

**Кристаллическая структура нового силиката-германата цезия и индия,
синтезированного гидротермально****Научный руководитель – Белоконева Елена Леонидовна*****Реутова Ольга Валерьевна****Студент (бакалавр)*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический
факультет, Москва, Россия*E-mail: reutova.olia@yandex.ru*

Германаты являются структурными аналогами наиболее распространённых в земной коре силикатов, в связи с чем смешанные соединения кремния и германия в анионных радикалах представляют интерес для изучения. Для получения кристаллов проводился гидротермальный синтез в силикатно-германатных многокомпонентных системах с тяжёлыми элементами: свинцом, висмутом, барием, индием, редкими землями, а также с различными щелочными металлами. Полученные кристаллы исследовались методами рентгендифракционного и микрорентгеноспектрального анализа. Среди них была обнаружена новая фаза с параметрами элементарной ячейки $a=13.315 \text{ \AA}$, $b=9.26 \text{ \AA}$, $c=14.922 \text{ \AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ и пространственной группой $Pnma$. Микрорентгеноспектральный анализ показал присутствие в составе Cs, In, Si и Ge. Соединение не имело аналогов в базе данных ICSD [1].

Для определения его структуры был получен экспериментальный набор интенсивностей на монокристалльном дифрактометре XCalibur. Расшифровка проводилась в программном комплексе SHELX [2] с использованием прямых методов (SHELXS). Были найдены позиции шести тяжёлых атомов, сорта которых определялись по межатомным расстояниям с атомами O, выявленными на последующих разностных синтезах. Таким образом, две позиции принадлежали атомам Cs, одна содержала In в октаэдрической координации, а три другие позиции имели тетраэдрическую координацию. Расстояния от них до атомов O были ближе к расстояниям Si-O, чем Ge-O, однако имели промежуточные значения. Состав каждой тетраэдрической позиции был определён путём варьирования соотношений Ge:Si при уточнении структуры в SHELXL. В силу симметрии пространственной группы многие базисные атомы занимали частные позиции на зеркальных плоскостях m . С учётом кратности позиций катионов и анионов и рассмотрения баланса валентных усилий, из 12-ти позиций, отвечающих атомам O, были выявлены две, отвечающие OH-группам, и одна - молекуле воды. Итоговая формула соединения, найденная в результате структурной расшифровки, электронейтральна: $\text{Cs}_2\text{In}_2(\text{Si}_{2.1}\text{Ge}_{0.9})_2\text{O}_{15}(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Число формульных единиц $Z=4$. Заключительный фактор расходимости $R=0.053$.

Новое соединение представляет собой силикато-германат с гофрированными слоями и двойкой ориентацией тетраэдров по обе плоскости слоя. Слои скреплены парами In-октаэдров в смешанный каркас, в крупных полостях которого находятся атомы Cs в двух независимых позициях с КЧ=8 и 10. Проведено сопоставление с классическими слоевыми анионными радикалами.

Автор выражает благодарность своим научным руководителям Белоконевой Е.Л. и Димитровой О.В.

Источники и литература

- 1) Inorganic Crystal Structure Data Base – ICSD. Fachinformationzentrum (FIZ) Karlsruhe. 2011. I version.

2) Sheldrick G.M. // Acta Cryst. A. 2008.V.64. P. 112.