

Ю. О. Тітов, Н. М. Білявина, В. Я. Марків,
член-кореспондент НАН України М. С. Слободяник,
В. В. Полубінський

Кристалічна структура $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$

Методом рентгеноструктурного аналізу порошку визначено шарувату перовськітоподібну структуру (ШПС) ніобату $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, який синтезовано низькотемпературною (1120 К) термообробкою спільноосаджених гідроксикарбонатів. Встановлено, що кристалічна ШПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ належить до структурного типу $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$. Параметри елементарної комірки $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$: $a = 0,5659(1)$ нм, $c = 2,7178(7)$ нм, просторова група $R\text{-}3m$, $R_B = 0,076$ для 152 незалежних відбиттів. Виявлено вплив способу (температури) синтезу на будову ШПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$. Проаналізовано фактори, які визначають термостабільність дефектної ШПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$.

Матеріали на основі оксидних сполук типу $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$ ($\text{A} = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{La}, \text{Nd}$, $\text{B} = \text{Nb}, \text{Ta}, \text{Ti}, \text{Mg}, \text{Zn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{W}, \text{Re}$) з дефектною шаруватою перовськітоподібною структурою (ШПС) мають комплекс діелектричних властивостей, які відповідають вимогам сучасної мобільної телекомунікаційної індустрії [1–4].

Отримання однієї з таких сполук, $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, проводилось науковцями в роботах [1–4] методом високотемпературного ($T > 1620$ К) керамічного синтезу. Щодо кристалічної структури сполуки $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, то для неї було запропоновано дві структурні моделі в просторових групах $R\text{-}3$ або $R\text{-}3m$. Проведене в дослідженні [3] уточнення моделі структури $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ у просторовій групі $R\text{-}3m$ виявилось невдалим (фактор розбіжності $R_{\text{wp}} = 0,265$), тому автори робіт [3] й [4] розраховували структуру $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ у просторовій групі $R\text{-}3$ (величини $R_{\text{wp}} = 0,046$ й $0,075$ відповідно).

Характер термічної поведінки ніобату $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, отриманого з використанням низькотемпературного методу синтезу [5], істотно відрізняється від такого для зразків $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, синтезованих за допомогою високотемпературної керамічної технології [3, 4]. Так, згідно з даними авторів [5], утворення $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ з шихти спільноосаджених гідроксикарбонатів (СОГК) відбувається при 1120 К, а вище 1120 К починається його поступовий розклад за схемою $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12} \rightarrow \text{Sr}_4\text{Nb}_4\text{O}_{14} + \text{LaSr}_2\text{Nb}_2\text{O}_{8,5}$. Вищезазначене давало підстави для припущення про відмінність будови ШПС синтезованого термообробкою СОГК $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ від такої для зразків $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, які були отримані в роботах [3, 4]. З'ясування цього питання є практично важливим, оскільки, згідно з публікаціями [1–4], будова сполук типу $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$ істотно впливає на їх мікрохвильові діелектричні властивості.

Метою даної роботи є визначення кристалічної структури отриманого низькотемпературним синтезом із шихти СОГК $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ та її порівняльний аналіз із будовою зразків $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, синтезованих за високотемпературною керамічною технологією.

Спільне осадження гідроксикарбонатів Sr , La та Nb проводили у водному буферному розчині $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} + (\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$ з $\text{pH} \approx 8,5$. За вихідні використано водні розчини $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$, $\text{La}(\text{NO}_3)_3$ марок “х. ч.” та метанольний розчин NbCl_5 марки “о. с. ч.”. Дифрактограми зразків записано на дифрактометрі ДРОН-3 у дискретному режимі (крок сканування $0,03^\circ$, експо-

зиція в точці 5 с) на мідному фільтрованому випромінюванні. Управління процесом зйомки та збором інформації, початкова обробка дифрактограм, а також структурні розрахунки виконано з використанням апаратно-програмного комплексу [6].

Виходячи із даних [5] — про послідовність фазових перетворень при термообробці Sr-, La-, Nb-вмісної шихти СОГК, для отримання однофазних зразків $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ нами був використаний “ударний” режим термообробки шляхом внесення повітряносухої шихти СОГК зі співвідношенням $\text{Sr} : \text{La} : \text{Nb} = 3 : 1 : 3$ у піч, розігріту до 1120 К, і витримці зразка при цій температурі впродовж 2 год.

Дифрактограми отриманого за цих умов $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ виявилися подібними до дифрактограм відомих тришарових сполук типу $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$: $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$ (пр. гр. R-3m) [7], $\text{Ba}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ (пр. гр. R-3m) [8] та синтезованого за керамічною технологією ($T = 1620\text{--}1770$ К) $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ (пр. гр. R-3) [3, 4].

Індексування дифрактограм отриманого термообробкою шихти СОГК $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ показало, що вони задовільно індексуються у тригональній сингонії, а систематика згасань відбиттів на дифрактограмах $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ відповідає відомим просторовим групам для тришарових сполук типу $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$: R-3m або R-3.

Первинну оцінку координат атомів для початкової моделі структури $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ проведено, виходячи з більш високосиметричної просторової групи R-3m. Зіставлення експериментальних і розрахованих для такої моделі структури інтенсивностей відбиттів показало їх задовільну збіжність. Результати уточнення координатних та теплових параметрів структури $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, а також дифракційні дані наведено в табл. 1–3 та на рис. 1–3. Уточнений при розрахунку структури склад цієї сполуки (15,79 ат. % Sr, 5,25% La, 15,79% Nb, 63,17% O) у межах похибки визначення відповідає експериментально заданому.

Кристалічна структура отриманого з шихти СОГК $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ побудована з двовимірних (нескінчених в напрямках осей X і Y) перовськітоподібних блоків товщиною в три шари октаєдрів NbO_6 (див. рис. 2). Безпосередній зв'язок між зовнішньоблочними октаєдрами NbO_6 сусідніх перовськітоподібних блоків у ШПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ відсутній. Блоки розділені шаром полієдрів $(\text{SrLa})(1)\text{O}_{12}$ і утримуються разом за допомогою зв'язків $\text{O}-(\text{Sr, La})(1)-\text{O}$. З дванадцяти атомів оксигену полієдра $(\text{Sr, La})(1)\text{O}_{12}$ дев'ять (шість O(2) та три O(1)) належать до того ж блока, що і атоми $(\text{Sr, La})(1)$, а три атоми оксигену (O(2)) належать до сусіднього блока (див. рис. 3). Координаційне число внутрішньоблочних

Таблиця 1. Кристалографічні дані $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ (Cu $K\alpha_1$ випромінювання)

Атом	Позиція	X	Y	Z	Заповнення
Sr(1)	6c	0	0	0,1404(7)	0,82(4)
La(1)	6c	0	0	0,1404(7)	0,18(4)
Sr(2)	6c	0	0	0,2814(7)	0,68(4)
La(2)	6c	0	0	0,2814(7)	0,32(4)
Nb(1)	6c	0	0	0,4222(6)	1
Nb(2)	3a	0	0	0	1
O(1)	18h	0,167	0,333	0,036(2)	1
O(2)	18h	0,167	0,333	0,452(1)	1
Просторова група		R-3m (no 166)			
Періоди кристалічної ґратки, нм		$a = 0,5659(1)$, $c = 2,7178(7)$ $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$			
Незалежні відбиття		152			
Загальний ізотропний В-фактор, нм ²		$0,82(4) \cdot 10^{-2}$			
Фактор недостовірності		$R_B = 0,076$			

атомів (Sr,La)(2) дорівнює 12, а їх координаційний поліедр є деформованим кубооктаедром (Sr,La)(2)O₁₂ (див. табл. 2, 3).

Необхідність “зшивання” у ШПС Sr₃LaNb₃O₁₂ перовськітоподібних блоків між собою через зв’язки O–(Sr, La)(1)–O– обумовлює більшу деформацію зовнішньоблочних поліедрів (SrLa)(1)O₁₂ у порівнянні з внутрішньоблочними кубооктаедрами (Sr,La)(2)O₁₂.

Таблиця 2. Деякі міжатомні відстані та ступінь деформації (Δ) поліедрів (Sr, La)O₁₂ та NbO₆ у кристалічній структурі Sr₃LaNb₃O₁₂

Атом	<i>d</i> , нм	Атом	<i>d</i> , нм
(Sr, La)(1)–3O(2)*	0,260(1)	(Sr, La)(2)–3O(2)	0,244(1)
–6O(2)	0,289(2)	–6O(1)	0,286(1)
–3O(1)	0,328(3)	–3O(1)	0,289(2)
(Sr, La)(1)–O _{сеп}	0,292	(Sr, La)(2)–O _{сеп}	0,276
Δ (Sr, La)(1)O ₁₂	$69 \cdot 10^{-4}$	Δ (Sr, La)(2)O ₁₂	$46 \cdot 10^{-4}$
Nb(1)–3O(2)	0,183(1)	Nb(2)–6O(1)	0,191(1)
–3O(1)	0,217(2)	Nb(2)–O _{сеп.}	0,191
Nb(1)–O _{сеп}	0,200	Δ Nb(2)O ₆	0
Δ Nb(1)O ₆	$72 \cdot 10^{-4}$		

Примітка. * Міжблочна відстань (O(2)–атоми оксигену октаедра Nb(1)O₆ із сусіднього перовськітоподібного блока); розрахунок ступеня деформації поліедрів MeO_n проведено за формулою: $\Delta = 1/n \sum [(R_i - \bar{R})/\bar{R}]^2$ (*R_i* – відстані Me–O, \bar{R} – середня відстань Me–O, *n* – координаційне число) [9].

Таблиця 3. Порівняльні кристалографічні параметри зразків Sr₃LaNb₃O₁₂, отриманих із шихти СОГК (1120 К) та за керамічною технологією (1670 К) [4]

Кристалографічні параметри	Sr ₃ LaNb ₃ O ₁₂ пр. гр. R-3m	Sr ₃ LaNb ₃ O ₁₂ [4] пр. гр. R-3
Періоди кристалічної ґратки, нм	<i>a</i> = 0,5659(1), <i>c</i> = 2,7178(7)	<i>a</i> = 0,56556(1), <i>c</i> = 2,71756(4)
Фактор недостовірності	R _B = 0,076	R _{wp} = 0,075
Середня відстань (Sr, La)–O у зовнішньоблочному поліедри (Sr,La)O ₁₂ , нм	0,292	0,288
Середня відстань (Sr, La)–O у внутрішньоблочному поліедри (Sr, La)O ₁₂ , нм	0,276	0,279
Міжблочна відстань (Sr, La)–O, нм	0,260(1)	0,2592(4)
Заповнення зовнішньоблочних кубооктаедричних позицій	Sr 0,82(4) La 0,18(4)	0,94(6) 0,06(6)
Заповнення внутрішньоблочних кубооктаедричних позицій	Sr 0,68(4) La 0,32(4)	0,56(6) 0,44(6)
Середня відстань Nb–O у зовнішньоблочному октаедри NbO ₆ , нм	0,200	0,201
Середня відстань Nb–O у внутрішньоблочному октаедри NbO ₆ , нм	0,191	0,199
Ступінь деформації зовнішньоблочних поліедрів (Sr,La)O ₁₂	$69 \cdot 10^{-4}$	$117 \cdot 10^{-4}$
Ступінь деформації внутрішньоблочних поліедрів (Sr, La)O ₁₂	$46 \cdot 10^{-4}$	$67 \cdot 10^{-4}$
Ступінь деформації зовнішньоблочних октаедрів NbO ₆	$72 \cdot 10^{-4}$	$48 \cdot 10^{-4}$
Ступінь деформації внутрішньоблочних октаедрів NbO ₆	0	0

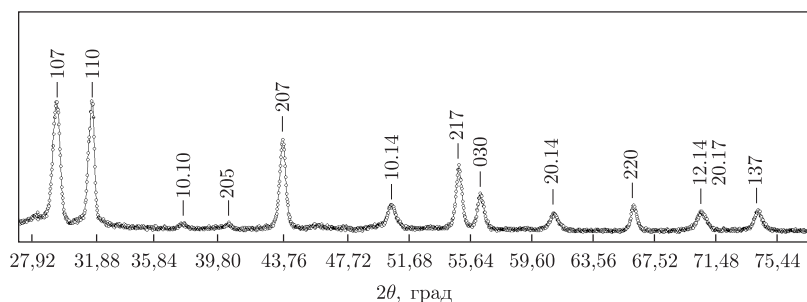


Рис. 1. Фрагмент дифракційного спектра порошків (крапки) і розрахунковий спектр (суцільна лінія) $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ (Cu $K\alpha_1$ випромінювання)

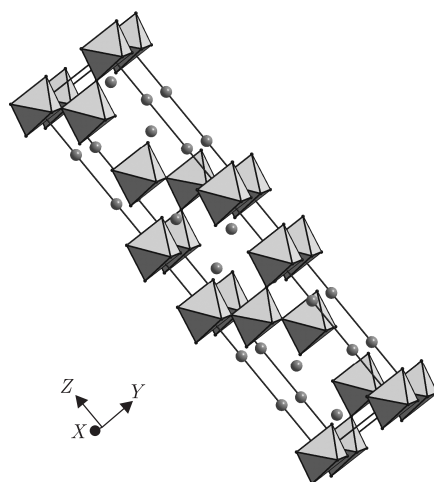


Рис. 2. Кристалічна структура $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ у вигляді октаєдрів NbO_6 та атомів Sr і La

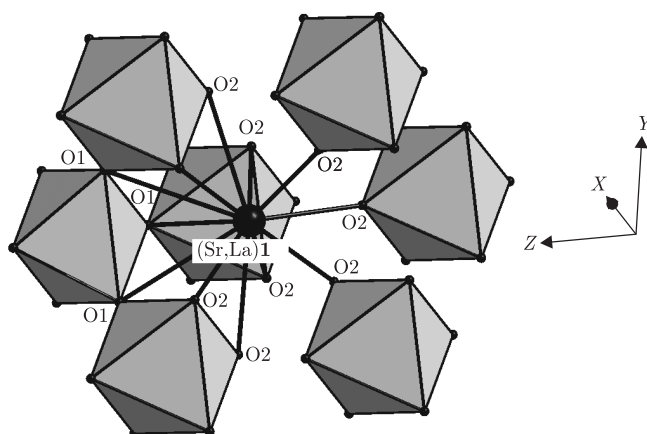


Рис. 3. Будова міжблочної границі в шаруватій перовськітоподібній структурі $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$

У ШПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ розподіл атомів Sr й La має частково упорядкований характер (на відміну від статистичного у $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$ [7]) із переважною локалізацією більших атомів стронцію на границях перовськітоподібних блоків, а атомів лантану у внутрішньоблочних кубооктаєдричних пустотах перовськітоподібного блока.

Відомо, що тенденція до упорядкування в іонних кристалах визначається в основному різницею іонних зарядів Δq і радіусів ΔR_B та електронною будовою катіонів. Оскільки розмір і заряд іона Nb^{5+} однакові з іоном Ta^{5+} , тому ці характеристики не можуть бути причиною виникнення надструктури розміщення в $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$. Це дає підстави стверджувати, що частково впорядкований характер розподілу катіонів Sr^{2+} й La^{3+} у ШПС обумовлений в основному електронною будовою катіона Nb^{5+} .

Зіставлення довжин зв'язків Nb–O та ступенів деформації октаедрів NbO_6 у ШПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ показало, що внутрішньоблочні октаедри $\text{Nb}(2)\text{O}_6$ є практично ідеальними, в той час як для зовнішньоблочних октаедрів $\text{Nb}(1)\text{O}_6$ характерна досить значна різниця у довжинах зв'язків Nb(1)–O (0,183(1) і 0,217(2) нм) та досить значна величина ступеня деформації ($\Delta\text{Nb}(1)\text{O}_6$, яка складає $72 \cdot 10^{-4}$ (див. табл. 2)). Незначна ступінь деформації внутрішньоблочних октаедрів VO_6 узагалі є характерною особливістю оксидних сполук із ШПС.

Зіставлення характеристик ШПС зразків $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, які були отримані низькотемпературною термообробкою СОГК, із такими для зразків одержаних у [4] із застосуванням високотемпературної керамічної технології синтезу, показало ряд відмінностей в будові їх тришарових ШПС (див. табл. 3).

Зокрема, в синтезованому за низьких температур $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ відсутній взаємний нахил октаедрів NbO_6 , який має місце в ШПС отриманих за керамічною технологією зразках $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ [4]. Крім того, отримані термообробкою СОГК зразки $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ характеризуються меншими розмірами внутрішньоблочних октаедрів NbO_6 , меншою деформацією як зовнішньоблочних, так і внутрішньоблочних поліедрів $(\text{Sr}, \text{La})\text{O}_{12}$. Більшою виявилась лише деформація зовнішньоблочних октаедрів NbO_6 . Слід також відзначити дещо більш статистичний характер розподілу атомів стронцію і лантану по кубооктаедричних позиціях ШПС, притаманний “низькотемпературному” $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ (див. табл. 3).

У цілому результати порівняльного аналізу дають підстави для висновку, що застосування низькотемпературного методу синтезу $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ призводить до формування менш деформованої ШПС, ніж при використанні керамічної технології його синтезу.

Причиною зафіксованих відмінностей у будові ШПС та термостабільності отриманих різними способами зразків $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ є, очевидно, істотно різні температури безпосереднього формування їх ШПС із вихідних компонентів. Вірогідний механізм впливу цього фактора розглянуто нижче.

Близький до $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ характер термічної поведінки має титанат лантану $\text{La}_{2/3}\square_{1/3}\text{TiO}_3$ зі структурою дефектного перовськіту. Зокрема, синтезований при 670–1070 К із шихти спільноосаджених гідроксидів $\text{La}_{2/3}\square_{1/3}\text{TiO}_3$ є термічно нестабільним і понад 1070 К розкладається [10]. Проте використання керамічної технології його отримання з температурами синтезу 1570–1770 К призводить до стабілізації $\text{La}_{2/3}\square_{1/3}\text{TiO}_3$, який залишається стабільним при охолодженні до кімнатної температури. Причиною стабілізації, згідно з працями [11, 12], є незначне зменшення дефектності структури $\text{La}_{2/3}\square_{1/3}\text{TiO}_3$ до рівня 29–32%, яке відбувається при високих температурах синтезу за рахунок незначного відновлення титану, утворення оксигенових вакансій та входження до складу зразка мікродомішок матеріалу тигля.

Можна припустити, що близькі механізми термостабілізації реалізуються і для $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ (у дефектній ШПС якого 25% позицій типу В вакантні), що зумовлює залежність його термостабільності від температури синтезу.

Таким чином, у даному дослідженні методом рентгеноструктурного аналізу порошку визначено кристалічну структуру ніобату $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, який синтезовано термообробкою шихти СОГК при низькій (1120 К) температурі, а також проаналізовано вплив умов синтезу $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ на особливості будови його ШПС та термостабільність.

1. *Lichtenberg F., Herrnberge A., Wiedenmann K.* Synthesis, structural, magnetic and transport properties of layered perovskite-related titanates, niobates and tantalates of the type $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$, $\text{A}^I\text{A}_{k-1}\text{B}_k\text{O}_{3k+1}$ and $\text{A}_m\text{B}_{m-1}\text{O}_{3m}$ // *Prog. in Solid State Chem.* – 2008. – **36**, No 4. – P. 253–387.
2. *Schaak R. E., Mallouk T. E.* Perovskites by design: a toolbox of solid state reactions // *Chem. Mater.* – 2002. – **14**, No 4. – P. 1455–1471.
3. *Rawal R., McQueen A. J., Gillie L. J. et al.* Influence of octahedral tilting on the microwave dielectric properties of $\text{A}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ hexagonal perovskites (A = Ba, Sr) // *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – **94**, No 19. – 192904, 3 p.
4. *Adams R. M.* Structure – composition – property relations in B – site deficient hexagonal perovskite systems: Thesis. . . . doctor of philosophy. – Huddersfield, England, 2010. – 223 p.
5. *Титов Ю. А., Слободяник Н. С., Полубинский В. В., Чумак В. В.* Механизмы образования слоистых соединений типа $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$ из систем совместноосажденных гидроксокарбонатов и гидроксидов // *Теорет. и эксперим. химия.* – 2011. – **47**, № 6. – С. 380–384.
6. *Марків В. Я., Белявіна Н. М.* Апаратно-програмний комплекс для дослідження полікристалічних речовин за їх дифракційними спектрами // *Тез. доп. Другої міжнар. конф. “Конструкційні та функціональні матеріали”.* – Львів, 1997. – С. 260–261.
7. *Антонов В. А., Арсеньев П. А., Копылова Е. К.* Кристаллическая структура $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$ // *Кристаллография.* – 1990. – **35**, № 3. – С. 630–633.
8. *Kemmler-Sack S.* Die rhomboedrischen 12 L-stapelvarianten $\text{Ba}_3\text{A}_3\text{M}_3^V\text{O}_{12}$ mit $\text{M}^V = \text{Nb, Ta}$ // *Z. anorg. allg. chem.* – 1980. – **461**. – P. 151–154.
9. *Shannon R. D.* Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and halogenides // *Acta Crystallogr.* – 1976. – **A32**, No 5. – P. 751–767.
10. *Щербакова Л. Г., Мамсурова Л. Г., Суханова Г. Е.* Титанаты редкоземельных элементов // *Успехи химии.* – 1979. – **48**, № 3. – С. 423–447.
11. *Василечко Л. О.* Кристаллохімія та фазові перетворення складних оксидів рідкісноземельних елементів зі структурою перовськіту: Дис. . . . д-ра хім. наук. – Львів, 2004. – 343 с.
12. *Skapin, S. D., Kolar D., Suvorov D.* Phase stability and equilibria in the $\text{La}_2\text{O}_3\text{–TiO}_2$ system // *J. Europ. Ceramic Soc.* – 2000. – **20**, No 8. – P. 1179–1185.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 23.01.2012

Ю. А. Титов, Н. Н. Белявіна, В. Я. Марків,
член-корреспондент НАН України **Н. С. Слободяник, В. В. Полубинский**

Кристаллическая структура $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$

Методом рентгеноструктурного анализа порошка определена слоистая перовскитоподобная структура (СПС) ниобата $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, синтезированного низкотемпературной (1120 К) термообработкой совместноосажденных гидроксокарбонатов. Установлено, что кристаллическая СПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ принадлежит к структурному типу $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$. Параметры элементарной ячейки $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$: $a = 0,5659(1)$ нм, $c = 2,7178(7)$ нм, пространственная группа $R\text{-}3m$, $R_B = 0,076$ для 152 независимых отражений. Выявлено влияние способа (температуры) синтеза на строение СПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$. Проанализированы факторы, определяющие термостабильность дефектной СПС $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$.

Y. A. Titov, N. M. Belyavina, V. Ya. Markiv,
Corresponding Member of NAS of Ukraine **M. S. Slobodyanik, V. V. Polubinsky**

Crystal structure of $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$

The layer perovskite-like structure (LPS) of niobate $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ synthesized by low-temperature (1120 K) heat treatment of co-precipitated hydroxycarbonates has been determined by X-ray powder diffraction. It is found that the crystal LPS of $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ belongs to the $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$ type. The cell constants of $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ are: $a = 0.5659(1)$ nm, $c = 2.7178(7)$ nm, space group is $R\bar{3}m$, $R_B = 0.076$ for 152 independent reflections. The influence of a method (temperature) of synthesis on the LPS of $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ has been revealed. The factors, determining the thermal stability of the defective LPS $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$, are analyzed.