

## ДЕНДРИМЕРНЫЙ ПРИНЦИП КОНСТРУИРОВАНИЯ НОВЫХ АЛЛОТРОПОВ АЗОТА, ХЛОРА И ИХ ОКСИДОВ

Дуденков И.В.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 49,  
e-mail: ivdudenkoff@mail.ru*

Повышенные координационные числа неметаллов могут стабилизироваться в таких молекулах, геометрия которых не допускает низкобарьерных электроциклических перегруппировок, оставляя возможным только разрыв одиночных химических связей на радикалы или ионы. Это условие автоматически выполняется для цепочечных или дендритных структур, не содержащих циклов. Простейшим известным примером такого способа стабилизации является озон – «диоксид кислорода  $\text{O}_2$ » по структуре. Аналогичные стабилизированные аллотропы возможны у галогенов, например,  $\text{ClCl}_3$  и  $\text{ClCl}_5$ , изоструктурные известным  $\text{ClF}_3$  и  $\text{ClF}_5$ . В отличие от несуществующего  $(\text{N}_5^+)(\text{N}_3^-)$ , азиды более крупных полиазотных катионов  $(\text{N}(\text{N}_3)_4^+)(\text{N}_3^-)$ ,  $(\text{N}(\text{NN}(\text{N}_3)_3)^+)(\text{N}_3^-)$  (рис. 1) и т.п. ожидаются более устойчивыми. Такой способ стабилизации делает возможными новые низколетучие молекулярные формы оксидов азота, хлора и брома, например,  $(\text{N}_2\text{O}_5)_2 = \text{ON}(\text{ONO}_2)_3$ ,  $(\text{Cl}_2\text{O}_7)_3 = \text{OCl}(\text{OClO}_3)_5$  (рис. 1), и их аналоги без части концевых атомов O или с заменой концевых групп на разветвленные. Область применимости дендримерного принципа стабилизации удалось расширить и на новые аллотропы халькогенов и пниктогенов с участием циклов. Геометрия и устойчивость новых аллотропов исследованы полуэмпирическими методами AM1, PM3, PM6 в программах HyperChem и MORAC, а для систем до 10 атомов и неэмпирически в приближении 6-31G\* MP2.

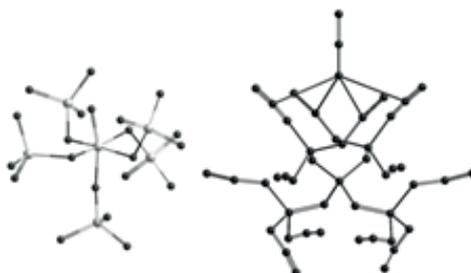


Рисунок 1. Расчетные структуры  $\text{OCl}(\text{OClO}_3)_5$  (слева) и  $(\text{N}(\text{NN}(\text{N}_3)_3)^+)(\text{N}_3^-)$  (справа).