

## ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ИЗОМЕРИЯ В НОВЫХ СЕЛЕНАТАХ УРАНИЛА

**Ковругин В.М.** ([kovrugin\\_vm@hotmail.com](mailto:kovrugin_vm@hotmail.com)), **Гуржий В.В.**  
**(vladgeo17@mail.ru)**, **Кривовичев С.В.** ([skrivovi@mail.ru](mailto:skrivovi@mail.ru))

Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский государственный университет

## GEOMETRICAL ISOMERISM IN NEW URANYL SELENATES

**Kovrugin V.M.** ([kovrugin\\_vm@hotmail.com](mailto:kovrugin_vm@hotmail.com)), **Gurzhiy V.V.**,  
**(vladgeo17@mail.ru)**, **Krivovichev S.V.** ([skrivovi@mail.ru](mailto:skrivovi@mail.ru))

Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University

В рамках работы по изучению фазообразования уранил-селенатов с органическими катионами из водных растворов была исследована система  $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SeO}_4 - \text{CH}_3\text{NH}_2$ . Методом испарения из водных растворов при комнатной температуре были синтезированы новые селенаты уранила с протонированными молекулами метиламина:  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2(\text{H}_3\text{O})_2[(\text{UO}_2)_3(\text{SeO}_4)_5]$  **(I)**,  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)(\text{H}_5\text{O}_2)(\text{H}_3\text{O})_2[(\text{UO}_2)_3(\text{SeO}_4)_5](\text{H}_2\text{O})_4$  **(II)**,  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_4(\text{H}_3\text{O})_2[(\text{UO}_2)_5(\text{SeO}_4)_8(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})_4$  **(III)** и  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_{1.5}(\text{H}_3\text{O})_3(\text{H}_5\text{O}_2)_{1.5}[(\text{UO}_2)_5(\text{SeO}_4)_8(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{SeO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_2$  **(IV)**. Кристаллические структуры решены прямыми методами: **(I)** ромб., пр. гр.  $Pnna$ ,  $a = 16.4221(14) \text{ \AA}$ ,  $b = 18.4773(9) \text{ \AA}$ ,  $c = 10.3602(5) \text{ \AA}$ ,  $V = 3143.7(3) \text{ \AA}^3$ . Кристаллическая структура уточнена до  $R_1 = 0.060$  для 2456 рефлексов с  $|F_0| \geq 4\sigma_F$ . Соединение **(II)** имеет ромбическую симметрию,  $Ibca$ ,  $a = 20.956(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 34.767(8) \text{ \AA}$ ,  $c = 18.663(2) \text{ \AA}$ ,  $V = 2051.9(3) \text{ \AA}^3$ . Кристаллическая структура уточнена до  $R_1 = 0.108$  для 5553 рефлексов с  $|F_0| \geq 4\sigma_F$ . Соединение **(III)** имеет ромбическую симметрию,  $Pca2_1$ ,  $a = 31.505(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 10.3688(6) \text{ \AA}$ ,  $c = 16.2424(11) \text{ \AA}$ ,  $V = 5305.9(6) \text{ \AA}^3$ . Кристаллическая структура уточнена до  $R_1 = 0.085$  для 8552 рефлексов с  $|F_0| \geq 4\sigma_F$ . Соединение **(IV)** имеет ромбическую симметрию,  $Pnma$ ,  $a = 30.9728(19) \text{ \AA}$ ,  $b = 37.022(2) \text{ \AA}$ ,  $c = 10.4171(5) \text{ \AA}$ ,  $V = 11945.0(11) \text{ \AA}^3$ . Кристаллическая структура уточнена до  $R_1 = 0.089$  для 5853 рефлексов с  $|F_0| \geq 4\sigma_F$ .

В основе структур лежат слоистые уранил-селенатные комплексы с различным соотношением  $\text{U}:\text{Se} = 3:5$  **(I)** и **(II)**,  $5:8$  **(III)** и **(IV)**, образованные объединением пентагональных бипирамид уранила и селенатных тетраэдров. Между слоями расположены протонированные метиламинные катионы  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)^+$ , катионы  $(\text{H}_3\text{O})^+$  и  $(\text{H}_5\text{O}_2)^+$ , электронейтральные молекулы  $(\text{H}_2\text{SeO}_4)$  и молекулы воды  $(\text{H}_2\text{O})$ .

Определены топологические типы слоистых комплексов в структурах полученных соединений. Топология двумерных уранил-селенатных комплексов в соединениях **(I)** и **(II)** относится к типу **I3/5b**. Топология уранил-селенатных

слоев в соединениях (III) и (IV) относится к типу **15/8b**, которая впервые отмечена для селенатов уранила.

Обнаружена и описана геометрическая изомерия двумерных комплексов в структурах полученных соединений. С целью идентификации и классификации изомеров использован подход, предложенный в работе (Krivovichev, 2004), основанный на использовании ориентационной матрицы. Обнаруженные различия, охарактеризованные при помощи теории геометрической изомерии структурных комплексов, могут быть связаны с селективной гидратацией уранильных полиэдров и системой ориентировки тетраэдров внутри слоев.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 10-03-90731-моб\_ст и гранта Президента РФ для молодых докторов наук (МД-407.2009.5).*

*Krivovichev S.V. Combinational topology of salts of inorganic oxoacids: zero-, one- and twodimensional units with corner-sharing between coordination polyhedra. // Crystallogr. Rev., 2004, v. 10, pp. 185-232.*