

## مطالعات NMR روی $M_2Ga_6Te_{10}$

مصطفی دهقانی مبارکه\*

تهران، پژوهشگاه صنعت نفت، جاده قدیم قم، سه راه خیر آباد، صندوق پستی ۱۷۴۵-۴۱۶۳

**چکیده:** فازهای  $M_2Ga_6Te_{10}$  ( $M: Li, Na$ ) در گروه فضایی  $R_{32}$  (شماره ۱۵۵،  $Z = 2$ ) متبلور می‌شوند و پارامترهای شبکه‌ی آنها  $a = 1436.9(2)$  و  $a = 1759.0(4)$  pm برای  $Li_2Ga_6Te_{10}$  در  $T = 180K$  و  $a = 1485.0(1)$  و  $c = 1776.1(4)$  pm برای  $Na_2Ga_6Te_{10}$  در  $T = 290K$  است. ساختارهای بلوری هر دو ماده بر اساس  $\beta$ -Mn، مشابه انباشته اوتکتیک متشکل از ۲۰ اتم  $Te^{2-}$  در یک سلول شبه - مکعب هستند که ۱۲ درصد از حفره‌های چهاروجهی به وسیله  $Ga^{3+}$  پر شده و  $Li^+/Na^+$  در همه حفره‌های متاپریسم قرار گرفته‌اند. سلول واحد در شبه - مکعب ( $Z = 2$ ) برای  $M_2Ga_6Te_{10}$  محتوی ۱۰۰ حفره چهاروجهی و ۴ حفره متاپریسم است. فرض اولیه که ممکن باشد  $Li^+$  در  $Na_2Ga_6Te_{10}$  و  $Na^+$  در  $Li_2Ga_6Te_{10}$  بخشی از حفره‌های چهاروجهی را بدون نظم ویژه و به روش اتفاقی پر کنند (مشابه یون‌های بسیار متحرک  $Ag^+$  در رسانای یونی  $\alpha$ -RbAg<sub>4</sub>I<sub>5</sub>)، تایید نشد. در عوض یون‌های  $Li^+/Na^+$  مکان‌هایی را که مربوط به یون‌های غیر متحرک  $Rb^+$  در  $\alpha$ -RbAg<sub>4</sub>I<sub>5</sub> هستند را اشغال می‌کنند. اندازه‌گیری‌های MAS-NMR و به ویژه NMR چند کوانتومی (multiple quantum NMR) امکان تشخیص دو موضع متفاوت بلورشناسی  $M^+$  به وسیله سیگنال‌های تفکیک شده  ${}^7Li$  و  ${}^{23}Na$  را دادند. تشخیص درست سیگنال‌های NMR مشاهده شده، با اندازه‌گیری نمونه‌هایی که در آنها بخشی از یون‌های  $Li^+$  به وسیله کاتیون‌های بزرگ‌تر ( $Sn^{2+}, Pb^{2+}$ ) جایگزین شده بودند، تأیید شد.

**واژه‌های کلیدی:** بتا - منگنز، تلور، روییدیوم، نقره، گالیوم،  ${}^{23}Na$ ،  ${}^7Li$  NMR، ساختار بلوری.

**KEY WORDS:**  $\beta$ -Mn, Tellurium, Rubidium, Silver, Gallium, NMR spectroscopy ( ${}^7Li$ ,  ${}^{23}Na$ ), Crystal structure.

### مقدمه

اصول ساختاری فازهای بتا- منگنز پر شده شناخته شده کنونی منتهی به این فرض می‌شوند که روش‌های آزمایشگاهی مبتنی بر تجزیه شیمیایی منظم بلورها به کشف مواد جامد جدید از این نوع ختم می‌شوند.  $Li_2Ga_6Te_{10}$  و  $Na_2Ga_6Te_{10}$  ترکیب‌های مورد بحث این مقاله، مثال‌هایی هستند که در آن یون‌های ( $M: Li, Na$ ) همه حفره‌های متاپریسم را اشغال کرده‌اند.

در این مقاله جزییات مربوط به ساختار بلورهای ترکیب‌های مورد بحث، نسبت به نتیجه‌های آزمایش‌های Li-MAS-NMR و اصول ساختاری فازهای بتا- منگنز پر شده شناخته شده کنونی منتهی به این فرض می‌شوند که روش‌های آزمایشگاهی مبتنی بر تجزیه شیمیایی منظم بلورها به کشف مواد جامد جدید از این نوع ختم می‌شوند.  $Li_2Ga_6Te_{10}$  و  $Na_2Ga_6Te_{10}$  ترکیب‌های مورد بحث این مقاله، مثال‌هایی هستند که در آن یون‌های ( $M: Li, Na$ ) همه حفره‌های متاپریسم را اشغال کرده‌اند.

در این مقاله جزییات مربوط به ساختار بلورهای ترکیب‌های مورد بحث، نسبت به نتیجه‌های آزمایش‌های Li-MAS-NMR و

### بخش تجربی

#### سنتز

$Li_2Ga_6Te_{10}$  (نقطه ذوب: ۱۰۵۰ K) و  $Na_2Ga_6Te_{10}$  (نقطه ذوب: ۱۰۳۸ K) به‌طور مستقیم از عنصرها در سرنگ‌هایی از

+E-mail: modegl28@yahoo.de

\*عهده‌دار مکاتبات

رسانای یونی  $(\alpha\text{-RbAg}_6\text{I}_8)$ ، تایید نشد. در عوض یون‌های  $\text{Li}^+/\text{Na}^+$  مکان‌هایی را که مربوط به یون‌های غیر متحرک  $\text{Rb}^+$  در  $\alpha\text{-RbAg}_6\text{I}_8$  هستند اشغال می‌کنند [۲].

طیف  ${}^7\text{Li}$  و  ${}^6\text{Li}$  MAS NMR برای  $\text{Li}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  (شکل ۱) دو سیگنال به‌طور کامل مجزا را در  $d = 0.97$  و  $d = -3.45$  ppm (rel.to ext.  ${}^7\text{LiBr.H}_2\text{O}$ ) با نسبت شدت ۱:۳ و نیم پهنایی در سرعت چرخش ۱۰ kHz از ۸۷ و ۱۳۴ Hz نشان می‌دهد. تفاوت جمعیت این سیگنال‌ها، نسبت حفره‌های متاپریسم یافت شده در تجزیه با پرتو X را نشان می‌دهد و امکان انتقال آزمایشی این سیگنال را در ۰.۹۷ ppm به Li(A) و ۳.۴۵ ppm به Li(B) را فراهم می‌آورد.

در سرعت چرخش‌های پایین‌تر در هر دو طرف الگوهای بارز، نوارهای جانبی دیده می‌شوند (شکل ۲ - ب) که از آن‌ها به‌طور مستقیم، مطابق با مرجع [۲]، ثابت‌های کوپلاژ چهار قطبی  $19 \pm 2$  و  $\chi A({}^7\text{Li})$  of  $37 \pm 2$  kHz قابل استخراج هستند.

در این مقاله نشان داده شد که  $\chi$  به تفاوت فرکانس بین دو بیرونی‌ترین نوار جانبی SB، با نسبت ساده  $\chi = (2/3)I \times SB$  بستگی دارد که در آن I عدد کوانتوم اسپین هسته‌ای است و برای  ${}^7\text{Li}$  برابر ۳/۲ است. از شبیه‌سازی طیف با برنامه QUASAR [۵]،  $\chi A({}^7\text{Li}) = 19.6 \pm 0.4$  و  $\chi B({}^7\text{Li}) = 31.2 \pm 0.2$  kHz و  $\eta Q_A = 0.30 \pm 0.03$  و  $\eta Q_B = 0.41 \pm 0.02$  به دست آمد.  $\eta Q_A \neq 0$  به دست آمده نشان می‌دهد که Li(A) در مرکز متاپریسم  $\text{MP}(A)_1$  که در آن تقارن  $C_3$  به  $\eta Q = 0$  نیاز دارد، قرار ندارد. به دلیل تقارن کمتر  $\text{MP}(B)(C_2)$ ، استدلال مشابهی برای Li(B) ممکن نیست. پیشنهاد بالا به‌وسیله‌ی اندازه‌گیری MAS NMR انجام شده برای دو سیستم مدل  $\text{LiSn}_{1/5}\text{Ga}_6\text{Te}_{10}$  و  $\text{LiPb}_{1/5}\text{Ga}_6\text{Te}_{10}$  تقویت می‌شود. نتیجه‌های آزمایش‌ها با پرتو X روی  $\text{SnGa}_6\text{Te}_{10}$  و  $\text{PbGa}_6\text{Te}_{10}$  نشان می‌دهند که کاتیون‌های  $\text{Sn}^{2+}$  و  $\text{Pb}^{2+}$  ترجیحاً موقعیت‌های متاپریسم را که نسبت به Li(A) بزرگتر هستند، اشغال می‌کنند. اگر چنین چیزی برای  $\text{LiSn}_{1/5}\text{Ga}_6\text{Te}_{10}$  و  $\text{LiPb}_{1/5}\text{Ga}_6\text{Te}_{10}$  صحت داشته باشد ما تنها یک سیگنال را داریم. این نکته به‌درستی در شکل ۲ مشاهده می‌شود که شدت سیگنال برای مکان A به‌طور ناگهانی کاهش می‌یابد.

جابه‌جایی شیمیایی ppm ۳.۳۷- و ppm ۳.۳۱- به تقریب با جابه‌جایی شیمیایی سیگنال میدان بالا یافت شده برای  $\text{Li}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  یکسان است. ثابت‌های کوپلاژ چهار قطبی ۴۹ kHz

جنس کوارتز و تحت خلاء تهیه شدند [۱ و ۲].  $\text{Li}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  و  $\text{Na}_4\text{Ga}_6\text{Te}_8$  (پودر و تک بلور) مواد جامد سیاه رنگ بوده که در دمای محیط نسبت به هوا حساسیت زیادی ندارند. تک بلورهایی که برای گردآوری داده‌ها مناسب بودند روی پراش‌سنج چهار محوره به وسیله‌ی روغن مناسبی در لوله‌های موئین پرتوهای X ثابت شدند و در ۱۸۰ K (جدول ۱) اندازه‌گیری شدند [۱ و ۲].

## NMR

آزمایش‌های NMR حالت جامد به‌وسیله‌ی یک پراش‌گر ۳۰۰ Bruker MSL مجهز به مغناطیس ابر رسانا که در ۱۱۶/۵۹ MHz برای  ${}^7\text{Li}$  و در ۷۹/۴ MHz برای  ${}^{23}\text{Na}$  عمل می‌کرد، انجام شدند. مدت پالس‌های ۹۰ درجه ۳-۵ ms و تأخیر آسایش ۳۰۰ s بود.

خروجی طیف  ${}^7\text{Li}$  به رزونانس  ${}^7\text{Li}$  MAS NMR برای LiBr ارجاع داده می‌شود. نمونه‌های به‌طور کامل آسیاب شده داخل روتورهای ۴ میلی‌متر از جنس  $\text{ZrO}_2$  با کلاهک‌های KEL-F پر شدند. طیف دو بعدی سه کوانتومی (شکل ۳-ب) به‌وسیله‌ی پراش‌گر Bruker DSX-۵۰۰ با فرکانس ۲/۳ MHz برای  ${}^{23}\text{Na}$  دنباله پالس پژواکی  $t_1$ ،  $90^\circ$ ،  $t_2$ ،  $90^\circ$  [۶] ضبط و با نرم افزار استاندارد Bruker بررسی شد. طول پالس‌ها برای پالس  $90^\circ$ ، ۴ و ۱/۴ میلی ثانیه بود. پهنای جاروبی ۳/۹ kHz در  $F_1$  و ۵۶/۸ kHz در  $F_2$  بود و تأخیر آسایش ۵s، تعداد اسکن‌ها ۴۸ و سرعت چرخش ۱۴/۹ kHz بود.

## نتایج و بحث

جدول ۱ داده‌های پرتو X و پارامترهای ساختاری برای  $\text{Li}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  در دمای ۱۸۰ K را نشان می‌دهد. مجموعه‌ای از فاصله‌ها و زاویه‌های بین اتمی برای  $\text{Li}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  در جدول ۲ نشان داده شده‌اند.

ساختارهای بلوری هر دو ماده بر اساس  $\beta\text{-Mn}$ ، مشابه انباشته اوتکتیک [۹] متشکل از ۲۰ اتم  $\text{Te}^{2-}$  در یک سلول شبه - مکعب هستند که ۱۲ درصد از حفره‌های چهاروجهی به‌وسیله‌ی  $\text{Ga}^{3+}$  پر شده و  $\text{Li}^+/\text{Na}^+$  در همه حفره‌های متاپریسم قرار گرفته‌اند. سلول واحد در شبه - مکعب ( $Z=2$ ) برای  $\text{M}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  محتوی ۱۰۰ حفره چهاروجهی و ۴ حفره متاپریسم است [۸].

فرض اولیه که ممکن باشد  $\text{Li}^+$  در  $\text{Li}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  و  $\text{Na}^+$  در  $\text{Na}_4\text{Ga}_6\text{Te}_8$  بخشی از حفره‌های چهاروجهی را بدون نظم ویژه و به روش اتفاقی پرکنند (مشابه یون‌های بسیار متحرک  $\text{Ag}^+$  در

جدول ۱- داده های پرتو X و بلورشناسی برای  $Li_2Ga_6Te_{10}$  در دمای ۱۸۰ K.\*

Formula	$Li_2Ga_6Te_{10}$
Formula weight ( $g\ mol^{-1}$ )	۱۷۱۱٫۲۸
Crystal system	Trigonal
Space group	R ۳۲ (No. ۱۵۵)
Single crystal diffractometer	CAD۴, ENRAF-NONIUS
Radiation	MoKa
Lattice constants (pm) (hex.)	$a = 1436.9$ (۲) $c = 1759.0$ (۴)
(rhomb.)	$a = 1017.7$ $a = 90.9^\circ$
Volume ( $10^6\ pm^3$ ) (hex.)	۳۱۴۵ (۱)
Z (hex.)	۶
$d_{X-Ray}$ ( $gcm^{-3}$ )	۵٫۴۱۱
F(000)	۴۲۴۱
$\mu$ ( $mm^{-1}$ )	۱۶٫۱۹
Temperature ( $^\circ K$ )	۱۸۰
Crystal size ( $mm^3$ )	$0.5 \times 0.5 \times 0.7$
Scan-type	w- $2\theta$
Data range	$-17 \leq h \leq 0, 0 \leq k \leq 17, 0 \leq l \leq 24$
$2\theta$ maximum	۶۰
Number of refl. (all/independent)	۲۲۰/۱/۲۰۳۹
Observed reflections ( $I > 2.5s(I)$ )	۲۰۱۹
$R_{int}$	۰٫۰۳۲
Refined parameters	۶۶
Corrections	Lorentz, Polarization, Absorption, Exinction
Absorption correction	Empirical, $y$ -scan
Refinement program	NRCVAX [۲۳]
Min./max. transmission ratio	۰٫۰۳۴۴/۰٫۰۶۹۲
Min./max. resid. electr. dens. [ $e/10^6\ pm^3$ ]	$-2.090/1.870$
Extinction coefficient	۰٫۰۳۷(۵)
Goof	۴٫۶
$R_f$ ( $I > 2.5s(I)$ )	۰٫۰۲۶
$R_w$ (all refl.)	۰٫۰۴۱

\* Details of crystal structure investigation at  $T = 290\ K$  are available on from the Fachinformationszentrum Karlsruhe, D- 76344 Eggenstein – Leopold-shafen on quoting the depository number CSD-402881 ( $Li_2Ga_6Te_{10}$ ) and CSD – 402329 ( $Na_2Ga_6Te_{10}$ )

$$R_f = \frac{\sum ||F_o| - |F_c||}{\sum |F_o|} \quad R_w = \sqrt{\frac{\sum (w(F_o - F_c)^2)}{\sum (wF_o^2)}} \quad Goof = \sqrt{\frac{\sum (w(F_o - F_c)^2)}{n - p}}$$

$n = \text{No. of refl.}, \quad p = \text{No. of params.} \quad w = 1$

جدول ۲ - فاصله‌های بین اتمی (به درجه) و زاویه‌های بین اتمی (به pm) برای  $\text{Li}_2\text{Ga}_2\text{Te}_{10}$  در دمای  $180\text{ K}$  با مقدار انحراف از معیار در پرانتز.

$\text{Ga}1 - \text{Te}1$	۲۶۷,۶(۲)	$\text{Li(A)} - \text{Ga}2^*$	$3 \times 414 (6)$
$\text{Te}1$	۲۶۴,۸(۹)	$\text{Ga}1$	$3 \times 432 (5)$
$\text{Te}2$	۲۶۰,۱(۲)		
$\text{Te}4$	۲۵۸,۶(۴)		
$\text{Ga}2 - \text{Te}1$	۲۶۳,۴(۲)	$\text{Li(B)} - \text{Ga}1$	$2 \times 360 (2)$
$\text{Te}2$	۲۶۱,۹(۹)	$\text{Ga}2$	$2 \times 377 (2)$
$\text{Te}3$	۲۶۲,۳(۳)		
$\text{Te}5$	۲۶۵,۸(۳)		
$\text{Li(A)} - \text{Te}2^*$	$3 \times 262 (2)$	$\text{MP(A)} - \text{Te}2^{**}$	$3 \times 224$
$\text{Te}2$	$3 \times 414 (6)$		
$\text{Li(B)} - \text{Te}2$	$2 \times 302 (4)$	$\text{MP(B)} - \text{Te}2^{**}$	$2 \times 312$
$\text{Te}3$	$2 \times 311 (1)$	$\text{Te}3$	
$\text{Te}4$	$2 \times 328 (6)$	$\text{Te}4$	$2 \times 324$
$\text{Te}1 - \text{Ga}1 - \text{Te}1$	۹۷,۹(۱)	$\text{Te}1 - \text{Ga}2 - \text{Te}2$	۱۱۰,۴(۱)
$\text{Te}1 - \text{Ga}1 - \text{Te}2$	۱۱۰,۲(۱)	$\text{Te}1 - \text{Ga}2 - \text{Te}3$	۱۲۰,۰(۱)
$\text{Te}1 - \text{Ga}1 - \text{Te}4$	۱۱۵,۷(۱)	$\text{Te}1 - \text{Ga}2 - \text{Te}2$	۹۶,۵(۱)
$\text{Te}1 - \text{Ga}1 - \text{Te}2$	۱۰۴,۰(۱)	$\text{Te}1 - \text{Ga}2 - \text{Te}3$	۱۰۵,۹(۱)
$\text{Te}1 - \text{Ga}1 - \text{Te}4$	۱۱۴,۹(۲)	$\text{Te}1 - \text{Ga}2 - \text{Te}5$	۱۱۳,۷(۱)
$\text{Te}1 - \text{Ga}1 - \text{Te}4$	۱۱۲,۶(۱)	$\text{Te}1 - \text{Ga}2 - \text{Te}5$	۱۱۰,۴(۱)

\*) Split position for Li (A)

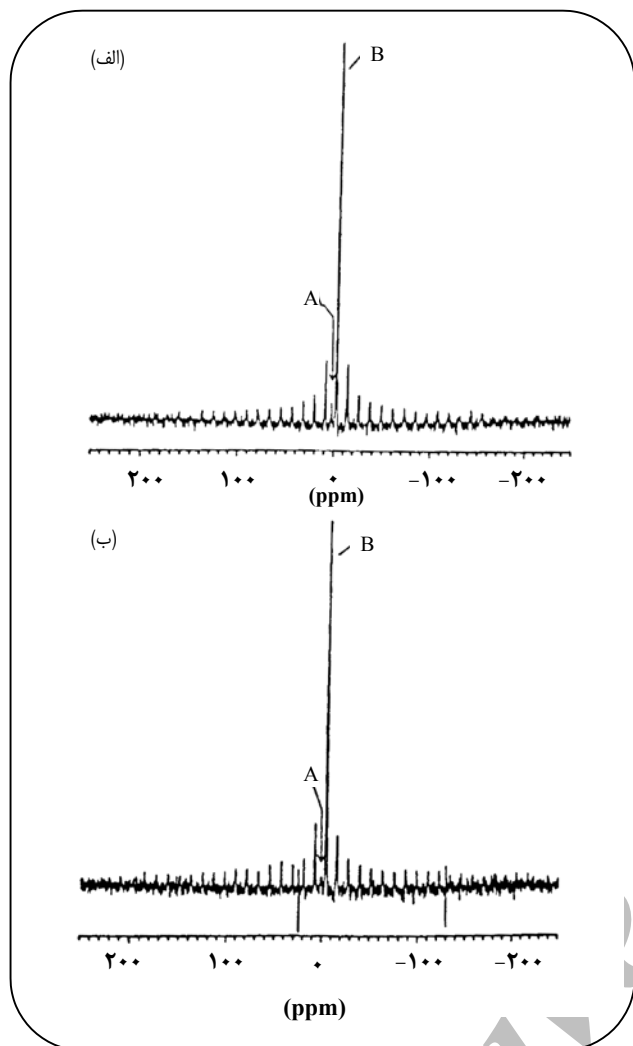
\*\*) Center position for Li (A) / Li (B) (MP: Metaprism)

انتظار در  $79.4\text{ MHz}$  برای  $\text{Na}_2\text{Ga}_2\text{Te}_{10}$  منجر می‌شود، همان‌طور که در شکل ۳ برای انتقال در مرکز نشان داده شده است.

در مقایسه با  $^7\text{Li}$  این رفتار در وهله اول نتیجه ممان چهار قطبی هسته‌ای بزرگتر  $^{23}\text{Na}$  است که  $2/5$  برابر مقدار آن برای  $^7\text{Li}$  می‌باشد. به‌علاوه پلاریزاسیون الکترون‌های درونی Na باعث افزایش گرادیان میدان خارجی می‌گردد. برای مواردی با اثرهای متقابل چهار قطبی درجه دوم،

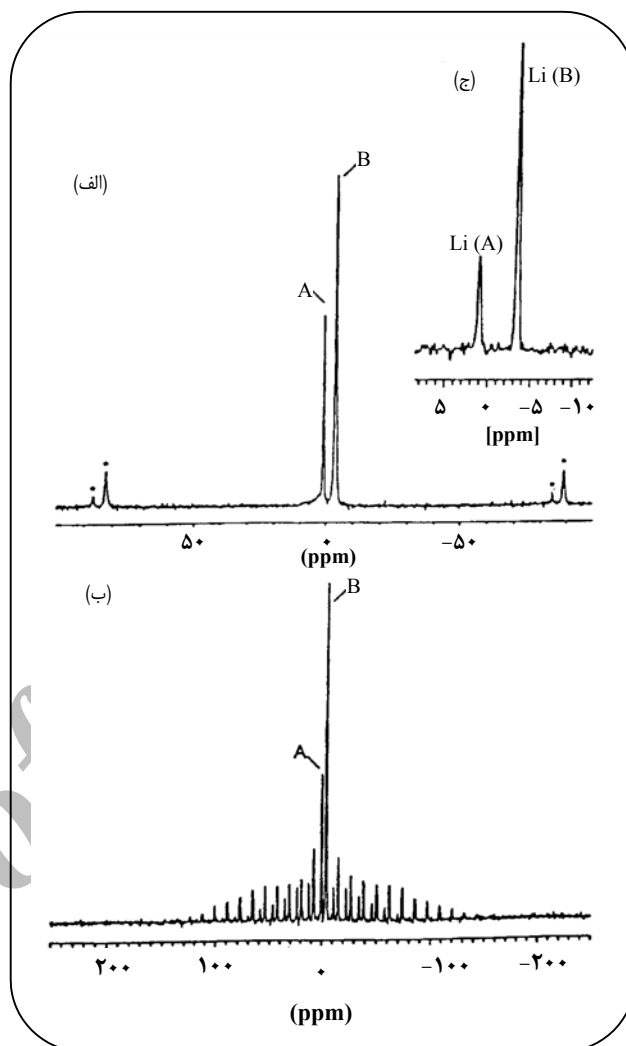
برای هر دو سیستم به وسیله‌ی تجزیه مستقیم مشاهده می‌شوند. افزایش این پارامتر ممکن است به دلیل پیچیدگی‌های ناشی از جایگزینی لیتیوم با کاتیون‌های بزرگ‌تر  $\text{Sn}^{2+}$  و  $\text{Pb}^{2+}$  باشد.

همچنین بسط بررسی‌های NMR به سیستم سدیم  $\text{Na}_2\text{Ga}_2\text{Te}_{10}$  سودمند بود. طیف MAS NMR  $^{23}\text{Na}$  از این ترکیب، پهن شدگی قابل توجه چهار قطبی درجه دوم را نشان می‌دهد که به ظاهر به یک Superposition از دو رزنانس قابل



شکل ۲ - طیف  ${}^7\text{Li}$  MAS NMR از  $116.65 \text{ MHz}$  از  $\text{LiSn}_{0.5}\text{Ga}_7\text{Te}_9$  (الف) و  $\text{LiPb}_{0.5}\text{Ga}_7\text{Te}_9$  (ب)، فرکانس چرخش  $1/4$ ،  $152$  جهش.

همسان گرد ردیابی شده افزایش می‌یابد (شکل ۳). در اینجا طیف تک کوانتومی در  $F_2$  و طیف سه کوانتومی در  $F_1$  همبسته می‌شوند و سیگنال‌های Naites منفرد با جابه‌جایی شیمیایی  $-2/1$  ppm و  $-5/1$  ppm (در مقایسه با  $\text{ext. } {}^{23}\text{NaCl}/\text{H}_2\text{O}$ ) به‌وضوح تشخیص داده می‌شوند. همچنین رزونانس‌های دیگر مربوط به غلظت‌های بسیار کم ثبت شدند. تجزیه طیف دو بعدی بر اساس رزونانس‌های طیف محور  $F_2$  انجام شد که به‌وسیله برنامه شبیه‌سازی شد. این نتیجه‌ها به‌عنوان اطلاعات لازم برای



شکل ۱ - الف - طیف  ${}^7\text{Li}$  MAS NMR از  $116.65 \text{ MHz}$  از  $\text{Li}_2\text{Ga}_7\text{Te}_9$  در دمای اتاق، فرکانس چرخش  $10$ ،  $4$  جهش، (\* نوارهای جانبی چرخشی، ب - مشابه (الف) اما فرکانس چرخش  $1/4$ ،  $128$  جهش، ج - طیف  ${}^7\text{Li}$  MAS NMR از  $\text{Li}_2\text{Ga}_7\text{Te}_9$  در دمای اتاق، فرکانس چرخش  $1$ ،  $1$  اسکن.

پارامترهای چهار قطبی به وسیله تجزیه ناهمسان گرایی جهش مرکزی قابل تعیین هستند. البته اگر خطوط درهم ادغام شده و روی هم افتاده گونه‌های مختلف را بتوان از هم‌دیگر تفکیک کرد. برای دستیابی به این هدف آزمایش MAS NMR چند کوانتومی دو بعدی انجام شد که امکان مشاهده مستقل رزونانس‌های نزدیک به هم قرار گرفته با پروب استاندارد می‌دهد. اندازه‌گیری‌ها در  $132.3 \text{ MHz}$  جدایش دو ماده را در طیف یک بعدی نشان داد که این جدایش در طیف دو بعدی به روش پژواک

شبه‌سازی خطی جهش مرکزی در طیف یک بعدی استفاده شدند که پارامترهای چهارقطبی زیر را تولید کردند:

$$\chi_A(^{23}\text{Na}) = 1/340 \pm 0/004, \chi_B(^{23}\text{Na}) = 0/950 \pm 0/004$$

$$\eta_{QA} = 0/00 \pm 0/01 \text{ و } \eta_{QB} = 0/60 \pm 0/01 \text{ MHz.}$$

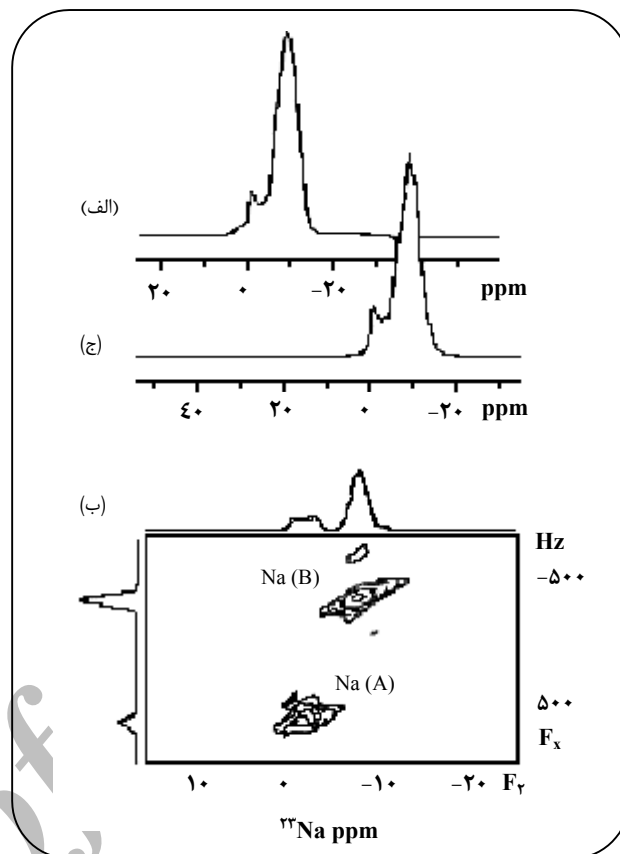
از اثرهای کوپلاژ دو قطبی و ناهمسان‌گردی شیمیایی صرف‌نظر شد. به دلیل تفاوت به نسبت کم در ثابت‌های کوپلاژ چند قطبی تشخیص بر اساس شدت نسبی دو رزونانس که به‌وسیله‌ی انتگرال‌گیری به صورت ۱ : ۳ : Na(A) : Na(B) به دست آمدند، انجام شد. مقایسه‌ای میان مقدارهای محاسباتی و آزمایشگاهی در شکل ۳ (الف تا ج) نشان داده شده‌اند.

این یافته که پارامترهای بی‌تقارنی برای سدیم مکان A صفر است، منطبق با تقارن  $C_3$  این مکان (Na(A)) می‌باشد. برای مکان دوم،  $\eta_{Q,B} \neq 0$  تقارن کمتر  $C_2$  برای متاپریسم (Na(B)) را آشکار می‌سازد. اگر این نتیجه‌ها با داده‌های  $\eta_Q$  از ترکیب لیتیوم مقایسه شوند، مشخص می‌شود که  $\text{Li}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  و  $\text{Na}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  به‌جای Isotypic فقط Homotypic هستند.

### تشکر و قدردانی

نویسنده‌ی مقاله از آقای دکتر حمیدرضا آقابزرگ و هم‌چنین Prof. H.J. Deiseroth, Prof. H. Günther, Dr. L. Kienle, Dr. M. Hartung برای کار ارزشمند آنها در خصوص ترکیب‌های نامبرده شده در این مقاله تشکر می‌کند.

تاریخ دریافت: ۱۳۳۲۷ ؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۳۲۱۴



شکل ۳- الف - جهش در مرکز از طیف  $^{23}\text{Na}$  MAS NMR  $79/4 \text{ MHz}$  از  $\text{Na}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  در دمای اتاق، فرکانس چرخشی  $10 \text{ kHz}$ ، پهنه جاروبی  $125 \text{ kHz}$ ، زمان برداشت اطلاعات  $74/1 \text{ ms}$ ، تأخیر آسایش  $10 \text{ s}$ ،  $242$  جهش، ب - طیف  $^{23}\text{Na}$  MQ MAS  $132/3 \text{ MHz}$  از  $\text{Na}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$ ، ج - جهش در مرکز محاسبه شده از طیف  $^{23}\text{Na}$  MAS NMR  $79/4 \text{ MHz}$  از  $\text{Na}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$  با استفاده از برنامه QUASAR و نتایج طیف دو بعدی (ب).

### مراجع

- [1] Deiseroth, H.J., Kienle, L., Günther, H. and Hartung, M., *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **626**, p. 302 (2000).
- [2] دهقانی مبارکه، مصطفی؛ مطالعات پرتو ایکس  $\text{M}_2\text{Ga}_6\text{Te}_8$ ، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، دوره ۲۴، شماره ۱، ص ۵۷ (۱۳۸۴).
- [3] Amoureux, J.P., Fernandèz, C. and Granger, P., NATO ASI Series-Series C, 322, pp. 409 (1990).
- [4] Skibsted, J., Nielsen, N.C., Bildsoe, H. and Jakobsen, H.J., *J. Magn. Reson.*, **95**, p. 88 (1991).
- [5] Amoureux, J.P. and Fernandèz, C., QUASAR - Solid - State NMR Simulation for Quadrupolar Nuclei, Lille, (1996).

- [6] Frydman, L. and Harwood, J.S., *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, p. 5367 (1995).
- [7] Massiot, D., Touzo, B., Trumeau, D., Magnenet, C., Mountouillout, V., Florian, P., Bessada, C., Douym, A., Coutures, J.P. and Virlet, J., Colombet, In P.; Grimmer, A.-R.; Zanni, H.; Sozzani (Eds.), P., *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy of Cement – Based Materials*, Springer, Berlin, pp. 89 (1998).
- [8] O'Keefe, M. and Andersson, S., *Acta Crystallogr.*, **A 33**, p. 914 (1977).
- [9] O'Keefe, M., *Acta Crystallogr.*, **A 33**, p. 924 (1977).

Archive of SID