

С другой стороны, известно, что соединения с общей формулой NaLnF_6 и $\text{Na}(\text{Ca}, \text{Ln})\text{F}_6$, где Ln — лантаноиды и редкие земли, в зависимости от радиуса иона Ln кристаллизуются либо в структурном типе флюорита со статистическим распределением Na , Ca , Ln , либо в гексагональной структуре типа NaNdF_6 [13] также со статистическим распределением катионов Na , Ln . Более того, для NaYbF_6 [8] обнаружено полиморфное превращение при высоком давлении из флюоритовой модификации в гексагональную

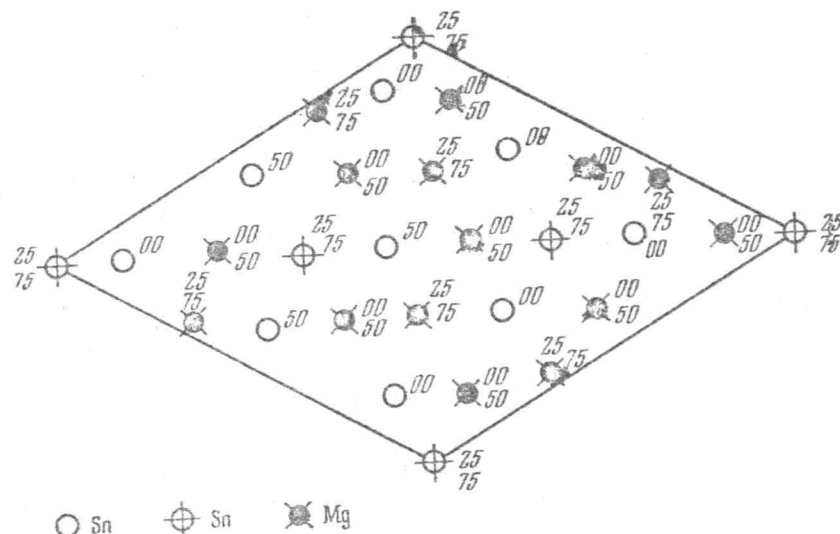


Рис. 2. Проекция вдоль оси с предполагаемой модели структуры Mg_2SnII
Темные кружки и косые кресты — атомы Mg на разных высотах, кружки и прямые кресты — атомы Sn на разных высотах

типа NaNbF_6 . Известно также, что соединения NaYF_6 [14, 15], NaHoF_6 и NaErF_6 [16] диморфны, высокотемпературные модификации этих соединений имеют флюоритовую структуру, а низкотемпературные — вышеупомянутую гексагональную.

Интересен тот факт, что по существу структура NaNdF_6 мало отличается от гексагональной структуры Fe_2P ; они были бы идентичны, если принять, что атом Na , статистически занимающий в группе P6 положение $2(h) : \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z; \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \bar{z}$ ($z = 0,656$), займет положение $1(f) : \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}$. В свою очередь структурные типы Fe_2P и PbCl_2 связаны между собой простым сдвигом.

Таким образом, существует ряд кристаллических структур с близкими мотивами расположения атомов, весьма распространенными среди интерметаллов, которые характеризуются одинаковыми координационными полиэдрами (девятивершинники), по-разному сцепленные друг с другом. На этом основании можно предположить, что полученная в работе гексагональная ячейка Mg_2SnII с параметрами $a_0 = 13,18 \pm 0,02$ и $c_0 = 6,99 \pm 0,04$ Å не является результатом случайного индифферентирования. Если в псевдогексагональной сетке атомов Ni в структуре Ni_2Si выбрать период $a_{\text{гекс}}$, как показано на рис. 1, и принять $c_{\text{гекс}} = 2c_{\text{ромб}}$, то получим параметры элементарной ячейки, близкие к приведенным выше. Однако при сохранении структурного мотива Ni_2Si элементарной ячейке должно соответствовать $z = 18$, что не согласуется с z , величина которой дает $z = 15-16$. Это условие может удовлетворяться, если кроме 9 атомов Si , которые содержит выбранная элементарная ячейка структурного мотива Ni_2Si , поместить еще 6 атомов Si вместо 6 атомов Ni , занимающих положения на ребрах (2) и на тройных осях (4). Таким образом, при удвоении $c_{\text{ромб}}$ получим 30 атомов Ni на ячейку.