

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА СЕЛЕНАТА УРАНИЛА С АЗЕТИДИНОМ $[(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2]_2[(\text{UO}_2)_2(\text{SeO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})]$

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 WITH AZETIDINE $[(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2]_2[(\text{UO}_2)_2(\text{SeO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})]$

Gurzhiy V.V., (vladgeo17@mail.ru), Krivovichev S.V. (skrivovi@mail.ru)
Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University, Crystallography Dept.

Монокристаллы $[(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2]_2[(\text{UO}_2)_2(\text{SeO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})]$ (**1**) получены методом испарения при комнатной температуре из 2 мл водного раствора нитрата уранила, азетидина и 40% селеновой кислоты.

Желто-зеленый прозрачный кристалл помещен на дифрактометр Agilent Technologies Xcalibur Eos, оснащенный плоским детектором отраженных рентгеновских лучей типа CCD. Параметры элементарной ячейки были определены и уточнены методом наименьших квадратов на основе 9935 рефлексов с 2θ в пределах $5.23\text{--}54.99^\circ$. Ячейка имеет ромбическую симметрию, $a = 10.8940(2)$ Å, $b = 11.1207(2)$ Å, $c = 17.8623(3)$ Å, $V = 2164.00(7)$ Å³. Законы погасания и статистика распределения рефлексов определили пространственную группу $P2_12_12_1$. Поправка на поглощение введена аналитически с учетом формы кристалла на основании выражений, полученных Кларком и Рейдом, в программном комплексе CrystalsPro. Структура решена прямыми методами и уточнена до $R_1 = 0.033$ ($wR_2 = 0.061$) для 4445 рефлексов с $|F_o| \geq 4\sigma_F$.

В структуре **1** присутствует два кристаллографически неэквивалентных атома урана, координационными полиэдрами которых являются пентагональные бипирамиды (UO_7) и ($\text{UO}_6\text{H}_2\text{O}$). В структуре **1** находятся три кристаллографически независимых атома Se^{6+} , тетраэдрически координированные четырьмя атомами кислорода.

Структура **1** основана на слоистых комплексах $[(\text{UO}_2)_2(\text{SeO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})]^{2-}$, образованных путем объединения координационных полиэдров урана и селена через общие вершины и ориентированных параллельно плоскости (001). Анализ топологии с использованием теории графов показал, что топология слоистого комплекса является одной из наиболее распространенных не только среди уранил-селенатов, но и соединений урана(VI) с тетраэдрическими оксоанионами в целом. Заряд уранил-селенатных слоев компенсируется катионами протонированными молекулами азетидина, расположенными в межслоевом пространстве. Молекулы представляют собой четырех членные циклические комплексы, с аминогруппой, участвующей в образовании водородных связей с концевыми атомами кислорода селенатных групп и уранил-ионов двумерного неорганического комплекса.

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.