

Доноры нековалентных взаимодействий в бинарных сокристаллах никеля и меди

Ольга Викторовна Бурдуленко, ГБОУ гимназия №406, г. Пушкин, г. Санкт-Петербург

Научный руководитель – к. х. н. Лев Евгеньевич Зеленков, Физико-технический факультет, Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

За последние пол века развития кристаллохимической науки было установлено, что нековалентные взаимодействия во многом обуславливают точную структуру и способ упаковки молекул в кристаллах. Особенного внимания заслуживают изучаемые мировым сообществом в последнее время более пристально такие нековалентные взаимодействия, как галогенные связи. Такой тип взаимодействий осуществляется посредством частичного переноса электронной плотности с электрон-избыточной молекулы (или аниона) на область пространства с положительным значением электростатического потенциала (σ -дырку) донора галогенной связи (чаще всего в этой роли выступают молекулы, в которых галоген связан с акцепторными заместителями). Среди же акцепторов галогенной связи одними из самых новых и перспективных с точки зрения кристаллохимического дизайна являются плоскоквadratные комплексы d8 и d9 металлов с электрон-избыточным лигандным окружением.

В настоящей работе изучались такие координационные соединения, в которых лиганды «накачивают» электронной плотностью формально положительный ион металла, в связи с чем последний может проявлять электрофильно-нуклеофильный дуализм. Используя одновременно, доноры и акцепторы нековалентных взаимодействий при организации кристаллов, становится возможным направлять формирование кристаллической структуры заданным образом.

Основные задачи включали в себя: синтез дитиокарбаматных комплексов никеля(II) и меди(II) с различными заместителями; сокристаллизация комплексов с донорами галогенных взаимодействий; установление зависимости и закономерности упаковки молекул в сокристаллах.

Для изучения структуры бинарных сокристаллов был использован рентгеноструктурный анализ. Получены первые результаты: сокристаллы дитиокарбаматов с различными донорами галогенных связей, а именно, 1,3,5-трийодтрифторбензолом, 1,4-дийодтетрафторбензолом, 1,2-дийодтетрафторбензолом, 1,2-дибромтетрафторбензолом, тетрайдэтиленом. Дальнейшая работа продолжается.