

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ТРИС(ХЛОРАЦЕТИЛАЦЕТОНАТА) ХРОМА(III)

Гельфанд Н. А.,

научный руководитель канд.хим.наук Свистунова И.В.

Дальневосточный федеральный университет

β -Дикетонаты металлов находят широкое применение в качестве катализаторов органических реакций, стабилизаторов полимеров, для нанесения металлоксидных пленок, в качестве сдвигающих реагентов в ЯМР-спектроскопии и лазерной технике. Поэтому актуальным является изучение структуры этих соединений.

К настоящему времени известно строение галогензамещенных ацетилацетонатов иридия, рутения, меди, никеля, сурьмы, осмия. Определены структуры трис(ацетилацетоната)хрома, а также его хлор-, бромзамещенных биядерных комплексов с мостиковыми алкоксигруппами. В данной работе представлено исследование структуры трис(хлорацетилацетоната) хрома(III) $((AcAcCl)_3Cr)$ методом рентгеноструктурного анализа. Образец комплекса представлял собой призматические кристаллы оливкового цвета. Эксперимент проводился на дифрактометре КАРРААРЕХИССД.

Подобно другим ацетилацетонатам металлов, исследуемое вещество имеет молекулярную структуру. В данном случае структурными единицами являются два независимых нейтральных LiD стереоизомера комплекса $(AcAcCl)_3Cr$ и молекула бензола, то есть исследуемый образец комплекса является сольватированным (рис. 1).

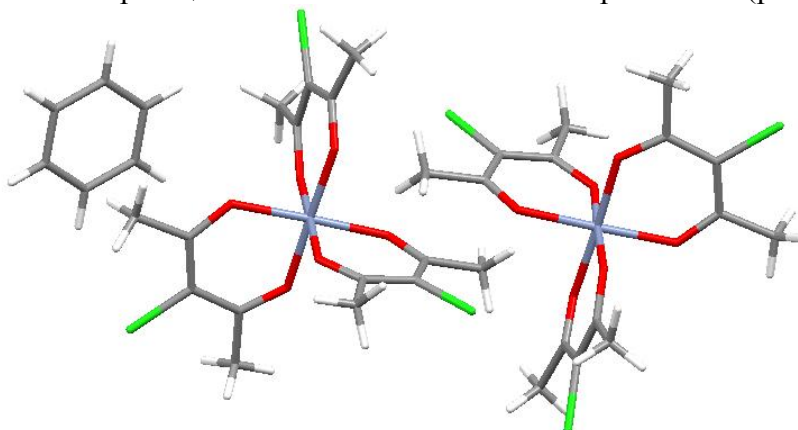


Рис. 1- Молекулярная структура $(AcAcCl)_3Cr$

Структура $(AcAcCl)_3Cr$ повторяет структуру незамещенного комплекса $(AcAcH)_3Cr$ и имеет форму искаженного октаэдра. Как и в $(AcAcH)_3Cr$, в $(AcAcCl)_3Cr$ хелатные циклы неплоские, наблюдаются изгибы по линиям $O \dots O$. Введение в γ -положение хлора приводит к изменению валентных углов и длин связей, в частности уменьшается внутрiligандное расстояние $O \dots O$.

Исследуемый комплекс изоструктурен хлорзамещенному ацетилацетонату иридия $((AcAcCl)_3Ir)$, молекулярная структура которого также представлена димером. Однако молекулы $(AcAcCl)_3Cr$ также связаны короткими контактами с молекулами бензола. Образование димера обусловлено межмолекулярным взаимодействием атомов кислорода и водорода метильной группы разных стереомеров.

Пространственная группа $(AcAcCl)_3Cr$, как и незамещенного комплекса, $P2_1/c$. Элементарная ячейка включает четыре структурные единицы (рис. 2). Их расположение в кристаллической решетке в основном определяется межмолекулярными взаимодействиями атомов хлора (рис. 3).

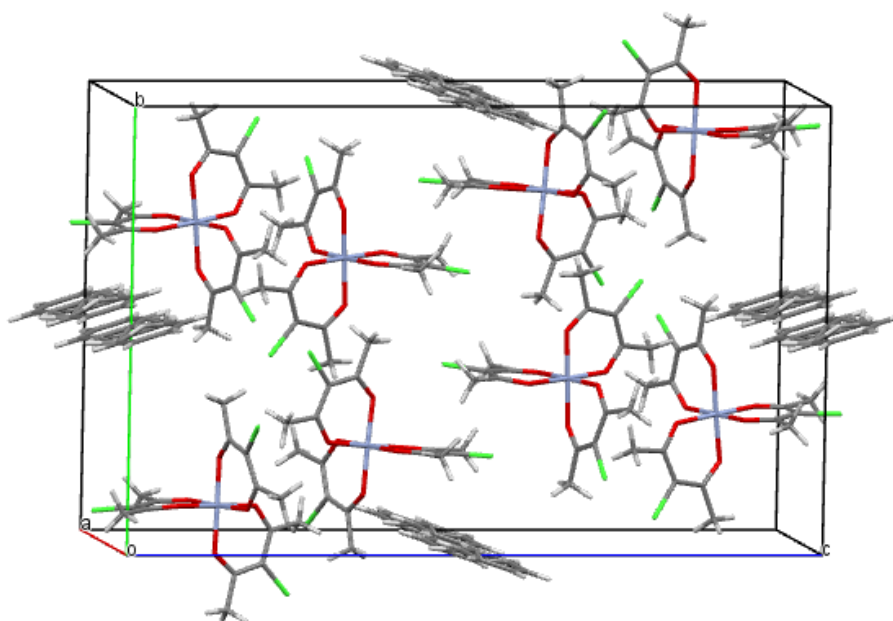


Рис. 2- Кристаллическая структура $(AcAcCl)_3Cr$

Одинаковые стереоизомеры связываются взаимодействиями Cl...Cl в ленты (рис. 3). Контактуют только два атома хлора из трех каждой молекулы. Ленты, построенные из Li D изомеров чередуются и связываются за счет взаимодействий водородов метильных групп тех циклов, атомы хлора которых не участвуют в образовании коротких контактов.

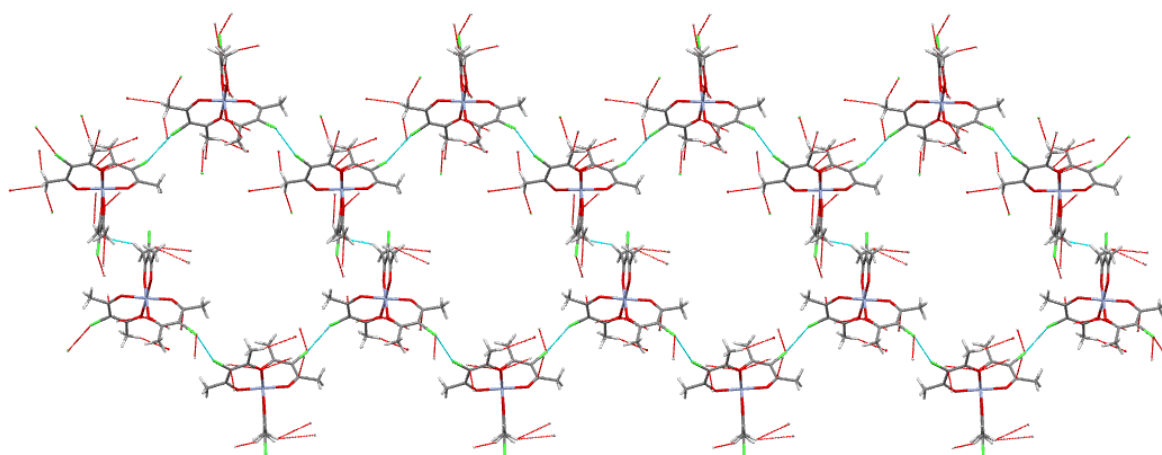


Рис. 3- Межмолекулярные взаимодействия Cl...Cl

Таким образом, в результате проведенного исследования была определена молекулярная и кристаллическая структура трис(хлорацетилацетоната) хрома(III).

Благодарим за проведение рентгendifракционного эксперимента лабораторию рентгеноструктурного анализа Института химии ДВО РАН.