe^{3+}C_2^{2+}O^{2-}_5$											
Pr	0,99												
Nd	0,983												
Pm	0,97												
Sm	0,958												
Eu	0,947												
Gd	0,938												
Tb	0,923												
Dy	0,912												
Ho	0,901												
Er	0,890												
Tm	0,880												
Yb	0,868					▲							
Lu	0,861					▲							

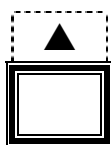
▲ Соединения типа $InFeZn_2O_5$ известны

▭ Область, в которой возможно образование новых соединений

Таблица 3 (окончание)

Прогноз соединений составов ABC_2X_5 ($A^{3+}B^{3+}C_2^{2+}O_5^{2-}$)

	$B^{3+} \rightarrow$	Al (3+) (0,48 Å)					
	$C^{2+} \rightarrow$	Co	Fe	Mn	Cu	Zn	Mg
	$R_{C^{2+}} \rightarrow$	0,67	0,63	0,75	0,65	0,68	0,66 (Å)
$A^{3+} \downarrow$	$R_A \downarrow$ (Å)						
La	1,032						
Y	0,900	$A^{3+} Al^{3+} C_2^{2+} O_5^{2-}$					
Sc	0,745						
Tl	0,885						
In	0,80						
Ce	1,01						
Pr	0,99						
Nd	0,983						
Pm	0,97						
Sm	0,958						
Eu	0,947						
Gd	0,938						
Tb	0,923						
Dy	0,912						
Ho	0,901						
Er	0,890						
Tm	0,880						
Yb	0,868						
Lu	0,861						



▲ Соединения типа $InFeZn_2O_5$ известны

□ Область, в которой возможно образование новых соединений

Таблица 4

Прогноз соединений составов $ABCDX_5$ ($A^{3+}B^{3+}C^{2+}D^{2+}O^{2-}_5$)

	$B^{3+} \rightarrow$	Ga (3+) (0,55 Å)									
	$C^{2+} \rightarrow$	Co	Fe	Mn	Cu	Mg					
	$R_{C^{2+}} \rightarrow$	0,67	0,63	0,75	0,65	0,66	(Å)				
$A^{3+} \downarrow$	$R_A \downarrow$ (Å)										
La	1,032										
Y	0,900	$A^{3+} Ga^{3+} C^{2+} Zn^{2+} O^{2-}_5$									
Sc	0,745						▲				▲
Tl	0,885										
In	0,80						▲				▲
Ce	1,01										
Pr	0,99										
Nd	0,983										
Pm	0,97										
Sm	0,958										
Eu	0,947										
Gd	0,938										
Tb	0,923										
Dy	0,912										
Ho	0,901										
Er	0,890										
Tm	0,880									▲	
Yb	0,868									▲	
Lu	0,861									▲	

▲ Соединения типа $InFeZn_2O_5$ известны

□ Область, в которой возможно образование новых соединений

Таблица 4 (продолжение)

Прогноз соединений составов ABCDX₅ (A³⁺B³⁺C²⁺D²⁺O²⁻₅)

	B ³⁺ →	Fe (3+) (0,58 Å)					
	C ²⁺ →	Co	Fe	Mn	Cu	Mg	
	R _{C2+} →	0,67	0,63	0,75	0,65	0,66	(Å)
A ³⁺ ↓	R _A ↓ (Å)						
La	1,032						
Y	0,900						
Sc	0,745						
Tl	0,885						
In	0,80						
Ce	1,01	$A^{3+} Fe^{3+} C^{2+} Zn^{2+} O^{2-}_5$					
Pr	0,99						
Nd	0,983						
Pm	0,97						
Sm	0,958						
Eu	0,947						
Gd	0,938						
Tb	0,923						
Dy	0,912						
Ho	0,901						
Er	0,890						
Tm	0,880						
Yb	0,868						
Lu	0,861						

▲ Соединения типа InFeZn₂O₅ известны

▭ Область, в которой возможно образование новых соединений

Таблица 4 (окончание)

Прогноз соединений составов $ABCDX_5$ ($A^{3+}B^{3+}C^{2+}D^{2+}O^{2-}_5$)

	$B^{3+} \rightarrow$	Al (3+) (0,48 Å)									
	$C^{2+} \rightarrow$	Co	Fe	Mn	Cu	Mg					
	$R_{C^{2+}} \rightarrow$	0,67	0,63	0,75	0,65	0,66	(Å)				
$A^{3+} \downarrow$	$R_{A^{3+}} \downarrow$ (Å)										
La	1,032										
Y	0,900	$A^{3+} Al^{3+} C^{2+} Zn^{2+} O^{2-}_5$									
Sc	0,745						▲				▲
Tl	0,885										
In	0,80						▲				▲
Ce	1,01										
Pr	0,99										
Nd	0,983										
Pm	0,97										
Sm	0,958										
Eu	0,947										
Gd	0,938										
Tb	0,923										
Dy	0,912										
Ho	0,901										
Er	0,890										
Tm	0,880										
Yb	0,868										▲
Lu	0,861										▲

▲ Соединения типа $InFeZn_2O_5$ известны

□ Область, в которой возможно образование новых соединений

4. Заключение

Данная публикация вызвана желанием сделать прогноз новых соединений, родственных составам $\text{InFeZn}_2\text{O}_5$. Из таблиц 3 и 4 видно, что можно синтезировать более 250 новых кристаллов. Но число вероятных соединений значительно больше. В средней части табл. 3 и 4 расположены элементы $\text{Ce} \div \text{Dy}$. Их радиусы больше радиуса катиона Ho^{3+} , для которого известна структура $\text{HoGaMn}_2\text{O}_5$, всего на $0,1 \text{ \AA}$. Есть вероятность синтеза новых многослойных соединений. Поскольку ZnO склонен к образованию политипов, то в составах $\text{ABO}_3(\text{ZnO})_m$ возможно образование новых слоистых структур.

Физические свойства этих кристаллов ещё мало изучены. Нам известно всего несколько работ [3, 4, 18 – 20]. В этих структурах реализуется сочетание катионов B^{3+} и B^{2+} в анионных полиэдрах. Может быть эта особенность строения поможет выявить какие-то оригинальные физические свойства. Среди прогнозируемых составов могут быть синтезированы новые лазерные кристаллы. Структуры таких кристаллов имеют большие расстояния между позициями А – А, большие объёмы элементарных ячеек, и в них может входить редкоземельный активатор.

5. Список литературы

1. **Kimizuka N., Monri T.** Structural classification of $\text{RAO}_2(\text{MO})_n$ compounds (R = Sc, In, Y, or lanthanides; A = Fe(III), Ga, Cr, or Al; M = divalent cation; $n = 1-11$). // J. Solid State Chem. 1989. V. 78. P. 98–107.
2. **Kimizuka N., Monri T. Nakamura M.** Compounds which have $\text{InFeO}_3(\text{ZnO})_m$ -type structures ($m = \text{integer}$). // J. Solid State Chem. 1989. V. 81. P. 70–77.
3. **Ikeda N., Kohn K., Kito H., Akimitsu J., Siratori K.** Dielectric relaxation and hopping of electrons in ErFe_2O_4 . // J. Phys. Soc. Japan. 1994. V. 63, N 12. P. 4556–4564.
4. **Ikeda N., Kohn K., Kito H., Akimitsu J., Siratori K.** Anisotropy of dielectric dispersion in ErFe_2O_4 single crystal. // J. Phys. Soc. Japan. 1995. V. 64, № 4. P. 1371 –1377.
5. **JCPDS** – International Centre for Diffraction Data. 1997. v. 1.30.
6. **Kato K., Kawada L., Kimizuka N., Katzura T.** Die Kristallstruktur von YbFe_2O_4 . // Z. Kristallogr. 1975. Bd. 141, № 3/4. S. 314–320.
7. **Malaman B., Evrard O., Tanniers N.** Structural crystalline de la phase $\text{Yb}_2\text{Fe}_3\text{O}_7$ // Acta Cryst. 1976. V. B32, N 3. P. 749–752.
8. **Matsui Y., Kato K., Kimizuka N., Horiuchi S.** Structure image of $\text{Yb}_3\text{Fe}_4\text{O}_{10}$ by a 1 MV high-resolution electron microscope. // Acta Cryst. 1979. V. B35, № 5. P. 561–564.
9. **Современная кристаллография.** (в четырёх томах) Том 2. Структура кристаллов. / Вайнштейн Б.К., Фридкин В.М., Инденбом В.Л. М.: «Наука». 1979.- 360с.
10. **Александров К.С., Безносиков Б.В.** Перовскитоподобные кристаллы. Новосибирск: Наука. – Сибирское предприятие РАН. 1997. – 261 с.
11. **Александров К.С., Безносиков Б.В.** Перовскиты. Настоящее и будущее (Многообразие прафаз, фазовые превращения, возможности синтеза новых соединений) – Новосибирск: Издательство СО РАН. 2004. – 231 с.

12. **Nodari I., Alebougheh A., Brice J.F., Gerardin R., Evrard O.** Caracterisation de nouveaux ferrites d'indium: $\text{In}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ et In-FeO_3 . // Mater. Res. Bull., 1988. V. 23, N. 7. P. 1039–1044.
13. **Бокий Г.Б.** Введение в кристаллохимию. М. Изд-во МГУ. 1954. 490 с.
14. **Нараи Сабо И.** Неорганическая кристаллохимия. Будапешт. Изд-во АН Венгрии. 1969. 504 с.
15. **Безносиков Б.В., Александров К.С.** Кристаллы типов YbFe_2O_4 и $\text{Yb}_2\text{Fe}_3\text{O}_7$. Красноярск. Препринт № 834 Ф. Ин-т физики СО РАН. 2006. 24с.
16. Безносиков Б.В., Александров К.С. Кристаллохимия и прогноз новых соединений типов YbFe_2O_4 и $\text{Yb}_2\text{Fe}_3\text{O}_7$. // Перспективные материалы. 2007. № 1. С. 46–49.
17. **Shannon R.D.** // Acta Cryst. 1976. V. A32, № 5. P. 751–767.
18. **Ikeda N., Kohn K., Myouda N., Takahashi E., Kitoh H., Takekawa S.** Change frustration and dielectric dispersion in LuFe_2O_4 . // J. Phys. Soc. Japan. 2000. V. 69, № 5. P. 1526–1532.
19. **Sunaga T., Tanaka M., Sakai N., Tsunoda Y.** Mössbauer study on a triangular lattice antiferromagnet LuFeCoO_4 . // J. Phys. Soc. Japan. 2001. V. 70, № 12. P. 3713–3718.
20. **Ikeda M., Ohsumi H., Ohwads K., et al.** Ferroelectricity from iron valence ordering in the charge-frustrated system LuFe_2O_4 . // Nature Letters. 2005. V. 436/25. P. 1136–1138.

Ответственный за выпуск Б.В. Безносиков

Подписано в печать 18.04.2007. Гарнитура "Arial"

Уч. изд. л. 1,5. Заказ № 27. Тираж 50 экз.

Отпечатано в типографии

Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН

660036. Россия. Красноярск. Академгородок.

В печать утверждаю:

Зам. директора Ин-та физики

СО РАН докт. физ.–мат наук

А.Н. Втюрин

18 апреля 2007 г.