

СИНТЕЗ И СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НОВОГО УРАНИЛ-
ХЛОРОСЕЛЕНАТА

Тюменцева О.С.¹ (circumstance-ol@mail.ru), Гуржий В.В.²
(vladgeo17@mail.ru), Кривовичев С.В.² (skrivovi@mail.ru),
Тананаев И.Г.¹ (geokhi@mail.ru)

¹ Институт физической химии и электрохимии им. Фрумкина РАН, Москва;

² Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский государственный университет

SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDY OF A NEW URANYL
CHLOROSELENATE

Tyumentseva O.S.¹, Gurzhiy V.V.², Krivovichev S.V.², Tananaev I.G.¹

¹ Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Moscow;

² Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University

Монокристаллы $(C_5H_{12}NO)(UO_2)(SeO_4)Cl(H_2O)$ были получены методом изотермического испарения при комнатной температуре из 2 мл водного раствора нитрата уранила $(UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O)$, гидроксида калия (KOH), селеновой кислоты (H_2SeO_4) и холин хлорида $(C_5H_{14}NOCl)$. Для структурного анализа был отобран кристалл и помещен на дифрактометр Bruker, оснащенный детектором типа APEX II CCD.

Параметры элементарной ячейки соединения $(C_5H_{12}NO)(UO_2)(SeO_4)Cl(H_2O)$ определены и уточнены методом наименьших квадратов на основе 20795 рефлексов с 2θ в пределах $2.55^\circ - 32.50^\circ$. Ячейка имеет моноклинную симметрию, $a = 10.745(4)$, $b = 11.236(4)$, $c = 12.477(4)$ Å, $\beta = 114.580(5)$, $V = 1369.9(8)$ Å³. Законы погасания и статистика распределения рефлексов определили пространственную группу $P2_1/n$. Поправка на поглощение введена с учетом формы кристалла. Структура решена прямыми методами с использованием программы SHELXL-97 и уточнена до $R_1 = 0.0261$ ($wR_2 = 0.0612$) для 4350 рефлексов с $|F_o| \geq 4\sigma_F$.

Основу структуры составляют слоистые комплексы состава $[(UO_2)(SeO_4)Cl(H_2O)]$, состоящие из координационных полиэдров урана и селена, объединенные через мостиковые атомы кислорода. Селенатуранилатные слои параллельны плоскости (101). В структуре присутствует один кристаллографически независимый атом урана, образующий две короткие связи $U^{6+} - O^{2-} : 1.757(2) - 1.762(2)$ Å, формирующие почти линейный уранильный катион $[O^{2-}=U^{6+}=O^{2-}]^{2+}$, и пять более длинных, причем только четыре из них – связи с кислородными атомами ($2.357(2) - 2.509(3)$ Å), а пятая – связь с атомом хлора ($2.763(11)$ Å). Таким образом, в экваториальной плоскости формируются пентагональные бипирамиды вида $UClO_6$. Селенатные тетраэдры SeO_4 ($\langle Se-O \rangle = 1.635$ Å) являются тридентатно-мостиковыми. Образуя связи с полиэдрами урана по трем

вершинам, селенатные тетраэдры лежат в плоскости неорганического слоя, причем свободные вершины, чередуясь, направлены то вверх, то вниз.

Заряд неорганического слоя $[(\text{UO}_2)(\text{SeO}_4)\text{Cl}(\text{H}_2\text{O})]^-$ компенсируется молекулами воды и протонированными молекулами холина.

Инфракрасный спектр соединения $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{NO})(\text{UO}_2)(\text{SeO}_4)\text{Cl}(\text{H}_2\text{O})$ был получен в области 4000 см^{-1} - 300 см^{-1} и подтвердил рентгеноструктурные данные.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований президиума РАН, в рамках реализации ФЦП «Кадры» (мероприятие 1.4.) и гранта из внутреннего бюджета СПбГУ (шифр темы 3.37.84.2011).