

## Кристаллическая структура и колебательные свойства германатов с кольцевым анионом $[\text{Ge}_4\text{O}_{12}]^{8-}$

**Иван Ильич Леонидов<sup>1</sup>, Владислав Павлович Петров<sup>2</sup>, Владимир Артурович Чернышев<sup>2</sup>, Анатолий Елеферьевич Никифоров<sup>2</sup>, Эмма Гавриловна Вовкотруб<sup>3</sup>, Александр Петрович Тютюнник<sup>1</sup>, и Владимир Георгиевич Зубков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, 620990, Россия (E-mail: ivanleonidov@ihim.uran.ru)

<sup>2</sup>Уральский федеральный университет, Екатеринбург, 620002, Россия (E-mail: vladimir.chernyshev@usu.ru)

<sup>3</sup>Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, 620990, Россия (E-mail: e.vovkotrub@ihite.uran.ru)

Доклад посвящен кристаллохимическим и спектроскопическим исследованиям кальциевых германатов  $\text{Y}_2\text{CaGe}_4\text{O}_{12}$  и  $\text{Ca}_2\text{Ge}_7\text{O}_{16}$ , перспективных оптических матриц фотонных кристаллов. Слоистая структура представленных соединений характеризуется наличием изолированных кольцевых анионов  $[\text{Ge}_4\text{O}_{12}]^{8-}$ . В докладе обобщены результаты рентгеноструктурного анализа, колебательной спектроскопии и квантовохимических первопринципных расчетов в рамках теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении, включая оптимизацию геометрии решетки и расчет колебательных ИК спектров поглощения и спектров КР с использованием различных гибридных функционалов.