

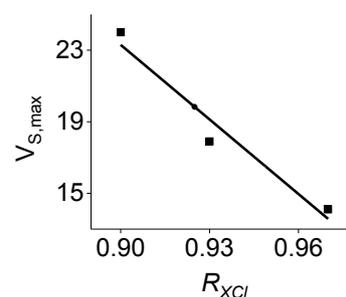
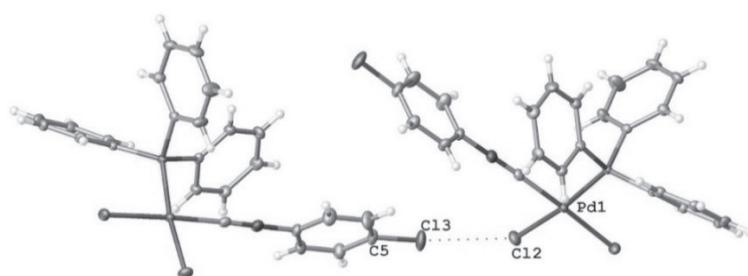
## ТРОЙНАЯ ИЗОМОРФНАЯ ЗАМЕНА ГАЛОГЕНА Cl/Br/I В КРИСТАЛЛАХ ИЗОЦИАНИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ(II)

Булдаков А.В., Крюкова М.А., Иванов Д.М., Новиков А.С., Кинжалов М.А.

Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034 Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9  
e-mail: st055690@student.spbu.ru

Галогенная связь (ГС), будучи сравнимой по энергии и направленности с водородной,<sup>1</sup> нередко является определяющим фактором структуры кристалла взаимодействием. Зависимость энергии ГС от типа галогена была теоретически изучена П. Политцером.<sup>2</sup> Он определил, что энергия ГС должна увеличиваться при изменении донора ГС от Cl к Br к I. Его выводы не были полностью подтверждены для твёрдой фазы, что ограничивает использование ГС в инженерии кристаллов и затрудняет возможность управления структурой кристалла при осуществлении замены донора ГС.

В работе представлены две серии структур *cis*-[PdCl<sub>2</sub>(CNC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-4-X)(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sup>3</sup> и *trans*-[PdI<sub>2</sub>(CNC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-4-X)<sub>2</sub>]<sup>3</sup> (X = Cl, Br, I) с изоморфной заменой Cl/Br/I с сохранением ГС. Рассчитанный максимальный положительный потенциал  $V_{S,max}$  в доноре ГС<sup>4</sup> линейно зависит от расстояния между донором и акцептором ГС, делённого на сумму их ван-дерваальсовых радиусов, в обеих сериях структур, что экспериментально подтверждает теорию Политцера для твёрдой фазы.



### Литература

1. Gabriella Cavalla et al. Chem. Rev., 2016, 116 (4), 2478.
2. Peter Politzer et al. Phys. Chem. Chem. Phys., 2013, 15, 11178.
3. Kinzhalov, M.A., Buldakov A.V, et al. Russ. J. Gen. Chem. 2017, 87 (11), 1865.
4. Kinzhalov, M.A. et. al. Angew. Chemie Int. Ed., 2018, 57 (39), 12785.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (18-33-20073) и Гранта Президента Российской Федерации (МК-4457.2018.3). Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров Санкт-Петербургского государственного университета «Магнитнорезонансные методы исследования», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Методы анализа состава вещества».