

## Исследование структуры кристалла $\text{Ca}_2\text{Al}_3\text{O}_6\text{F}$ методами рентгеноструктурного анализа и колебательной спектроскопии

Александр Сергеевич Орешонков<sup>1</sup>, Александр Николаевич Втюрин<sup>2</sup>, Zhiguo Xia<sup>3</sup>, Максим Сергеевич Молокеев<sup>4</sup>, Виктор Валерьевич Агучин<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Институт физики СО РАН, Красноярск, 660036, Россия (E-mail: oreshonkov@iph.krasn.ru)

<sup>2</sup>Институт физики СО РАН, Красноярск, 660036, Россия (E-mail: vtyurin@iph.krasn.ru)

<sup>3</sup>China University of Geosciences, Beijing, 100083, China (E-mail: xiazg426@yahoo.com.cn)

<sup>4</sup>Институт физики СО РАН, Красноярск, 660036, Россия (E-mail: msmolokeev@mail.ru)

<sup>5</sup>Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, 630090, Россия (E-mail: atuchin@isp.nsc.ru)

Представлены результаты рентгеноструктурного анализа, КР и ИК спектроскопии порошкового образца  $\text{Ca}_2\text{Al}_3\text{O}_6\text{F}$ . Экспериментальная рентгенограмма проиндексирована ромбоэдрической ячейкой  $a=17.3237$ ,  $c=7.00017 \text{ \AA}$   $V=1819.38 \text{ \AA}^3$ ,  $Z=6$ , структура успешно решена в пространственной группе  $R\bar{3}$ . Показано, что структура  $\text{Ca}_2\text{Al}_3\text{O}_6\text{F}$  состоит из почти идеальных тетраэдров  $\text{AlO}_4$  соединенных между собой углами.

Выполнен полуэмпирический расчет спектра колебаний  $\text{Ca}_2\text{Al}_3\text{O}_6\text{F}$ , с использованием программного пакета LADY. Для расчета межсионных взаимодействий была использована упрощенная модель Борна Кармана. Расчетные КР и ИК спектры качественно совпадают с экспериментальными. Вычисления показывают, что наиболее интенсивные линии в спектре КР  $539$  и  $573 \text{ cm}^{-1}$  соответствуют колебаниям шестичленного кольца состоящего из тетраэдров  $\text{AlO}_4$  и полносимметричному колебанию атомов фтора в плоскости  $ab$  кристалла соответственно.