

**Кристаллическая структура нового микропорового силиката
K₉Y₃Si₁₂O₃₃·H₂O**

Топникова Анастасия Павловна

Аспирант

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

E-mail: nastya_zorina@rambler.ru

Кристаллы нового силиката K₉Y₃Si₁₂O₃₃·H₂O, пр.гр. *P*121 получены в гидротермальных условиях при температуре 260-280 °С и давлении 70-100 атм. Массовые соотношения оксидов Y₂O₃:SiO₂:B₂O₃=1:4:4, в качестве минерализаторов были взяты KI, KCl и K₂CO₃ в концентрации ~20 мас.%. На дифрактометре Xcalibur S с CCD-детектором в полной области обратного пространства получены данные для расшифровки, обработка выполнена в программе CrysAlis. Структура решена в комплексе программ SHELX с использованием прямых методов. Она оказалась близка семейству синтетических поровых силикатов, известных для всего ряда редкоземельных элементов, однако в отличие от них обладает не триклинной, а моноклинной симметрией. Как и другие представители семейства, новый силикат состоит из одноэтажных слоев, расположенных в ячейке диагонально. В слое можно выделить два типа шестерных, восьмерные и 12-ные кольца из Si-тетраэдров, связанных по вершинам. Как и редкоземельные атомы, атомы Y координированы шестью атомами кислорода и образуют изолированные и спаренные по ребру октаэдры. Атомы K⁺ и молекулы воды находятся в межслоевом пространстве, при этом первые центрируют незанятые атомами Y шестерные кольца и лежат между слоями, а вторые расположены под восьмерными окнами-кольцами. Позиция около центра восьмерных колец в новой разновидности заполнена статистически на 0.5 атомами K, позиция воды также занята наполовину.

Для структуры нового силиката (рис.2) характерна высокая псевдосимметрия, которая проявляется и в известных ранее триклинных структурах (рис.1) [1]. Плоскость *m_y* является псевдоплоскостью, характерной лишь для фрагментов L1, L2. В новой структуре она нарушается только расположением тетраэдров Si6, Si7 и их разворотом друг относительно друга, т.е. 2-мя атомами Si и 4-мя атомами O. Такое расположение тетраэдров не было встречено ранее ни в одном из членов семейства. Псевдосимметрию структуры можно описать надгруппой *P*12/*m*1 при истинной пр.гр. *P*121. Малый ионный радиус Y³⁺ по сравнению со всеми более крупными редкоземельными ионами привел к изменению симметрии от триклинной *P*-1 до моноклинной *P*2. Для указанных шести атомов, которые нарушают псевдоплоскость *m_y*, характерны смещения при уточнении, что не позволяет получить для них удовлетворительные позиционные и тепловые поправки при факторе расходимости R=0.10. Тетраэдры имеют несколько искаженные межатомные расстояния Si-O, полученные при уточнении, однако на разностных синтетах электронной плотности имеются пики, отвечающие истинным атомам O, создающим правильные Si-тетраэдры.

Источники и литература

- 1) Зорина А.П., Белоконева Е.Л., Димитрова. // Кристаллография. 2014. Т.59. No. 1, С. 41-45.

Слова благодарности

Автор выражает благодарность за помощь в работе Белоконевой Е.Л., Димитровой О.В. и Волкову А.С., Зубковой Н.В.

Иллюстрации

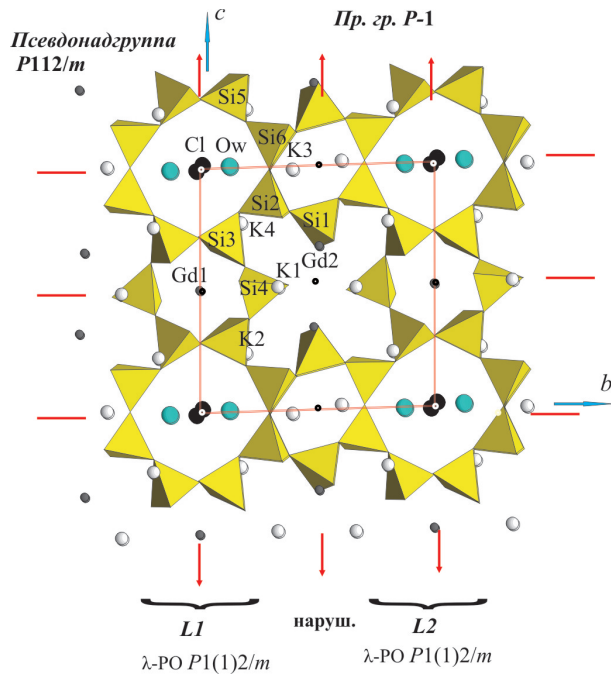


Рис. 1. Кристаллическая структура $K_8Gd_3Si_{12}O_{32}Cl \cdot 2H_2O$ в проекции bc .

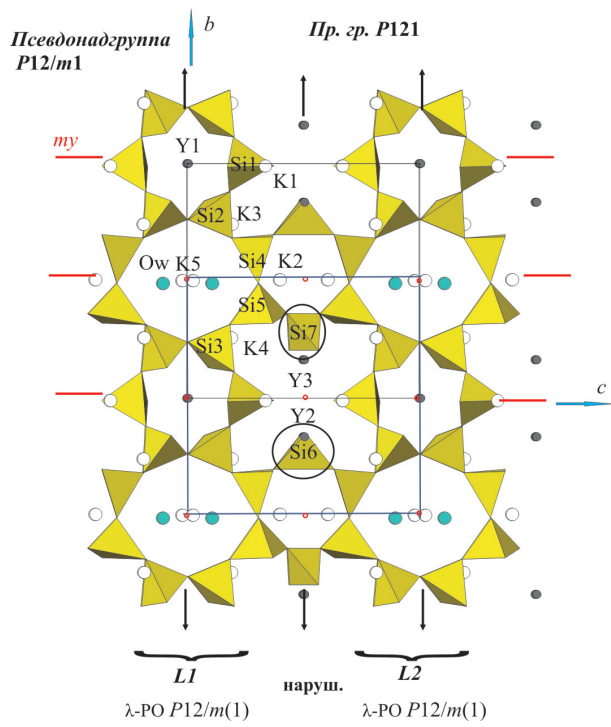


Рис. 2. Кристаллическая структура $K_9Y_3Si_{12}O_{33} \cdot H_2O$ в проекции bc .