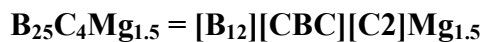


СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НОВОГО СОЕДИНЕНИЯ



Сотрудниками Института В.И. Пономаревым, С.В. Коновалихиным, В.И. Вершинниковым, И.Д. Ковалевым и И.П. Боровинской проведены исследования нового тройного соединения $\text{B}_{25}\text{C}_4\text{Mg}_{1.5}$.

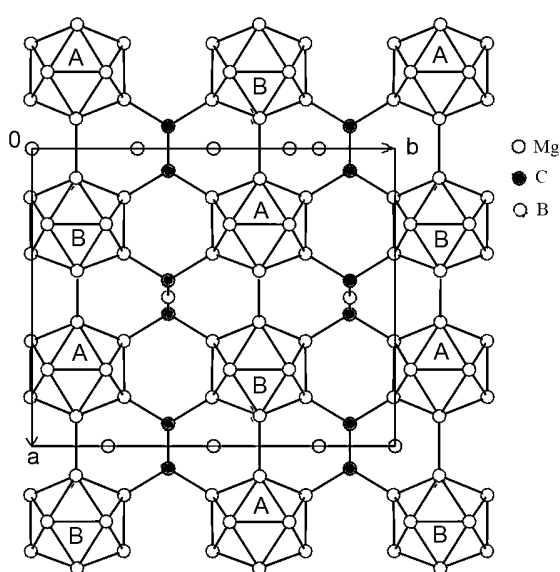
В процессе самораспространяющегося высокотемпературного синтеза карбида бора B_4C наряду с основной массой мелкокристаллических кристаллов B_4C размером 5-20 мкм получены монокристаллы размером до 1 мм, пластинчатого и изометричного габитуса, имеющие цвет от светлокорицевого до черного, устойчивые к кислотам.

Методом рентгенофазового анализа порошка из выделенных кристаллов и рентгеноструктурного анализа монокристалла размером 0.25 x 0.25 x 0.2 мм определены кристаллическая структура и состав нового соединения $\text{B}_{25}\text{C}_4\text{Mg}_{1.5}$. Кристаллографические данные: $a = 9.626(1)$, $b = 11.329(1)$, $c = 8.966(1)$ Å, $\beta = 105.80(3)^\circ$, $V = 940.8(2)$ Å³, пр. гр. $P2_1/b$, $Z = 4$, $R = 0.03$.

В независимой области ячейки расположены два икосаэдра состава B_{12} (А и В), группа $\text{C}(\text{sp}^2)=\text{C}(\text{sp}^2)$, группа $\text{C}(\text{sp}^3)-\text{B}-\text{C}(\text{sp}^3)$ и две позиции для атомов магния с неполной заселенностью. Каждый из 12 атомов бора, входящих в состав икосаэдра, связан с соседними икосаэдрами ковалентными связями с участием атомов бора и углерода.

Кристаллохимический анализ показал, что соединения такого строения и состава до сих пор были неизвестны. Это первое соединение, у которого икосаэдры B_{12} связаны между собой четырьмя типами связей: 1) $\text{B}-\text{B}$ (1,735-1,778 Å); 2) парными связями $\text{B}-\text{B}$ (1.848 и 1.885 Å); 3) через группу $\text{C}(\text{sp}^2)=\text{C}(\text{sp}^2)$ (1,391 Å), 4) через группу $\text{C}(\text{sp}^3)-\text{B}-\text{C}(\text{sp}^3)$ (1.450+1,451 Å). До сих пор были известны структуры карбидов бора, в которых икосаэдры связаны между собой ковалентными связями одного или двух типов, например, связи $\text{B}-\text{B}$ в α -боре, связи $\text{B}-\text{B}$ и $\text{B}-\text{C}-\text{B}$ в карбиде бора B_4C . В структуре имеются каналы, вдоль оси c ячейки, в которых располагаются разупорядоченные атомы Mg без четкой координации.

Трехмерность каркаса из икосаэдров B_{12} , обусловленная прочными ковалентными связями $\text{B}-\text{C}$ или $\text{B}-\text{B}$, установленная кислотостойкость, общий мотив структуры, открывающий возможность ее вариации, позволяют предположить наличие у соединения полезных свойств.



Кристаллическая структура

