

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛОХИМИЯ НОВОГО МЕДНОГО  
ДИОРТОФОСФАТА РУБИДИЯ  $Rb_2Cu_3(P_2O_7)_2$ **Чернятьева А.П., Спиридонова Д.В., Кривовичев С.В.**

Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский государственный университет

SYNTHESIS AND CRYSTAL CHEMISTRY OF THE NEW COMPOUND  
 $Rb_2Cu_3(P_2O_7)_2$ **Chernyatieva A.P., Spiridonova D.V., Krivovichev S.V.**

Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University

Фосфаты переходных металлов представляют большой интерес, как в связи с их многочисленными приложениями, так и ввиду большого структурно-химического разнообразия. Особый интерес вызывают фосфаты меди как аналоги минералов, образующихся в различных условиях земной поверхности (от фумарольных полей до зон окисления рудных месторождений). Фосфаты щелочных металлов, кроме всего прочего, интересны в качестве возможных матриц для захоронения радиоактивного цезия

Кристаллы соединения  $Rb_2Cu_3(P_2O_7)_2$  получены высокотемпературной реакцией  $RbNO_3$ ,  $Cu_2(NO_3)_2$  и  $(NH_4)_4P_2O_7$ . На монокристаллах полученного соединения выполнены рентгеноструктурные исследования. Соединение  $Rb_2Cu_3(P_2O_7)_2$  кристаллизуется в ромбической сингонии, пространственной группы  $P2_12_12_1$ ,  $a = 9.9410(7)$ ,  $b = 13.4754(6)$ ,  $c = 18.6353(3)\text{\AA}$ ,  $V = 2496.4(2)\text{\AA}^3$ ,  $R_1 = 0.0748$  для 5459 независимых отражений [ $I > 2\sigma(I)$ ]. Для проведения рентгеноструктурного эксперимента был отобран кристалл размерами  $0.10 \times 0.25 \times 0.25$  мм. Эксперимент выполняли на дифрактометре STOE IPDS II оснащенный плоским детектором типа Image Plate. Параметры элементарной ячейки и матрицу ориентации определяли по 5459 отражениям и уточняли по всему массиву отражений. Уточнение поглощения проводилось в программе SHELEX-97. При этом ввиду большого коэффициента поглощения кристалла и его неправильной (осколочной) формы,  $R_{int}$  составил 0.0748.

Структура построена из анионного каркаса  $[Cu_3(P_2O_7)_2]^-$ , образующего в пространстве каналы, в полостях которого расположены катионы  $Rb^+$ , занимающие три кристаллохимически независимые позиции Rb1, Rb2, Rb3. В структуре находятся шесть позиций атомов меди, которые объединяют дифосфатные комплексы в каркас, через связи Cu - O. Координация атомов меди в структуре представлена разнообразной координацией: симметрично - квадратные полиэдры, ассиметричные полиэдры, неправильные пирамиды и октаэдрические полиэдры.

Интенсивное изучение фосфатов каркасного строения обусловлено их свойствами: высокой химической, термической и радиационной

устойчивостью, низким тепловым расширением, способностью включать в кристаллическую структуру катионы разного заряда и размера, что делает перспективной дальнейшее развитие работ по синтезу и исследованию новых фосфатов.

Согласно литературным данным, среди соединения фосфатов образованные диортогруппой ( $P_2O_7$ ), чаще встречаются слоистые структурные типы архитектур. Это двумерные слои, подобные обнаруженным в структурах  $CsNaCu(P_2O_7)$  и  $Rb_2Cu(P_2O_7)$ .

Каркас структуры можно разбить на условные слои и описать их топологию при помощи двумерных графов, в которых белые и черные вершины символизируют координационные полиэдры Р и Cu.

Помимо прикладного значения эти исследования носят также фундаментальный характер. В ходе их проведения устанавливается взаимосвязь состава и строения этих соединений, исследуются кристаллохимические закономерности.

*Работа выполнена при поддержке гранта СПбГУ 3.37.84.2011.*