

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НОВОГО СОЕДИНЕНИЯ $\text{Cs}_3(\text{Mo}_2\text{O}_7)\text{Br}$

А. С. Пахомова¹, С. В. Кривовичев²

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
¹ – a.s.pakhomova@mail.ru, ² – skrivovi@mail.ru

Молибдаты цезия представляют несомненный интерес как соединения, образующиеся в процессе окисления ядерного топлива [Mishra *et al.*, 1999]. Кристаллохимическое исследование данных веществ необходимо для изучения и моделирования процессов, сопровождающих распад нестабильных изотопов урана (U-235, U-239).

Кристаллы $\text{Cs}_3(\text{Mo}_2\text{O}_7)\text{Br}$ были получены ионотермальным методом при реакции CsNO_3 (0.192 g), MoO_3 (0.146 g) и ионной жидкости 1-этил-3-метилимидозол бромид, $(\text{C}_6\text{N}_2\text{H}_{11})\text{Br}$, (0.451 g). Синтез проводился в стальном автоклаве с тефлоновой капсулой в течение трех суток при температуре 180 °С. Полученная смесь была промыта дистиллированной водой и высушена при комнатной температуре на открытом воздухе. Среди продуктов синтеза была обнаружена новая фаза, представленная прозрачными гексагональными пластинчатыми кристаллами.

Кристаллическая структура была изучена методом монокристалльного рентгеноструктурного анализа при помощи дифрактометра STOE IPDS II, оснащенного плоским детектором рентгеновских лучей типа Imaging Plate. Соединение кристаллизуется в гексагональной сингонии, пр. гр. $P6_3/mmc$, $a = 6.3993(5)$, $c = 16.4870(15)$ Å. В структуре $\text{Cs}_3(\text{Mo}_2\text{O}_7)\text{Br}$ катионы Mo^{6+} находятся в четверной координации из атомов кислорода. Тетраэдры $(\text{MoO}_4)^{2-}$, объединяясь общими вершинами, образуют диортокомплексы $(\text{Mo}_2\text{O}_7)^{2-}$ (рис. 1). В структуре также имеют место две кристаллографические позиции атомов Cs, находящихся в сложной координации. Атомы Cs1 координированы девятью

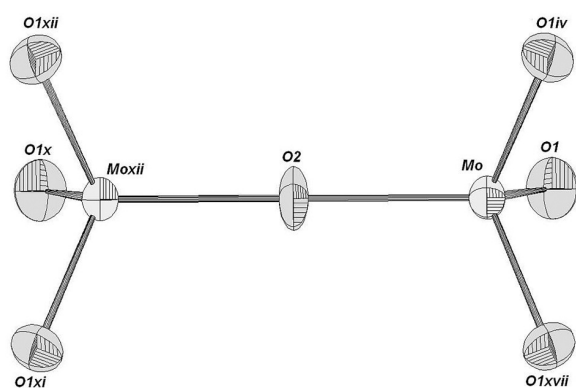


Рис. 1. Линейный диортокомплекс $(\text{Mo}_2\text{O}_7)^{2-}$.

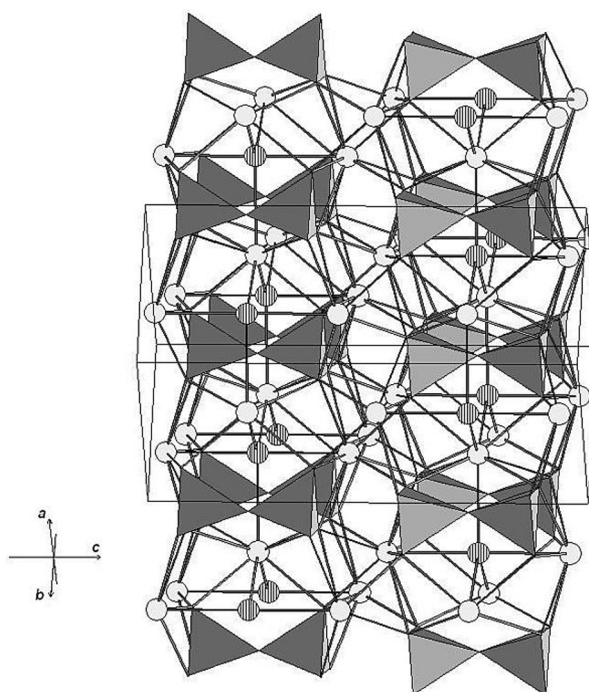


Рис. 2. Кристаллическая структура $\text{Cs}_3(\text{Mo}_2\text{O}_7)\text{Br}$. Тетраэдры MoO_4 представлены серым цветом, атомы Cs – белым, атомы Br заштрихованы.

атомами О и одним атомом Вг, в то время как атомы Cs2 координированы шестью атомами О и тремя атомами Вг. Диортокомплексы $(\text{Mo}_2\text{O}_7)^{2-}$ образуют с атомами Cs2 слои, ориентированные вдоль (001). Слои связываются между собой в трехмерный каркас через атомы Cs1 (рис. 2).

Данное соединение изоструктурно $\text{K}_3(\text{Mo}_2\text{O}_7)\text{Br}$ [Becher, Fenske, 1978].

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для молодых докторов наук (СВК, грант № МД-407.2009.5).

Литература

Becher H. J., Fenske D. Crystal and anion structure of the double salt potassium bromide – potassium dimolybdate // J. Chem. Research (Synopsis). 1978. P. 167.

Misra N. L., Chawla K. L., Venugopal V., Sood D. D. New phases of the compound $\text{Cs}_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$ // J. Alloys Compounds. 1999. Vol. 284. P. 112–116.