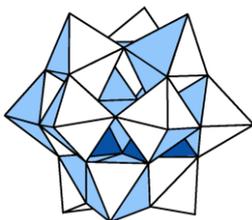


Российская академия наук,
Научный совет РАН по химической физике,
Научный совет РАН по материалам и наноматериалам

Институт проблем химической физики РАН,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова



ТЕЗИСЫ

X Национальной кристаллохимической конференции

Приэльбрусье, 5 - 9 июля 2021 г

Тезисы докладов X Национальной кристаллохимической конференции

В сборнике представлены тезисы пленарных лекций, устных и стендовых докладов X Национальной кристаллохимической конференции (Приэльбрусье 5 – 9 июля 2021 г).

Доклады посвящены современному состоянию исследований в области кристаллохимии - фундаментальным вопросам строения и реакционной способности, взаимосвязи «структура-свойство», созданию новых многофункциональных материалов с заранее заданными свойствами, структурным аспектам твердофазных реакций, вопросам динамической кристаллохимии и химической связи, представлены работы по общим вопросам кристаллохимии, методам рентгеноструктурного анализа и возможностям дифракционных методов исследования наноматериалов.

Сборник издан в авторской редакции

Технический редактор – к.х.н. И.А. Шилова

Организаторы конференции:

Институт проблем химической физики, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Конференция проводится при поддержке Российской академии наук, Научного совета РАН по химической физике, Научного совета РАН по материалам и наноматериалам

ISBN 978-5-6044508-3-3

ISBN 978-5-6044508-3-3



9 785604 450833

**СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И МОРФОТРОПНЫЕ
ПРЕОБРАЗОВАНИЯ В ГРУППЕ СОЕДИНЕНИЙ
 $M[(\text{UO}_2)(\text{CH}_3\text{COO})_3](\text{H}_2\text{O})_n$ ($M = \text{Na, K, Rb, Cs; } n = 0-1.0$)**

Калашникова С.А.^{1@}, Корняков И.В.^{1,2}, Гуржий В.В.¹

¹*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

²*Кольский научный центр Российской академии наук, Апатиты, Россия*

kalashnikova.soff@gmail.com

Монокристаллы соединений $\text{Na}[\text{UO}_2(\text{CH}_3\text{COO})_3]$ (**1**), $\text{K}[\text{UO}_2(\text{CH}_3\text{COO})_3](\text{H}_2\text{O})_{0.5}$ (**2**), $\text{Rb}[\text{UO}_2(\text{CH}_3\text{COO})_3]$ (**3**) и $\text{Cs}[\text{UO}_2(\text{CH}_3\text{COO})_3](\text{H}_2\text{O})_{0.5}$ (**4**) были получены методом изотермического испарения при комнатной температуре. Использовались растворы дигидрата ацетата уранила, карбоната аммония и хлорида натрия, калия, рубидия и цезия для **1**, **2**, **3** и **4** соответственно. Отобранные монокристаллы были изучены методом монокристалльного рентгеноструктурного анализа при температуре 100 К для **2**, **3**, **4** и 296 К для **1** с использованием дифрактометра Bruker Карра Арех II Duo.

Параметры элементарных ячеек были определены методом наименьших квадратов [1]. Структуры соединений решены прямыми методами и уточнены с использованием программ Shelx, интегрированных в комплексе Olex2. **1**: $P2_13$, $a = 10.721(6) \text{ \AA}$, $V = 1232.4(19) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$, $R_1 = 0.041$. **2**: $I4_1/a$, $a = 14.222(5)$, $c = 25.715(8) \text{ \AA}$, $V = 5201(4) \text{ \AA}^3$, $Z = 16$, $R_1 = 0.037$. **3**: $I4_1/a$, $a = 13.787(3)$, $c = 27.511(7) \text{ \AA}$, $V = 5230(3) \text{ \AA}^3$, $Z = 16$, $R_1 = 0.037$. **4**: $P\bar{1}$, $a = 8.353(4)$, $b = 11.008(5)$, $c = 15.354(7) \text{ \AA}$, $\alpha = 108.409(11)$, $\beta = 100.140(9)$, $\gamma = 96.370(9)^\circ$, $V = 1297.5(10) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$, $R_1 = 0.036$.

Структуры **1**, **2** и **3** содержат один симметрично неэквивалентный катион уранила. Структура **4** содержит два независимых катиона уранила. Каждый уранил-ион в экваториальной плоскости координирован шестью атомами кислорода, принадлежащих трем ацетатным группам. Образованные таким образом гексагональные дипирамиды (координиционные полиэдры атомов U^{6+}) имеют три общих ребра с (CH_3COO) -группами, формируя уранил-три-карбонатные кластеры, являющиеся основой структуры соединений **1-4**.

Количество кристаллографически неэквивалентных ацетатных групп увеличивается от одной в структуре **1** до трех в структуре **2** и **3** и шести в структуре **4**, при этом увеличивается количество независимых атомов урана и понижается симметрия (от кубической в структуре **1** до триклинной в структуре **4**).

Основные структурные различия, приводящие к морфотропным изменениям в семействе соединений $M[(UO_2)(CH_3COO)_3](H_2O)_n$ ($M = Na, K, Rb, Cs; n = 0-1.0$) связаны с ионными радиусами щелочных катионов. Первое преобразование связано с замещением атомов Na атомом K, в результате чего симметрия понижается с кубической $P2_13$ до тетрагональной $I4_1/a$. Это связано со значительной разницей между ионными радиусами атомов Na и K ($\sim 0.44 \text{ \AA}$). Замещение атомов K атомами Rb не приводит к существенным изменениям структуры, так как различие между ионными радиусами не столь значительно, как в предыдущем случае ($\sim 0.06 \text{ \AA}$). Замещение атомов Rb на атомы Cs так же приводит к структурным изменениям в виду более существенного различия между ионными радиусами ($\sim 0.17 \text{ \AA}$), в результате чего симметрия понижается до триклинной.

Работа выполнена при поддержке СПбГУ, а также гранта Российского Научного Фонда № 18-17-00018. Рентгеновские исследования проведены в РЦ «Рентгенодифракционные методы исследования» СПбГУ.

[1] Korniyakov I.V., 2020, Z. Kristallogr. 10.1515/zkri-2019-0070