

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ $ZnZrF_6 \cdot H_2O$ И $RbZrF_5 \cdot H_2O$ С ФТОРЦИРКОНАТНЫМИ ЦЕПОЧКАМИ И $NiZrF_6 \cdot H_2O$ С ИЗОЛИРОВАННЫМИ ФТОРЦИРКОНАТНЫМИ ОКТАЭДРАМИ

Золотарев А.А. мл.¹, Кривовичев С.В.¹, Годнева М.М.², Мотов Д.Л.²,
Яковенчук В.Н.³

¹Санкт-Петербургский государственный университет
aazolotarev@gmail.com, skrivovi@mail.ru

²Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья
им. И.В.Тананаева КНЦ РАН, Апатиты

³Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты

В данной работе приводятся результаты монокристалльного рентгеноструктурного исследования трех фторцирконатов $ZnZrF_6 \cdot H_2O$, $NiZrF_6 \cdot H_2O$ и $RbZrF_5 \cdot H_2O$, синтез которых подробно описан в работе [1].

Монокристалльная съемка отобранных для структурного анализа монокристаллов проводилась на дифрактометре STOE IPDS II, оснащенный рентгеночувствительной пластиной с оптической памятью (Image Plate). Параметры элементарной ячейки определены и уточнены методом наименьших квадратов (табл. 1). Поправка на поглощение была введена с учетом формы кристаллов. Расшифровка структуры проводилась с помощью программ SHELX [2]. Структуры соединений были решены прямыми методами и уточнены МНК (табл. 1). Окончательные модели включали координаты и анизотропные тепловые параметры для всех атомов.

Таблица 1

Кристаллографические данные $ZnZrF_6 \cdot H_2O$, $NiZrF_6 \cdot H_2O$ и $RbZrF_5 \cdot H_2O$

Соединение	Симм.	Пр. гр.	$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$\alpha, ^\circ$	$\beta, ^\circ$	$\gamma, ^\circ$	R_1
$NiZrF_6 \cdot H_2O$	Триг.	$R-3$	9.747(1)	9.747(1)	10.074(1)	90	90	120	0.023
$ZnZrF_6 \cdot H_2O$	Мон.	$C2/m$	15.509(2)	7.4732(9)	8.818(1)	90	123.838(9)	90	0.025
$RbZrF_5 \cdot H_2O$	Трикл.	$P-1$	5.341(2)	6.619(2)	7.737(2)	70.03(2)	81.76(2)	87.76(2)	0.032

Основу структуры $RbZrF_5 \cdot H_2O$ составляют фторцирконатные цепочки, образованные восьмивершинными полиэдрами $Zr(F_7Ow)$, где одну вершину занимает кислород молекулы воды. Полиэдры связаны между собой общими ребрами в одномерные цепочки зигзагообразной формы, вытянутые вдоль [100] (рис. 1). Пространство между цепочками заполняют атомы Rb.

В основе структуры $ZnZrF_6 \cdot H_2O$ лежат фторцирконатные цепочки, образованные восьмивершинниками ZrF_8 , связанными между собой через общие ребра. Цепочки фторцирконатных полиэдров имеют линейную структуру и вытянуты вдоль $[010]$ (рис. 2). Полиэдры ZrF_8 связаны через общие вершины с изолированными октаэдрами $Zn(Ow_4F_2)$, где четыре вершины заняты кислородами молекул воды, а оставшиеся две вершины заняты атомами фтора. Кроме того, в структуре присутствует внекаркасные молекулы воды.

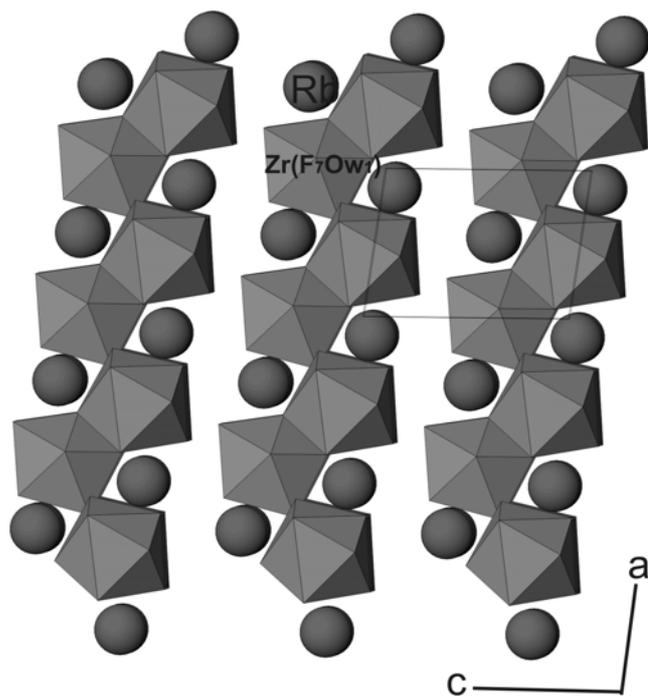


Рис. 1. Кристаллическая структура $RbZrF_5 \cdot H_2O$, проекция на плоскость (010) .

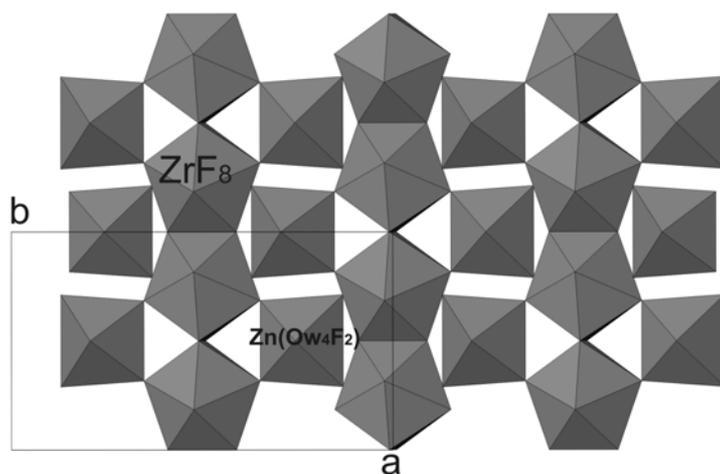


Рис. 2. Кристаллическая структура $ZnZrF_6 \cdot H_2O$, проекция на плоскость (001) .

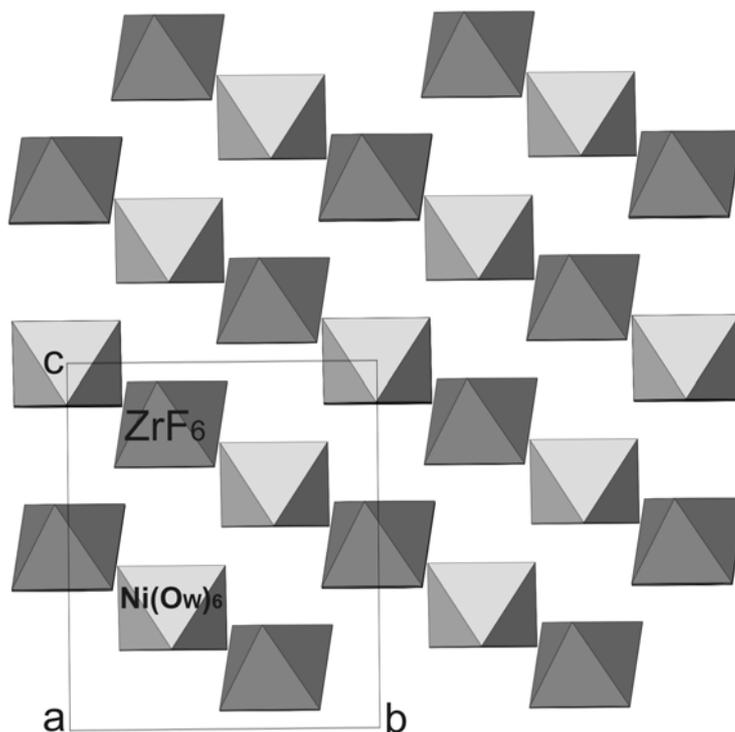


Рис. 3. Кристаллическая структура $\text{NiZrF}_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$, проекция на плоскость (100).

Структура $\text{NiZrF}_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$ образована изолированными октаэдрами ZrF_6 и NiOw_6 и является наиболее высокосимметричной из исследованных в этой работе структур (рис. 3). В октаэдрах NiOw_6 все вершины заняты кислородами молекул воды.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта для молодых кандидатов наук вузов и академических институтов, расположенных на территории Санкт-Петербурга (проект 30-04/73 «Исследование природных титаносиликатов как прототипов перспективных материалов») и гранта программы «Развитие научного потенциала высшей школы» (2.1.1.3077).

1. Годнева М.М., Мотов Д.Л. Химия подгруппы титана. Сульфаты, фториды, фторосульфаты из водных сред // М. Наука. 2006. 302 с.

2. Sheldrick G.M. SHELXL-97, Program for the refinement of crystal structures. Universität Göttingen, Germany, 1997.