

Структура нового силикат-германата $Ba_2K_2In_2[(Si_{0.8}Ge_{0.2})_6O_{18}] \times 2H_2O$ – аналога минерала костылевита $K_4Zr_2[Si_6O_{18}] \times 2H_2O$

Научный руководитель – Белоконева Елена Леонидовна

Реутова Ольга Валерьевна

Студент (магистр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Москва, Россия

E-mail: reutova.olia@yandex.ru

Силикаты - обширный класс соединений с разнообразными комбинациями кремнекислородных тетраэдров - от изолированных группировок до сложнейших каркасов [1]. Германий - аналог кремния - как правило, изоморфно замещает его в тетраэдрических позициях. Гидротермальный синтез кристаллов в смешанных силикатно-германатных системах представляет интерес как для поиска кристаллов, обладающих важными в приложении свойствами, так и для изучения структурных особенностей смешанных соединений.

Кристаллы силикат-германата $Ba_2K_2In_2[(Si_{0.8}Ge_{0.2})_6O_{18}] \times 2H_2O$ получены гидротермальным методом из исходных компонентов $Ba(OH)_2$: $In(NO_3)_3$: SiO_2 : GeO_2 , в присутствии ионов K^+ и Cl^- при $T = 280^\circ C$ и $P \sim 100$ атм. Рентгеноспектральный анализ выявил в составе кристаллов In, Ba, K, Ge и Si. Параметры элементарной ячейки, определённые на монокристалльном дифрактометре XCalibur S, составили $a = 6.5548(6)$ Å, $b = 11.6946(10)$ Å, $c = 13.0203(11)$ Å, $\beta = 102.7738(9)^\circ$ и оказались близки параметрам костылевита $K_4Zr_2[Si_6O_{18}] \times 2H_2O$ [2], что позволило провести структурную аналогию, которая, с учётом различия составов и выбора осей, требовала подтверждения.

Трёхмерный экспериментальный набор интенсивностей получен в полной сфере обратного пространства на дифрактометре Bruker SMART APEX II. Предложена пр. гр. $P12_1/n1$ - иная установка пр. гр. $P112_1/b$ минерала-аналога костылевита. В программе SHELXS [3] с использованием прямых методов определена структурная модель, включающая общие позиции Ba, K и In с КЧ=6, и три тетраэдрические позиции Si с изоморфным вхождением в них атомов Ge. Соотношение Si:Ge было определено путём пошагового варьирования с последующим уточнением и составило 7:3, 8:2 и 9:1 соответственно. Оценка баланса валентных усилий выявила наличие в формуле молекулы H_2O . Удвоенная формула $K_2Ba_2In_2[(Si_{0.8}Ge_{0.2})_6O_{18}] \times 2H_2O$ соотносилась с формулой костылевита $K_4Zr_2[Si_6O_{18}] \times 2H_2O$. Заключительное уточнение выполнено с $R=0,0245$.

Структура нового соединения аналогична структуре костылевита. Анионный радикал в силикате-германате $Ba_2K_2In_2[(Si_{0.8}Ge_{0.2})_6O_{18}] \times 2H_2O$ представлен шестерным кольцом, сформированным тремя независимыми тетраэдрами с различным заполнением их атомами Ge и Si. Кольца объединены в каркас изолированными In-октаэдрами. В крупных овальных полостях структуры располагаются катионы Ba, координированные атомами O на расстояниях до 3.034 Å с К.Ч.=8, причем в координацию входят две молекулы воды, находящиеся в тех же полостях; в других полостях расположены атомы K с КЧ=8.

Источники и литература

- 1) Liebau F. // Structural Chemistry of silicates. Structure, Bonding, and Classification. 1985. 410 P.
- 2) Илюшин Г. Д., Хомяков А.П., Шумяцкая Н. Г., Воронков А. А., Невский Н. Н. , Илюхин В.В. , Белов Н.В. // Докл. АН СССР, 1981, Т. 256, №4, С.860–863
- 3) Sheldrick G.M. // Acta Cryst. A. 2008.V.64. P. 112.