

## ПРОГНОЗ СТРУКТУР НОВЫХ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ НИТРИДОВ $S_3N_2$ , $S_3N_4$ , $SN_2$ , $Os_3N_8$ , $Re_3N_7$ , $WN_2$ , $MoN_2$ И ПУТЕЙ К НИМ

Дуденков И.В.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской Академии Наук,  
119334, Москва, Ленинский проспект 49,  
e-mail: ivdudenkoff@mail.ru*

Давно получены бинарные и многочисленные сложные нитриды серы. В то же время нитриды серы с чистыми степенями окисления +II, +IV, +VI еще не получены. Расчетных работ по ним тоже почти нет. Однако из  $S_4(NH)_4$  и  $SCl_2$  в присутствии подходящих буферов следует ожидать образования нитрида  $(S_3N_2)_4$  (рис. 1) с молекулами кубической симметрии. Из известных предшественников  $S_4N_5^{+1}$ ,  $S_3N_3Cl_3$ ,  $S_4N_4F_4$ ,  $SN_2^{-2}$  несколько путей могут привести к молекулам  $(S_3N_2)_2$  (один из 4 изомеров на рис. 1). К нитриду S(VI)  $SN_2$  тоже есть возможные пути. Элементарные акты и продукты таких реакций воспроизведены полуэмпирическими методами AM1, PM3 и PM6 в программах HyperChem и MORAC.

Давно получены многочисленные тройные и четверные нитриды и производные нитридов для d-элементов со степенями окисления вплоть до +VIII:  $Os(NC(CH_3)_3)_4$ ,  $Li_5[ReN_4]$ ,  $Li_6[MN_4]$  ( $M = Cr, Mo, W$ ),  $Li_7[MN_4]$  ( $M = V, Nb, Ta$ ) и многие другие. При этом нет данных о взаимодействии этих сложных нитридов с известными нитридогалогенидами этих элементов  $ReNCl_4$ ,  $WNCl_3$  и др. и о поведении этих нитридов и нитридогалогенидов в жидком аммиаке, а бинарные высшие нитриды этих элементов (кроме  $Ta_3N_5$ ) еще не получены. Пути синтеза новых метастабильных нитридов логично искать именно в таких жидкофазных реакциях конечных молекул и ионов, не требующих высоких температур. Теоретически сконструированы структуры молекулярных форм  $(Os_3N_8)_2$  (1 из 19 изомеров на рис. 1в) и  $(Re_3N_7)_3$  (1 из 8 изомеров на рис. 1). Для  $SN_2$ ,  $WN_2$ ,  $MoN_2$  и  $CrN_2$  предпочтительной ожидается структура стеклообразного  $SiO_2$ . Но поликонденсацией в ограниченных пространствах полостей цеолитов могут найтись и пути к гипертетраэдрическим молекулам  $(MN_2)_{10}$  ( $M=S, W, Mo, Cr$ ) (рис. 1).

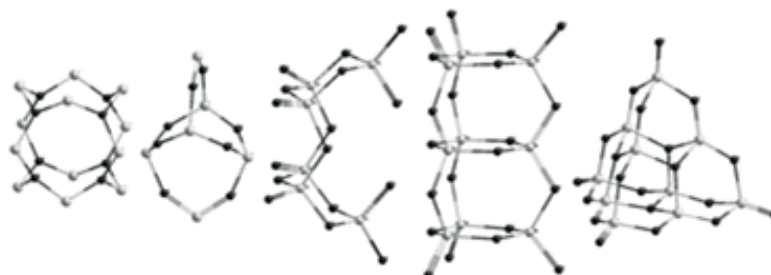


Рисунок 1. Структуры прогнозируемых нитридов (слева направо):  $(S_3N_2)_4$ ,  $(S_3N_4)_2$ ,  $(Os_3N_8)_2$ ,  $(Re_3N_7)_3$ ,  $(SN_2)_{10}$