

НОВЫЙ ПОЛИЯДЕРНЫЙ СИЛСЕСКВИОКСАН МЕДИ И НАТРИЯ С АНИЗОТРОПНОЙ ФОРМОЙ МОЛЕКУЛЫ: УТОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПО ДАННЫМ СИНХРОТРОННОГО РСА

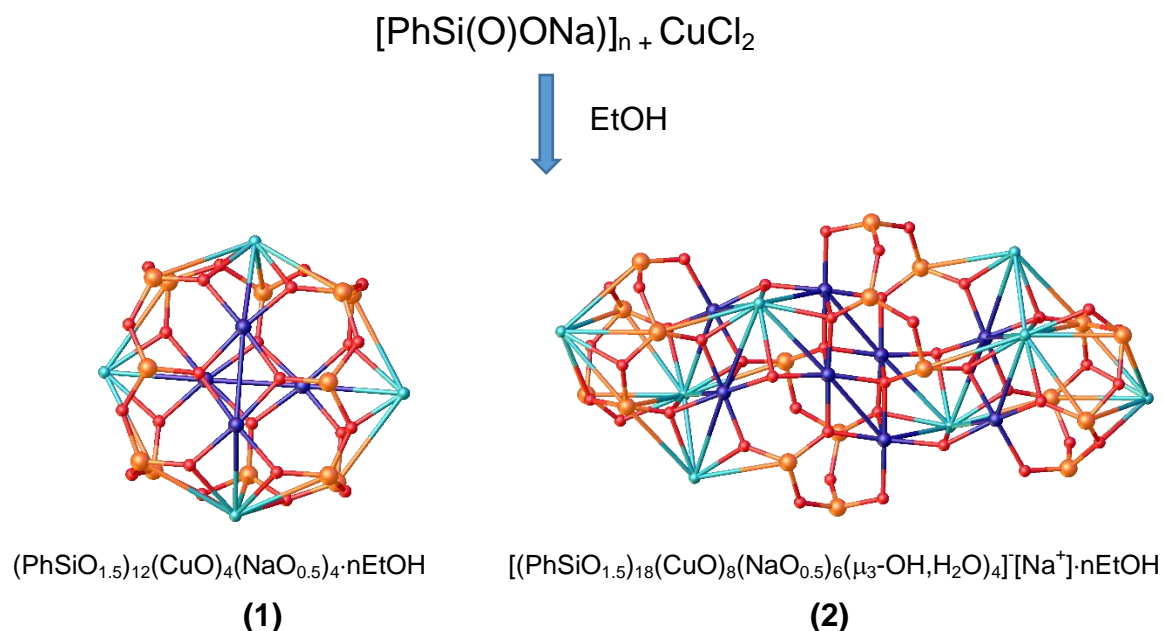
Белякова О.А.¹, Астахов Г.С.^{2,3}, Биляченко А.Н.^{2,3}, Хрусталеv В.Н.²

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

²Российский университет дружбы народов, Москва

³Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН
olbelyak@catalysis.ru

Каркасные полиядерные металлосилсесквиоксаны – обширный класс соединений, проявляющих богатое структурное разнообразие в сочетании с интересными функциональными свойствами, в том числе высокую активность в гомогенных реакциях окисления пероксидами [1]. Большой интерес вызывает целенаправленное формирование координационных полимеров и металл-органических каркасов на основе металлосилсесквиоксанов. В рамках систематического изучения реакционной способности медь и натрий-содержащих силсесквиоксанов недавно выделен и структурно охарактеризован новый необычный полиядерный каркас (на схеме справа).



На схеме изображены молекулярные каркасы двух медь и натрий-содержащих силсесквиоксанов, выделенных из одной реакционной смеси. Органические фрагменты (фенильные заместители у атомов кремния и

координированные молекулы этанола на атомах натрия не приведены). Цветовая кодировка: синий – Cu, голубой – Na, оранжевый – Si, красный – O. Кристаллические структуры были установлены по данным РСА с использованием синхротронного излучения (Курчатовский источник синхротронного излучения, Москва) [2]. Экспериментальные данные были получены для мелкого, слабоотражающего кристалла с частичной структурной разупорядоченностью, исследование которого было невозможно на лабораторном дифрактометре. Структура была решена прямыми методами с использованием программы Shelxt. Уточнение структуры проводилось с использованием графической оболочки Olex2.

Каркас **1** наблюдался ранее в виде различных сольватов [3, 4]. А вот структура **2** не имеет аналогов среди описанных ранее металлосилсесквиоксанов. Молекула характеризуется сильно вытянутой формой, в ней можно формально выделить несколько чередующихся слоев «палуб» (multidecker). При этом принцип структурирования соединения **2** принципиально отличен от других примеров многопалубных металлосилсесквиоксанов [5, 6].

В докладе обсуждается возможный механизм самоорганизации, приводящей к образованию такой молекулы, а также структурные особенности и свойства нового соединения.

Список литературы

- [1] Journal of Cluster Science. 2019. V. 30. P. 1283-1316.
- [2] Crystals. 2017. V. 7. No. 11. P. 325-1-19.
- [3] Dalton Transactions. 2014. V 43. P. 872-882.
- [4] Dalton Transactions. 2017. V 46. P. 12935-12949.
- [5] ChemCatChem, 2017. V 9 P. 4437–4447.
- [6] Crystal Growth & Design. 2018. V. 18. P. 5377-5384.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИК СО РАН (проект АААА-А19-119020890025-3), гранта РФФИ 20-03-00542, а также программы РУДН «5–100».