**Синтез и кристаллическая структура нового тройного сульфата гуанидиния – железа (II, III) и его аналога путем замещения Fe(II) на Zn**

***Иванов С.А.,1 Горбачевская Д.А.2***

*1Студент, 2 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

*2Санкт-Петербургский государственный университет, геологический факультет, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail: simonivanov585@gmail.com*

Катионы гуанидиния нередко являются образующим элементов нецентросимметричных структур, в частности среди сложных сульфатов, часть из которых обладает высокой нелинейно-оптической активностью.

В настоящей работе получен и структурно охарактеризован новый тройной сульфат гуанидиния – железа состава (CN3H6)FeIIFeIII(SO4)3⋅3H2O (**1**). Черные гексагональные пластинки размером до 1 мм выросли при изотермическом испарении раствора, содержащего сульфаты гуанидиния и железа (II) в 20% растворе серной кислоты. По всей видимости, имеет место частичное окисление FeII до FeIII кислородом воздуха. Поиск изоструктурных аналогов в аналогичных условиях оказался успешным при частичной замене Fe2+ на Zn2+ с образованием (CN3H6)[(Zn0.8Fe0.2)IIFeIII(SO4)3].3H2O (**2**). Оба соединения кристаллизуются в нецентросимметричной группе *P*63 с параметрами элементарных ячеек *a* = 9.1976(5) Å, *c* = 9.1060(6) Å, V = 667.13(8) Å3 (**1**) и *a* = 9.1468(6) Å, *c* =9.0789(5) Å, V = 657.81(9) Å3 **(2)** Кристаллическая структура **1** представлена на Рис. 1.

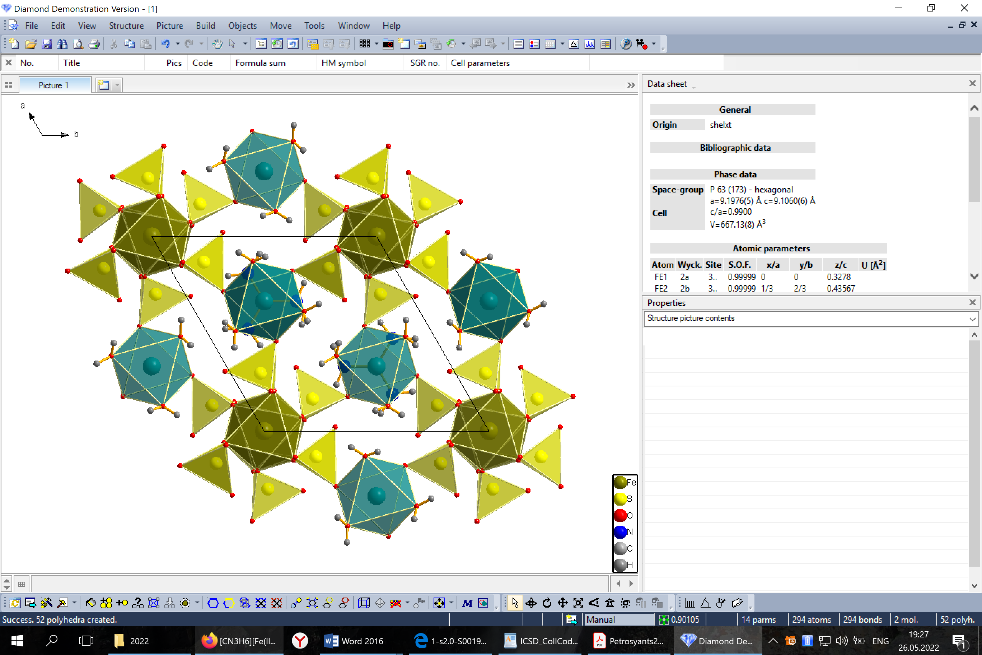


Рис.1. Структура нового тройного сульфата (CN3H6)FeIIFeIII(SO4)3⋅3H2O

В кристаллической структуре **1** атомы железа занимают две кристаллографически независимые позиции. Обе позиции характеризуются октаэдрическим окружением из атомов кислорода, но характер этого окружения различен. Атомы железа в позиции 2*а* окружены только атомами кислорода, входящими в состав сульфатных анионов. Расстояния Fe–O составляют 1.974(3)Å (×3) и 2.016Å (×3), что хорошо соответствует FeIII. Атомы железа в позиции 2*b* окружены тремя атомами кислорода молекул воды и тремя – сульфатных групп. Расстояния Fe – O составляют 2.118(2)Å (×3) и 2.156(3)Å (×3), что хорошо соответствует FeII. Таким образом, в структуре полученного соединения имеется упорядочение катионов железа в разных степенях окисления, однако их присутствие в одной структуре может привести к обмену через сульфатную группу и частичному переносу заряда, чем мы объясняем интенсивную окраску нового соединения. В пользу этого предположения свидетельствует и практическое отсутствие окраски у соединения **2**, в структуре кoторого позиция 2*b* преимущественно заселена катионами Zn2+, для которых обменные взаимодействия невозможны.