



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ УКРАЇНИ  
ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ

ГЕОМЕТРИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ  
ІНЖЕНЕРНА ТА КОМП'ЮТЕРНА ГРАФІКА

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ  
ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-МЕТОДИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ  
м. Харків, ХПІ  
21—23 вересня 1993 р.

ХАРКІВ 1993

УДК 515.2:784

ГРАФІЧНЕ ЗОБРАЖЕННЯ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ ОКТАЦІАНІДНИХ КОМПЛЕКСІВ ВОЛЬФРАМУ (IV), ЯК ЗАСІБ ІХ ІНТЕРПРЕТАЦІЇ.

Ковбашин В.І., Милих М.П., Куц В.П., Балабан С.М., Пік А.І.  
Рассказов Ю.С., Кіцак В.А.

Тернопільський приладобудівний Інститут

Із літератури відомо, що восьмивершинні комплекси частіше мають форму трьох споріднених координаційних поліедрів: додекаедра, тетрагональної антипризми і "двошпалочної" тригональної призми.

Додекаедрична будова виявлена в синтезованих нами ціанокомплексах  $NH_4K_3[W(CN)_8] \cdot 2H_2O$ ,  $K_3[W(CN)_7NH_3]$ ,  $K_3[W(CN)_7H_2O] \cdot 1,5H_2O$ , які ізоструктурні із координаційним ціанідом  $K_4[W(CN)_8] \cdot 2H_2O$  відомим із літератури.

Кристалічна будова вказаних сполук вивчена методом рентгеноструктурного аналізу. Одержані рентгеноструктурні дані, які опрацьовані нами на ЕВМ з використанням програм кристалографічного аналізу, дозволили визначити координати атомів, довжину зв'язків, величину валентних кутів в структурах приведених комплексних сполук. Встановлено, що відстані  $W-C$  і  $C \equiv N$ , мало змінюються при заміні однієї ціаногрупи на ліганди  $H_2O$  і  $NH_3$ , а відхилення кутів від лінійності для  $W-CN$  груп складає  $2^\circ + 6^\circ$ . Це добре видно із графічного зображення елементарних комірок, та укладок координаційних багатогранників центрального атома синтезованих сполук. Графічна побудова проєкцій елементарних комірок кристалічної структури сполук дозволяє наглядно показати будову, укладку координаційних багатогранників, довжину зв'язків, величину валентних кутів, а також деякі закономірності зміни вказаних параметрів при переході від ціанокомплекса  $NH_4K_3[W(CN)_8] \cdot 2H_2O$  до ціанокомплексів  $K_3[W(CN)_7NH_3]$  і  $K_3[W(CN)_7H_2O] \cdot 1,5H_2O$ . Графічне зображення будови цих сполук показало, що введення на місце восьмої ціаногрупи лігандів  $NH_3$  і  $H_2O$  істотно не впливає на геометрію аніона, який в усіх сполуках має додекаедричну будову.

23\*