**SUPPLEMENTARY MATERIALS – ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ**

**Formation of the BiAl3(PO4)2(OH)6 compound with the waylandite structure under hydrothermal conditions**

**D. P. Elovikov, M. V. Tomkovich, A. A. Levin, O. V. Proskurina**

**Формирование соединения BiAl3(PO4)2(OH)6 со структурой вейлендита в гидротермальных условиях**

**Д. П. Еловиков, М. В. Томкович, А. А. Левин, О. В. Проскурина**

**Russian Journal of Inorganic Chemistry**

**Журнал неорганической химии**

****

**Fig. S1.** Graphical results of Le Bail fitting of the synthesized powder sample of waylandite BiAl3(PO4)2(OH)6 (space group *R*$\overbar{3}$*m* (166) in hexagonal axes; unit cell parameters *a* = 6.99585(3) Å, *c* = 16.1496(3) Å; weighted profile factor *Rwp* = 4.95 %, profile factor *Rp* = 3.22 %). Miller-Bravais indices *hkil* of some selected waylandite BiAl3(PO4)2(OH)6 reflections are shown. Waylandite reflections are marked with the number symbol ‘1’ in the Fig., non-indiced reflections are marked with the number symbol ‘2’. Only 9 non-indiced reflections have an intensity within 2 % - 6 % relative to the maximum intensity *I*max of the reflection 10-11 waylandite. These non-indiced reflections are indicated using letter symbol ‘i’ in the Fig.

**Рис. S1.** Графические результаты подгонки методом Ле Бойла синтезированного порошкового образца вейлендита BiAl3(PO4)2(OH)6 (пространственная группа *R*$\overbar{3}$*m* (166) в гексагональных осях; параметры гексагональной элементарной ячейки *a* = 6.99585(3) Å, *c* = 16.1496(3) Å; *Rwp* = 4.95%, профильный фактор *Rp* = 3.22%). Индексы Миллера-Браве *hkil* некоторых избранных рефлексов вейлендита BiAl3(PO4)2(OH)6 указаны. На рисунке ‚1‘ - рефлексы вейлендита, ‚2‘ - непроиндицированные рефлексы. Только 9 непроиндицированных рефлексов имеют интенсивность в пределах 2 – 6% относительно максимальной интенсивности *I*max рефлекса 10-11 вейлендита. Эти непроиндицированные рефлексы обозначены на рисунке буквенным символом ‘i’.

**Table S1.** Selected interatomic distances (Å) in waylandite BiAl3(PO4)2(OH)6 according to structure model from Table 2 of the paper.

**Таблица S1.** Избранные межатомные расстояния (Å) в вейлендите BiAl3(PO4)2(OH)6  согласно структурной модели из табл. 2.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Bi | -O2 x6 | 2.726(3) | O1 | -O2 x3 | 2.527(9) |
| -O3 x6 | 2.685(5) | -O3 x3 | 2.700(4)  |
| mean | 2.705(21) | mean | 2.614(95) |
| Al | -O2 x2 | 1.855(6) | O2 | -O1 x1 | 2.527(9) |
| -O3 x4 | 1.899(2) | -O2 x2 | 2.551(3) |
| mean | 1.884(23) | -O3 x2 | 2.575(5) |
| P | -O1 x1 | 1.500(9) |  | -O2 x2 | 2.733(8) |
| -O2 x3 | 1.573(4) | mean | 2.606(88) |
| mean | 1.555(36) | O3 | -O2 x2 | 2.575(5) |
| H | -O3 x1 | 0.78(3) | -O3 x2 | 2.681(4) |
|  | -O1 x1 | 1.92(3) | -O3 x2 | 2.691(2) |
|  |  |  | -O1 x1 | 2.700(4) |
|  |  |  | -O2 x2 | 2.733(8)  |
|  |  |  | mean | 2.673(59) |