

## СИНТЕЗ И СТРУКТУРА НОВОГО ГИДРОСЕЛЕНАТА НАТРИЯ

**Гуржий В.В. (vladgeo17@mail.ru), Кривовичев С.В. (skrivovi@mail.ru)**

Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский государственный университет

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A NEW SODIUM HYDROSELENATE

**Gurzhiy V.V. (vladgeo17@mail.ru), Krivovichev S.V. (skrivovi@mail.ru)**

Saint Petersburg branch. SPbSU

Монокристаллы  $\text{Na}_3(\text{SeO}_4)(\text{HSeO}_4)$  получены методом изотермического испарения при комнатной температуре из водного раствора нитрата уранила, 18-краун-6-эфира, гидроксида натрия и селеновой кислоты.

Рентгеноструктурный эксперимент проводился на дифрактометре Stoe IPDS II, оснащенный плоским детектором типа Image Plate. Параметры элементарной ячейки были определены и уточнены методом наименьших квадратов на основе 7649 рефлексов с  $2\theta$  в пределах  $3.86\text{--}58.58^\circ$ . Ячейка имеет моноклинную симметрию,  $a = 18.271(2)\text{ \AA}$ ,  $b = 13.104(2)\text{ \AA}$ ,  $c = 7.0391(6)\text{ \AA}$ ,  $\beta = 102.332(7)^\circ$ ,  $V = 1646.5(3)\text{ \AA}^3$ . Законы погасания и статистика распределения рефлексов определили пространственную группу  $C2/c$ . Поправка на поглощение была введена с учетом формы кристалла. Структура была решена прямыми методами и уточнена до  $R_1 = 0.0383$  ( $wR_2 = 0.0832$ ) для 1794 рефлексов с  $|F_o| \geq 4\sigma_F$ .

В структуре присутствуют два кристаллографически неэквивалентных атома селена, каждый из которых тетраэдрически координирован четырьмя атомами кислорода:  $\text{Se}^{6+} - \text{O}^{2-} = 1.619(3) - 1.678(3)\text{ \AA}$ ;  $1.612(3) - 1.707(4)\text{ \AA}$  для Se1 и Se2 соответственно.

Для атома Se2 существует одна удлиненная связь равная  $1.704\text{ \AA}$  (с атомом O6). Для атома O6 имеет место короткий контакт ( $2.528\text{ \AA}$ ) с концевым атомом O1 соседнего тетраэдра, что позволяет определить атом O6 как  $\text{OH}^-$  группу, а контакт  $\text{O6} \cdots \text{O1}$  – ответственным за водородное взаимодействие.

В структуре располагаются три кристаллографически независимых атома натрия. Атомы Na1 и Na2 окружены шестью атомами кислорода каждый ( $\langle \text{Na-O} \rangle = 2.443$  и  $2.418\text{ \AA}$  для Na1 и Na2, соответственно). Третий атом натрия разупорядочен на три кристаллографически неэквивалентные позиции с общей заселенностью позиции 1.0.

Кристаллическая структура построена из цепочек октаэдров  $\text{Na1O}_6$  и  $\text{Na2O}_6$ , связанных через общие ребра и закрученных в спирали вдоль направления  $[100]$ . Спиральные цепочки связываются в каркас посредством

тетраэдров  $(\text{Se1O}_4)^{2-}$  и  $(\text{HSe2O}_4)^-$ , объединенных в пары по средствам водородных связей.

Цепочки октаэдров  $\text{Na1O}_6$  и  $\text{Na2O}_6$  и пары селенатных тетраэдров образуют в структуре соединения каналы, вытянутые вдоль направления  $[001]$ . В этих каналах располагаются кристаллографически разупорядоченные атомы Na3.

*Работа выполнена при поддержке гранта ФЦП "Научные и педагогические кадры инновационной России" (госконтракт 02.740.11.0326) и гранта РФФИ 09-05-00567.*