

**Кристаллические структуры силикатов-германатов ниобия и компьютерное моделирование особенностей их строения****Научный руководитель – Белоконева Елена Леонидовна***ван Динтерен-Товстопят София Владимировна**Студент (магистр)*

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

*E-mail: tovstopyat.sofiya@mail.ru*

Исследованы новые ниобиевые соединения, полученные методом гидротермального синтеза при температуре 280 [U+0366] C и давлении 100 атм в стандартных автоклавах. Для первого соединения соотношения исходных компонентов  $Nb_2O_5 : SiO_2 : GeO_2 = 3 : 1 : 1$  и для второго  $Nb_2O_5 : Yb_2O_5 : SiO_2 = 1 : 1 : 1$ . В качестве минерализаторов в растворе присутствовали ионы  $K^+$  и  $CO_3^{2-}$  для первого и  $K^+$  и  $Cl^-$  для второго.

Состав кристаллов первого соединения был определен с помощью микронзондового комплекса на базе СЭМ JSM-IT500 и отвечал Nb, K, Si и Ge. На дифрактометре XCalibur S определены параметры моноклинной ячейки  $a=5.3$ ,  $b=9.2$ ,  $c=10.2$  Å,  $\beta=100^\circ$  и получен набор данных для дальнейшей расшифровки кристаллической структуры в программе SHELX [1]. В пр. группа  $C2$  в итоговую модель вошли атомы Nb в октаэдрической координации, Si и Ge в тетраэдрических позициях, а также атомы K. Тетраэдрические позиции заняты изоморфно Si и Ge в соотношении 0.6:0.4. Кроме одной полнозаселенной позиции в октаэдре, найдены две дополнительные, заполненные Nb на 0.04 с высоким дефицитом. Новое ниобиевое соединение с кристаллохимической формулой  $KNb_{1.16}[(Si_{0.6}Ge_{0.4})_4O_{10}](O_{0.4}OH_{0.6})$  относится к политипному семейству слюд, Исследованная Nb-слюда имеет моноклинную ячейку 1M, но отличается наличием фактически моно-октаэдрического слоя, не найденного в данном политипе ранее. В Nb-октаэдрах обнаружена пара укороченных ниобильных связей, направленных вдоль полярной оси 2 структуры. Это объясняет проявление нелинейно-оптических свойств и делает новую Nb-слюду интересным объектом в области структурной минералогии и материаловедения.

Состав второго соединения показал присутствие K, Nb, Yb и Si. Параметры ромбической ячейки  $a=13.2059$ ,  $b=5.9055$ ,  $c=13.5691$  Å и набор данных получены на дифрактометре XCalibur S. Структурный анализ, выполненный в программе SHELX в пр. гр.  $R\bar{3}m$  выявил, что структура принадлежит к исследованному ранее семейству редкоземельных силикатов с общей формулой  $K_3REE_3Si_3O_8(OH)_2$  [2]. Во всех этих соединениях атомы кремния находятся в правильных тетраэдрах, образующих триорто-группу, которая окружает REE-октаэдр и создает структурный блок. Эти блоки объединены в цепочки и слои, параллельные грани  $ab$ . Наиболее интересной особенностью новых кристаллов является изоморфное вхождение ионов  $Nb^{5+}$  в позицию, занятую ионами  $Yb^{3+}$ , что потребовало для компенсации заряда присутствия вакансии в октаэдрической позиции. Итоговая структурная формула  $K_3(Yb_{0.84}Nb_{0.16}\square_{0.06})[Si_3O_8](OH)_2$ . Для данного соединения также разработана модель межатомных потенциалов и рассчитаны некоторые физические свойства.

**Источники и литература**

- 1) Sheldrick G.M. SHELX97: Program for the Solution and Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen, Germany, 1997.

- 2) Белоконева Е. Л., Зорина А. П., Димитрова О. В. Новый каркасный водный силикат  $K_3Sc[Si_3O_9] \cdot H_2O$ , родственный высокотемпературному безводному  $K_3Ho[Si_3O_9]$ , // Кристаллография. – 2013. – Т. 58. – №. 4. – С. 585-585.