

КРИСТАЛІЧНА БУДОВА НОВОГО ПОДВІЙНОГО ФОСФАТУ $\text{NaMn}_6(\text{P}_3\text{O}_{10})(\text{P}_2\text{O}_7)_2$.

* Смаглий О.В., Нагорний П.Г., Слободяник М.С., Лаврик Р.В.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

*Національний аграрний університет

При дослідженні розчинності та фазоутворення оксиду мангану (III) в розплавах системи $\text{Na}_2\text{O}-\text{P}_2\text{O}_5-\text{Mn}_2\text{O}_3$ встановлено область кристалізації нового подвійного фосфату $\text{NaMn}_6(\text{P}_3\text{O}_{10})(\text{P}_2\text{O}_7)_2$. Кристалічну будову монокристалів сполуки встановлено методом повного рентгеноструктурного аналізу. Рентгеноструктурні дослідження проведено на дифрактометрі "Siemens P3/PC" в молібденовому випромінюванні з графітовим монохроматором. Розшифровка і уточнення параметрів структури виконані при використанні комплексу програм "SHELX-97". Основні кристалографічні характеристики структури сполуки $\text{NaMn}_6(\text{P}_3\text{O}_{10})(\text{P}_2\text{O}_7)_2$: моноклинна сингонія, пр.гр. $P2_1/m$, $a=5,350(6)$ Å, $b=26,643(5)$ Å, $c=6,566(1)$ Å, $\beta=107,25^\circ$; $Z=2$.

В основі кристалічної структури фосфату $\text{NaMn}_6(\text{P}_3\text{O}_{10})(\text{P}_2\text{O}_7)_2$ лежить каркас, побудований з ланцюжків октаедрів $[\text{MnO}_6]$, з'єднаних ребрами, та тетраедрів $[\text{PO}_4]$, об'єднаних в $[\text{P}_2\text{O}_7]$ та $[\text{P}_3\text{O}_{10}]$ групи. У порожнинах каркасу знаходяться атоми натрію і утворюють поліедри $[\text{MO}_{10}]$, у яких відстані $\text{M}-\text{O}$ лежать в інтервалі 2,738-3,220 Å.

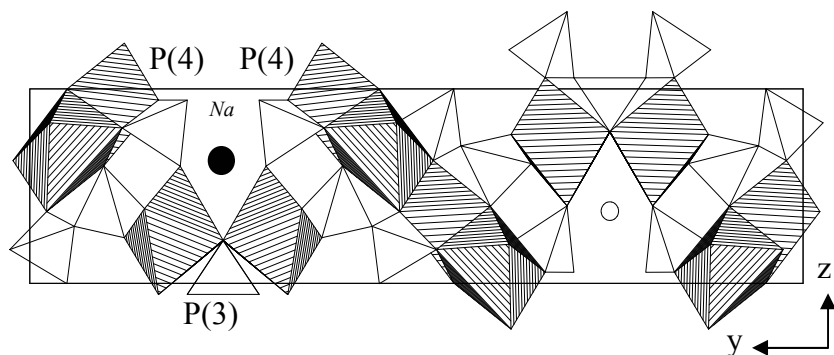


Рис. 1. Проекція структури $\text{NaMn}_6\text{P}_7\text{O}_{24}$ на площину yz

Елементарна ланка ланцюжка (рис.1) складається з трьох деформованих октаедрів, у яких довжина зв'язків $\text{Mn}-\text{O}$ лежить в межах 2,090-2,441 Å. Октаедри $\text{Mn}(1)$ та $\text{Mn}(2)$ з'єднуються через ребро $\text{O}(2)-\text{O}(12)$, утворене екваторіальними атомами, тоді як поліедри $\text{Mn}(2)$ і $\text{Mn}(3)$ об'єднуються через ребро $\text{O}(5)-\text{O}(3)$, утворене екваторіальним і аксіальним атомами. Через елементарну решітку вздовж осі ou проходять два "хвилеподібних" ланцюжки октаедрів з періодом повторюваності рівним 12. Групи $[\text{P}_2\text{O}_7]$ складаються з тетраедрів $\text{P}(1)$ та $\text{P}(2)$, об'єднаних через атом $\text{O}(4)$; довжина зв'язків $\text{P}-\text{O}$ в поліедрах лежить в інтервалі 1,490-1,593 Å. Тетраедри $\text{P}(3)$, $\text{P}(4)$ та $\text{P}(4)'$ об'єднуються через атоми $\text{O}(8)$ та $\text{O}(10)$ і утворюють групи $[\text{P}_3\text{O}_{10}]$, у яких довжина зв'язків $\text{P}-\text{O}$ лежить в межах 1,498-1,566 Å.