

УДК 512.2:546.267'774

Лаврентій О. – ст. гр. КТ-11

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

**ГРАФІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ
КООРДИНАЦІЙНИХ ЦІАНІДІВ ВОЛЬФРАМУ (IV) ЗАГАЛЬНОГО
СКЛАДУ $\text{Kat}_3[\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Kat}=\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Cs}^+$)**

Науковий керівник: к.х.н., доцент Ковбашин В.І.

Lavrentiy O.

Ternopil Ivan Puluj National Technical University

**GRAPHICAL SIMULATION OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF
TUNGSTEN (IV) COORDINATION CYANIDES OF THE GENERAL
COMPOSITION $\text{Kat}_3[\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Kat}=\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Cs}^+$)**

Supervisor: Ph.D., Assoc. Prof. Kovbashyn V.I.

Ключові слова: координаційні ціаніди вольфраму (IV), кристалічна структура

Keywords: coordination cyanides of tungsten (IV), crystal structure

В [1] описана кристалічна структура акводіоксотриціановольфрамата (IV) рубідія $\text{Rb}_3[\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$. Однак, виділити монокристали інших представників цієї сполуки, а саме $\text{Kat}_3[\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Kat}=\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Cs}^+$), з метою вивчення їх кристалічної структури, не вдалося. Тому цікавим було промоделювати засобами машинної графіки їх теоретично можливу будову.

За вихідну модель служила відома октаедрична структура ціанокомплексу $\text{Rb}_3[\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$. Засобами машинної графіки з використанням графічного пакету SolidWorks нами створювались каркасні моделі можливих структур акводіоксотриціановольфраматів (IV) в залежності від виду зовнішньосферного катіону. Каркасні моделі створювались з врахуванням можливих віддалей зв'язків та валентних кутів, характерних для діоксоціанідних комплексів. Об'ємні (твердотільні) моделі будувались у вигляді багатогранників з використанням інструментів SolidWorks. Спочатку створювались двомірні профілі граней за допомогою інструментів Ескізу, а на їхній основі створювались просторові елементи багатогранників та формувалась твердотільні моделі. Твердотільні моделі дають можливість бажаної орієнтації багатогранників і оцінити величини зв'язків та валентних кутів візуально на довільній площині проєкцій.

Графічне моделювання координаційних ціанідів вольфраму (IV) загального складу $\text{Kat}_3[\text{WO}_2(\text{CN})_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Kat}=\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{Cs}^+$) засобами графічного пакету SolidWorks показало, що можливий вплив зовнішньосферного катіону на деформацію октаедричної будови наведених вище ціанокомплексів зростає із збільшенням їх радіусу, тобто від Li^+ до Cs^+ .

Бібліографія:

1. Ковбашин В.І., Милик М.П. Синтез и исследование акводіоксотриціановольфрамата (IV) рубідія // Журнал неорганической химии. – 1992. -№8. – с. 1828 – 1829.