

ІЧ СПЕКТРОСКОПІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ КОБАЛЬТУ(II) ГІДРОГЕНФОСФАТУ

Козачук Т. В., *Коречко С. А.*, Антрапцева Н. М.

Національний університет біоресурсів і природокористування України, Київ, Україна
aspirant_nubipu@ukr.net

Відомості про спектральні характеристики $\text{CoHPO}_4 \cdot 1,5\text{H}_2\text{O}$ досить обмежені оскільки дані про його кристалічну структуру в літературі відсутні.

Мета даної роботи – виконати ІЧ спектроскопічні дослідження $\text{CoHPO}_4 \cdot 1,5\text{H}_2\text{O}$ з конкретизацією протонвісних груп і отриманням даних про його структурні особливості.

$\text{CoHPO}_4 \cdot 1,5\text{H}_2\text{O}$ синтезували взаємодією кобальту(II) гідрокарбонату ($\text{CoO} - 69.93 \text{ мас. \%}$) з 55 %-ним розчином H_3PO_4 при рН 2,8 і 50 °С.

ІЧ спектри записували при 20 °С і –190 °С в діапазоні 400–4000 см^{-1} на спектрометрі Nexus – 470 із Фур'є перетворенням і програмним забезпеченням Omnic. Зразки готували пресуванням фіксованої наважки (0,05 мас. %) в матрицю КВг. Крім того, використовували суспензію гідрогенфосфату в бутиловому спирті, нанесену на нейтральну флюоритову підложку.

Згідно з отриманими даними, в ІЧ спектрі гідрогенфосфату, записаному при 20 °С, в області валентних коливань ОН-груп (3000–3600 см^{-1}) і деформаційних коливань молекул води (1550–1750 см^{-1}) фіксуються по дві смуги поглинання. В діапазоні 1900–2800 см^{-1} реєструється набір смуг поглинання притаманний смугам типу А, В і С, характерним для спектрів солей, що містять протоновані аніони. В області скелетних коливань аніона (400–1400 см^{-1}) спостерігаються дві смуги 1360 і 880 см^{-1} та три групи смуг поглинання в діапазонах 1080–980 см^{-1} , 750–720 см^{-1} і 580–510 см^{-1} .

Зниження температури не вносить принципових відмінностей в характер спектральних кривих. В області коливань $\nu(\text{OH})$ і $\delta(\text{H}_2\text{O})$ в ІЧ спектрах, записаних при –190 °С, спостерігаються по дві смуги поглинання, інтенсивність яких збільшується у порівнянні з аналогічними смугами в спектрах, одержаних при 20 °С. Смуги типу А, В, С при –190 °С стають більш чіткими, збільшується їх інтенсивність.

В діапазоні коливань фосфатного аніона пониження температури призводить до перерозподілу інтенсивностей смуг 1360, 1040 см^{-1} і груп смуг 750–720 см^{-1} , 580–510 см^{-1} в бік збільшення інтенсивностей низькочастотних ліній. За спектральним положенням максимумів цих смуг поглинання, термочутливості смуг, пов'язаних з коливаннями протонвісних груп, їх можна співвіднести з коливаннями протонованого аніона: деформаційними в площині $\delta(\text{PON}) - 1360 \text{ см}^{-1}$, асиметричними валентними коливання $\nu_{\text{as}} - 1040 \text{ см}^{-1}$, деформаційними позаплощинними $\gamma(\text{PON}) - 750, 720 \text{ см}^{-1}$ і симетричними деформаційними коливаннями $\delta(\text{O}_3\text{PO}) - 580, 530 \text{ і } 510 \text{ см}^{-1}$.

Аналіз ІЧ спектрів свідчить про те, що в структурі $\text{CoHPO}_4 \cdot 1,5\text{H}_2\text{O}$ існують два види кристалографічно неідентичних молекул води, які входять до координаційного оточення катіона. На це вказують дві смуги $\delta(\text{H}_2\text{O}) - 1630 \text{ і } 1580 \text{ см}^{-1}$, присутність яких в ІЧ спектрі вважається ідентифікаційною ознакою наявності в кристалогідраті молекули води як цілого. Про це свідчить й різниця в значеннях максимумів смуг $\nu(\text{OH})$, яка досягає 210 см^{-1} . Це дає підставу розглядати коливання кожної з двох ОН-груп однієї й тієї ж молекули води як незалежні один від одного і вважати, що вони приймають участь в утворенні різних за міцністю і напрямленістю Н-зв'язків. Відсутність суттєвих змін в області $\delta(\text{H}_2\text{O})$ в спектрі, отриманому при –190 °С, а також збільшене значення їх частоти (1630 см^{-1} у порівнянні з частотою коливань вільної молекули води –1595 см^{-1}) свідчать про існування в структурі $\text{CoHPO}_4 \cdot 1,5\text{H}_2\text{O}$ жорсткої системи водневих зв'язків.