

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НОВОГО СЕЛЕНАТА
УРАНИЛА $(\text{H}_3\text{O})[(\text{UO}_2)(\text{HSeO}_3)(\text{SeO}_3)_{0.5}(\text{SeO}_4)_{0.5}]$

Аль-Шурай А.А. (alex.alshuary@yahoo.com), Гуржий В.В.
(vladgeo17@mail.ru), Кривовичев С.В. (skrivovi@mail.ru)

Санкт-Петербургское отделение, Санкт-Петербургский государственный университет,
Кафедра кристаллографии

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF THE NEW URANYL
SELENATE $(\text{H}_3\text{O})[(\text{UO}_2)(\text{HSeO}_3)(\text{SeO}_3)_{0.5}(\text{SeO}_4)_{0.5}]$

Al-Shuray A.A. (alex.alshuary@yahoo.com), Gurzhiy V.V.,
(vladgeo17@mail.ru), Krivovichev S.V. (skrivovi@mail.ru)

St. Petersburg branch, St. Petersburg State University, Crystallography Dept.

Монокристаллы $(\text{H}_3\text{O})[(\text{UO}_2)(\text{HSeO}_3)(\text{SeO}_3)_{0.5}(\text{SeO}_4)_{0.5}]$ [1] получены методом изотермического испарения при комнатной температуре из водного раствора нитрата уранила, диметиламина и селеновой кислоты.

Рентгеноструктурный эксперимент проводился на дифрактометре Bruker Smart APEX II, оснащённым плоским детектором отраженных рентгеновских лучей типа CCD. Параметры элементарной ячейки были определены и уточнены методом наименьших квадратов на основе 6097 рефлексов с 2θ в пределах $5.32\text{--}65.00^\circ$. Ячейка имеет моноклинную симметрию, $a = 8.363(3) \text{ \AA}$, $b = 10.397(2) \text{ \AA}$, $c = 9.812(2) \text{ \AA}$, $\beta = 97.63(5)^\circ$, $V = 845.7(3) \text{ \AA}^3$. Законы погасания и статистика распределения рефлексов определили пространственную группу $P2_1/n$. Поправка на поглощение введена с учётом формы кристалла. Структура решена прямыми методами и уточнена до $R_1 = 0.046$ ($wR_2 = 0.124$) для 1484 рефлексов с $|F_o| \geq 4\sigma_F$.

В структуре соединения присутствует кристаллографически неэквивалентный атом урана, который образует две короткие ($1.780(10) - 1.792(9) \text{ \AA}$) связи $\text{U}^{6+} - \text{O}^{2-}$, формирующие уранил-ион $[\text{UO}_2]^{2+}$. Уранильные катионы координированы в экваториальной плоскости пятью атомами кислорода с более длинными связями ($\langle \text{U1-O}_{\text{eq}} \rangle = 2.376 \text{ \AA}$), образуя пентагональные бипирамиды $\text{UO}_5(\text{H}_2\text{O})_2$.

В структуре находятся два кристаллографически неэквивалентных атома селена. Атом Se1 координирован четырьмя атомами кислорода ($\langle \text{Se-O} \rangle = 1.641 \text{ \AA}$), которые образуют тридентатный комплекс. Атом кислорода, соответствующий четвертой, несвязной вершине имеет заселенность 0.5, тогда как атом селена и три других атома кислорода имеют полную заселенность. Таким образом, к данной позиции следует отнести две группы $[(\text{SeO}_3)_{0.5}(\text{SeO}_4)_{0.5}]$ с общей заселенностью позиции 1.0. Атом Se2 координирован тремя атомами кислорода, с одной удлиненной связью, которой соответствует $(\text{OH})^-$ группа. Координационные полиэдры являются

бидентатными тригональными пирамидами, с атомом селена в апикальной вершине.

Структура соединения **1** основана на неорганических двумерных комплексах состава $[(\text{UO}_2)(\text{HSeO}_3)(\text{SeO}_3)_{0.5}(\text{SeO}_4)_{0.5}]$, параллельных плоскости (101).

Анализ топологии селенатоуранильных слоев в структуре **1** с использованием теории графов показал, что топология двумерных комплексов $1/2d$ является одной из наиболее распространенных, среди известных соединений селенатов-уранила.

Отрицательный заряд слоистых уранил-селенит-селенатных комплексов компенсируется молекулами оксония, расположенных в межслоевом пространстве.

Работа выполнена при поддержке СПбГУ, а также гранта Президента РФ для молодых кандидатов наук (МК-1737.2014.5). Рентгеновские исследования проведены в РЦ «Рентгенодифракционные методы исследования» СПбГУ.