

**Рентгенофазовая диагностика соединений, полученных в гидротермальных условиях в комплексных системах и кристаллическая структура нового силиката-германата свинца кальция с ионом щелочного металла**

**Научный руководитель – Белоконева Елена Леонидовна**

**Морозов Иван Аркадьевич**

*Студент (магистр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

*E-mail: ivan.morozov@yandex.ru*

Синтез новых неорганических соединений в гидротермальных условиях интересен тем, что таким способом могут быть получены кристаллические соединения с пиро-, сегнето-, нелинейно-оптическими и пьезоэлектрическими свойствами. В настоящее время имеется довольно обширные знания и накоплен большой материал по относительно простым системам. Поиск новых соединений в более сложных, многокомпонентных гидротермальных системах представляет интерес, и такие системы по условиям кристаллизации приближены к природным.

Был проведен анализ 34 экспериментов. Эксперименты разделялись на фазы по морфологическим признакам. Дальнейшая диагностика включала в себя определение состава полученных соединений с помощью микронзондового комплекса на базе растрового электронного микроскопа Jeol JSM-6480LV и рентгеновскими методами на монокристалльном дифрактометре XCalibur с CCD-детектором. Помимо известных ранее германатов, силикатов, фосфатов и галогенидов, была получена неизвестная фаза, информация о которой отсутствовала в базе данных ICSD [1]. Получение экспериментальных данных проводилось на том же дифрактометре, что и первичная диагностика.

Определение состава новой фазы показало присутствие атомов K, Pb, Ca, Ge, Si. Параметры ромбической ячейки:  $a = 14.0879(3)$ ,  $b = 5.9202(1)$ ,  $c = 13.0465(3)$  Å, пр. группа  $Pmn2_1$ . Кристаллическая структура определена с использованием прямых методов в программе SHELX. Для нового соединения характерен широкий изоморфизм между атомами Ge и Si, K и Pb, (OH) и H<sub>2</sub>O, и лишь три из десяти катионных позиций структуры заняты атомами Pb, K и Ca без примесей. Анионный радикал представляет собой волластонитовые трехчленные тетраэдрические цепочки, соединенные октаэдрами Pb1 в смешанный каркас, известный для K,Sc-силиката и высокотемпературной модификации K,Но-силиката. Координация свинца в позиции Pb2(Pb<sub>0.64</sub>K<sub>0.36</sub>) наподобие зонтичной с четвертой связью на молекулы воды и (OH)-группы в канале структуры говорит о неактивности неподеленной электронной пары атомов Pb. Несмотря на ацентричность кристаллов, они, по-видимому, не обладают выраженными нелинейно-оптическими свойствами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-35-00645

### Источники и литература

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