

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НОВОГО СУЛЬФАТА  
УРАНИЛА  $[\text{CH}_6\text{N}_3]_2[(\text{UO}_2)_2(\text{SO}_4)_3]$

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

Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский государственный университет

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF THE NEW URANYL  
SULFATE  $[\text{CH}_6\text{N}_3]_2[(\text{UO}_2)_2(\text{SO}_4)_3]$

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

Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University

Монокристаллы соединения  $[\text{CH}_6\text{N}_3]_2[(\text{UO}_2)_2(\text{SO}_4)_3]$  (**I**) были получены методом изотермического испарения из водного раствора нитрата уранила  $(\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O})$ , сульфата гуанидина  $([\text{CH}_6\text{N}_3]_2(\text{SO}_4))$  и серной кислоты ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ , 98%) при комнатной температуре.

Параметры элементарной ячейки соединения **I** были определены методом наименьших квадратов на основе 11261 рефлекса, с  $2\theta$  в пределах  $5.86\text{--}55.00^\circ$ . Была определена пространственная группа  $P2_12_12$ . Ячейка имеет ромбическую симметрию,  $a = 9.907(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 9.597(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 9.762(3) \text{ \AA}$ ,  $V = 928.2(5) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ . Кристаллическая структура решена прямыми методами и уточнена до  $R_1 = 0.025$  ( $wR_2 = 0.057$ ) для 2066 рефлексов с  $|F_o| \geq 4\sigma_F$  с использованием программного комплекса SHELXL-97.

Структура **I** содержит один кристаллографически независимый атом урана, который формирует две короткие связи  $\text{U}^{6+}=\text{O}^{2-}$  [ $1.747(5)\text{--}1.756(5) \text{ \AA}$ ] с образованием линейного уранил-иона  $\text{UO}_2^{2+}$ . Уранил-ион в экваториальной плоскости координирован пятью атомами кислорода [ $2.373(5)\text{--}2.421(5) \text{ \AA}$ ] с образованием координационного полиэдра – пентагональной дипирамиды. Два кристаллографически независимых атома серы тетраэдрически координированы четырьмя атомами кислорода. Средняя длина связей  $\langle\text{S-O}\rangle$  равна 1.474 и 1.463  $\text{ \AA}$  для атомов S1 и S2, соответственно. Тетраэдрические оксоанионы  $(\text{S1O}_4)^{2-}$  и  $(\text{S2O}_4)^{2-}$  являются три- и тетраэдрическими с уранильными бипирамидами соответственно.

Структура **I** основана на уранил-сульфатных слоях состава  $[(\text{UO}_2)_2(\text{SO}_4)_3]^{2-}$  образованных координационными полиэдрами атомов U и S связанными через общие атомы кислорода, и параллельных плоскости [001]. Заряд слоев компенсируется молекулами гуанидина, расположенными в межслоевом пространстве. Анализ топологии слоев с использованием теории графов показал, что топология слоев сложена четырехчленными кольцами, и относится к типу  $cs2\text{--}2:3\text{--}14$ .

*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.*