

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА  $K_4Zr(SO_4)_4 \cdot 3H_2O$ 

**Золотарев А.А. мл.<sup>1</sup> (aazolotarev@gmail.com), Кривовичев С.В.<sup>1</sup> (skrivovi@mail.ru), Годнева М.М.<sup>2</sup>, Мотов Д.Л.<sup>2</sup>, Яковенчук В.Н.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет,

<sup>2</sup> Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева КНЦ РАН, <sup>3</sup> Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты

THE CRYSTAL STRUCTURE OF  $K_4Zr(SO_4)_4 \cdot 3H_2O$ 

**Zolotarev A.A. jr.<sup>1</sup> (aazolotarev@gmail.com), Krivovichev S.V.<sup>1</sup> (skrivovi@mail.ru), Godneva M.M.<sup>2</sup>, Motov D.L.<sup>2</sup>, Yakovenchuk V.N.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Saint Petersburg State University,

<sup>2</sup> I.V. Tananaev Institute of Chemistry and Technology of Rare Elements and Mineral Raw Materials, Kola Science Centre, Russian Academy of Sciences, Apatity,

<sup>3</sup> Geological Institute, Kola Science Centre, Russian Academy of Sciences, Apatity

В настоящее время известно достаточно большое количество сульфатов циркония, – как водных, так и безводных (Годнева, Мотов, 2006, Bear, Mumme, 1970). Объектом нашего структурного исследования стали монокристаллы трехводного калиевого тетрасульфата циркония  $K_4Zr(SO_4)_4 \cdot 3H_2O$ . Несмотря на то, что структуры ряда водных калиевых трисульфатов циркония известны (Кузнецов и др., 1991, Mumme, 1968 Порай-Кошиц, 1972) структура калиевого тетрасульфата циркония решена впервые. Синтез  $K_4Zr(SO_4)_4 \cdot 3H_2O$  подробно описан в монографии (Годнева, Мотов, 2006).

Монокристалльная съемка проводилась на дифрактометре Bruker Smart Apex II (MoK $\alpha$ ), оснащенном плоским детектором CCD. Исследования показали, что соединение  $K_4Zr(SO_4)_4 \cdot 3H_2O$  кристаллизуется в моноклинной сингонии, пр. гр.  $P2_1/n$ ,  $a$  15.2241(8),  $b$  7.2142(4),  $c$  17.0766(9) Å,  $\beta$  102.349(1) °. Структура была решена прямыми методами и уточнена до  $R = 0.040$  на основе 3779 симметрично независимых рефлексов. Основу структуры  $K_4Zr(SO_4)_4 \cdot 3H_2O$  составляют изолированные комплексы  $[Zr(H_2O)(SO_4)_4]^{4-}$ , образованные восьмивершинными полиэдрами  $ZrO_7(H_2O)$  (рис.). Полиэдры  $ZrO_7(H_2O)$  связаны с тремя тетраэдрами  $SO_4$  через общие ребра и еще с одним тетраэдром  $SO_4$  через общую вершину. Отрицательный заряд комплексов  $[Zr(H_2O)(SO_4)_4]^{4-}$  компенсируется наличием в структуре четырех независимых атомов К. Кроме того, в структуре имеют место две дополнительные молекулы воды, не связанные с атомами циркония. Интересно отметить, что комплекс с топологией  $[Zr(H_2O)(SO_4)_4]^{4-}$  в структуре  $K_4Zr(SO_4)_4 \cdot 3H_2O$  ранее в неорганических соединениях не наблюдался (Krivovichev, 2008).

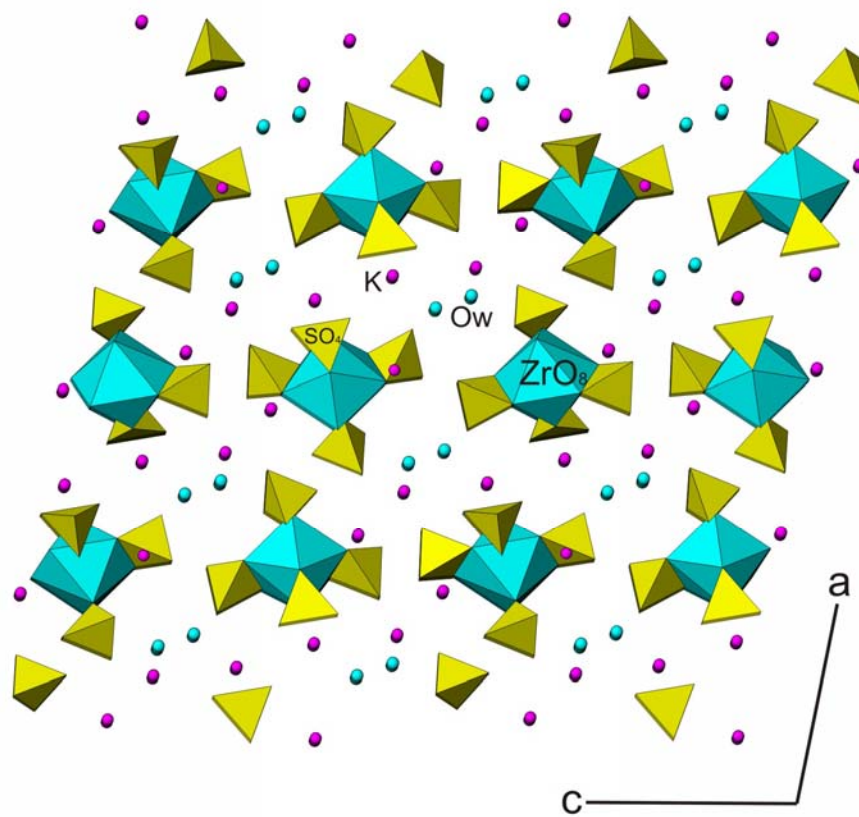


Рис. Кристаллическая структура  $K_4Zr(SO_4)_4 \cdot 3H_2O$ , проекция на плоскость (010).

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта президента РФ для молодых кандидатов наук «МК-1783.2010.5» гранта ФЦП "Научные и педагогические кадры инновационной России" (госконтракт 02.740.11.0326).*

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

*Кузнецов В.Я., Рогачев Д.Л., Гусев А.И., Чуканова Е.Б. Кристаллическая структура  $K_3ZrOH(SO_4) \cdot 3.2H_2O$ . // Кристаллография, 1991, т. 36. С. 596-599.*

*Порай-Кошиц М.А., Сокол В.И., Воротникова В.Н. Кристаллическая структура трисульфата калия и циркония. // Ж. структ. хим., 1972, т. 13. С. 874-879.*

*Bear I. J., Mumme W. G. The crystal chemistry of zirconium sulphates. VI. The structure of  $\alpha$ - $Zr(SO_4)_2$ . // Acta Crystallogr., 1970, v. B26, pp. 1140-1145.*

*Krivovichev S.V. Structural Crystallography of Inorganic Oxysalts. Oxford: Oxford University Press, 2008.*

*Mumme, W.G. The Crystal Chemistry of Zirconium Sulphates. IX. The Structure of  $K_2(Zr(SO_4)_3)(H_2O)_2$ . // Acta Crystallogr. B24, 1968, v. 38, pp. 1982.*