
TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

МАТЕРИАЛЫ

XXII Международной научно-практической
конференции студентов и молодых ученых

**ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ**

ТОМ 2

ХХТ-2021

17–20 мая 2021 года, г. Томск

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ШКОЛА ХИМИЧЕСКИХ И БИОМЕДИЦИНСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ

Том 2

Материалы
XXII Международной научно-практической конференции
студентов и молодых ученых
имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера,
посвященной 125-летию со дня основания
Томского политехнического университета

17–20 мая 2021 г.

Томск 2021

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0
Х46

Химия и химическая технология в XXI веке : материалы
Х46 XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 125-летию со дня основания Томского политехнического университета (г. Томск, 17–20 мая 2021 г.). В 2 томах. Том 2 / Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2021. – 430 с.

ISBN 978-5-4387-0996-1 (т. 2)
ISBN 978-5-4387-0994-7

В сборнике представлены материалы XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке» имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 125-летию со дня основания Томского политехнического университета. В материалах сборника обсуждаются современные проблемы химии и химической технологии. Большое внимание уделено исследованиям в области промышленного оборудования химических технологий. Значительная часть докладов посвящена синтезу новых материалов. Рассмотрены современные подходы для моделирования процессов подготовки и переработки углеводородного сырья, применяемые как в образовательных процессах, так и при проектировании промышленных объектов. Приведены материалы, описывающие разработки молодых ученых для борьбы с коронавирусом SARS-CoV-2.

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0

Оргкомитет
конференции:

634050, Томск, пр. Ленина, 43а, ТПУ, ауд. 136,
ОХИ ИШПР ТПУ
Тел. +7-913-809-91-17
e-mail: orgcomННТ@tpu.ru
hht.tpu.ru

ISBN 978-5-4387-0996-1 (т. 2)
ISBN 978-5-4387-0994-7

© ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2021

Halogen bonding in iodonium salts is more strength due to charge assistance that can be useful for mechanical properties of XOFs formed by iodonium salts. In particular zwitterionic iodonium salts often exhibit 1D and 2D supramolecular structures that can be useful for the design of various XOFs.

In this work we prepared a range of 4-(aryliodonio)-benzenesulfonates from the 4-iodobenzoic acid and arene with Oxone as oxidant. Importantly, that new zwitterionic iodonium salts 4-(aryliodonio)-benzenesulfonate can be utilized for synthesis of first 3D XOFs bearing hexagonal pores filled with disordered water (Scheme 1).

References

1. Little M.A., Cooper A.I. // *Adv. Funct. Mater.*, 2020. – V. 30. – №41. – P. 1909842.
2. Lü J., Cao R. // *Angew. Chemie – Int. Ed.*, 2016. – V. 55. – №33. – P. 9474–9480.
3. Shankar S., Chovnik O., Shimon L.J.W., Lahav M., van der Boom M.E. // *Cryst. Growth Des.*, 2018. – V. 18. – №4. – P. 1967–1977.
4. Chongboriboon N., Samakun K., Inprasit T., Kielar F., Dungkaew W., Wong L.W.-Y., Sung H.H.-Y., Ninković D.B., Zarić S.D., Chainok K. // *CrystEngComm*, 2020. – V. 22. – №1. – P. 24–34.
5. Martí-Rujas J., Colombo L., Lü J., Dey A., Terraneo G., Metrangolo P., Pilati T., Resnati G. // *Chem. Commun.*, 2012. – V. 48. – №66. – P. 8207.
6. Raatikainen K., Rissanen K. // *Chem. Sci.*, 2012. – V. 3. – №4. – P. 1235.
7. Cavallo G., Murray J.S., Politzer P., Pilati T., Ursini M., Resnati G. // *IUCrJ*, 2017. – V. 4. – №4. – P. 411–419.
8. Catalano L., Cavallo G., Metrangolo P., Resnati G., Terraneo G. // *Top. Curr. Chem.*, 2016. – V. 373. – P. 289–310.
9. Soldatova N.S., Postnikov P.S., Suslonov V.V., Kissler T.Y., Ivanov D.M., Yusubov M.S., Galmés B., Frontera A., Kukushkin V.Y. // *Org. Chem. Front.*, 2020. – V. 7. – №16. – P. 2230–2242.

INTERIONIC HALOGEN BONDING IN HEXAIODODIPLATINATES (II)

A.I. Sumina, A.A. Eliseeva, D.M. Ivanov
PhD in Chemistry, research fellow A.A. Eliseeva

Institute of Chemistry, Saint Petersburg State University
198504, Russia, St. Petersburg, Petrodvorets, Universitetskii pr., 26, st062016@student.spbu.ru

Noncovalent interactions play an important role in many advanced areas of modern science spanning from supramolecular chemistry to molecular biology. While amount of studies on hydrogen bonding, metallophilic interactions and π -stacking is gradually stabilized, many novel types of noncovalent forces including halogen bonding (XB) were recognized only recently thus providing a new tool for crystal engineering.

It was previously shown that hexaiododiplatinate(II) can be co-crystallized with iodine-based organic compounds, forming C–I \cdots I–Pt interactions through iodide ligands. X-ray diffraction (XRD) studies revealed that $[\text{Pt}_2\text{I}_6]^{2-}$ anions behave as rectangular nucleophiles, forming XBs via two, three, and even four terminal ligands [1]. In the present work, two new compounds are discussed,

viz. $[\text{Ar}^1\text{IAr}^2]_2[\text{Pt}_2\text{I}_6]$ and $[\text{Ar}^2\text{IAr}^3]_2[\text{Pt}_2\text{I}_6]$ (Ar^1 – Ph, Ar^2 – Ph(OMe) $_3$, Ar^3 – PhCl). The complexes were obtained by the treatment of tetraethylammonium hexaiododiplatinate(II) with diaryliodonium salts. In the obtained co-crystals, we identified interionic C–I \cdots I–Pt XBs formed between the iodide ligands of the anions and I centers of the cations (Fig. 1).

The $[\text{Pt}_2\text{I}_6]^{2-}$ anions are linked to the diaryliodonium cations by the C–I \cdots I–Pt XBs thus forming extended 1D-chains consisting of heterotetrameric clusters (Fig. 2). To the best of our knowledge, this is the first example of interionic XB involving hexaiododiplatinate(II). The distances I \cdots I are less than the sum of van der Waals radii (3.8044(7) and 3.6328(6) Å for $[\text{Ar}^1\text{IAr}^2]_2[\text{Pt}_2\text{I}_6]$; 3.6954(6), 3.5888(5) and 3.9183(5) Å for $[\text{Ar}^2\text{IAr}^3]_2[\text{Pt}_2\text{I}_6]$),

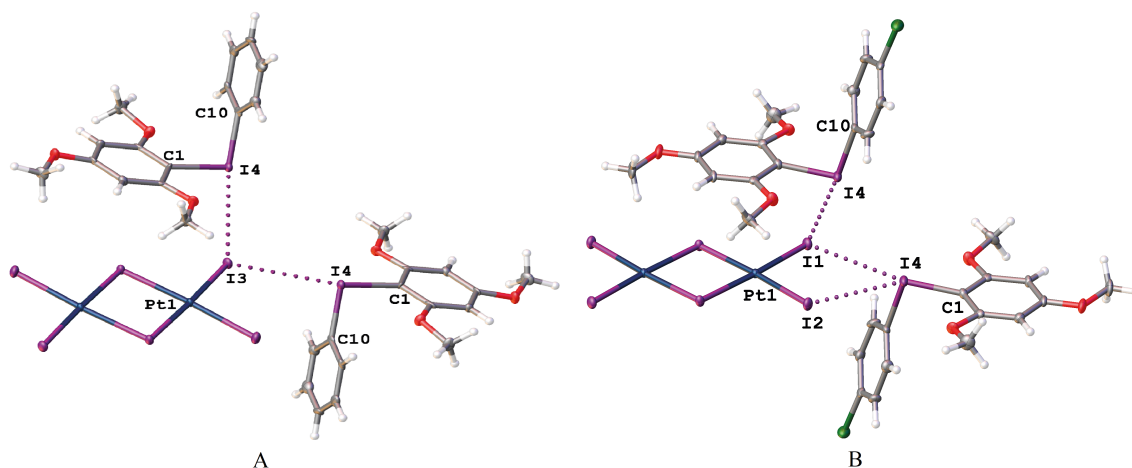


Fig. 1. Interionic C–I...I–Pt XBs in the XRD structures of $[Ar^1IAr^2]_2[Pt_2I_6]$ (A); $[Ar^3IAr^2]_2[Pt_2I_6]$ (B)

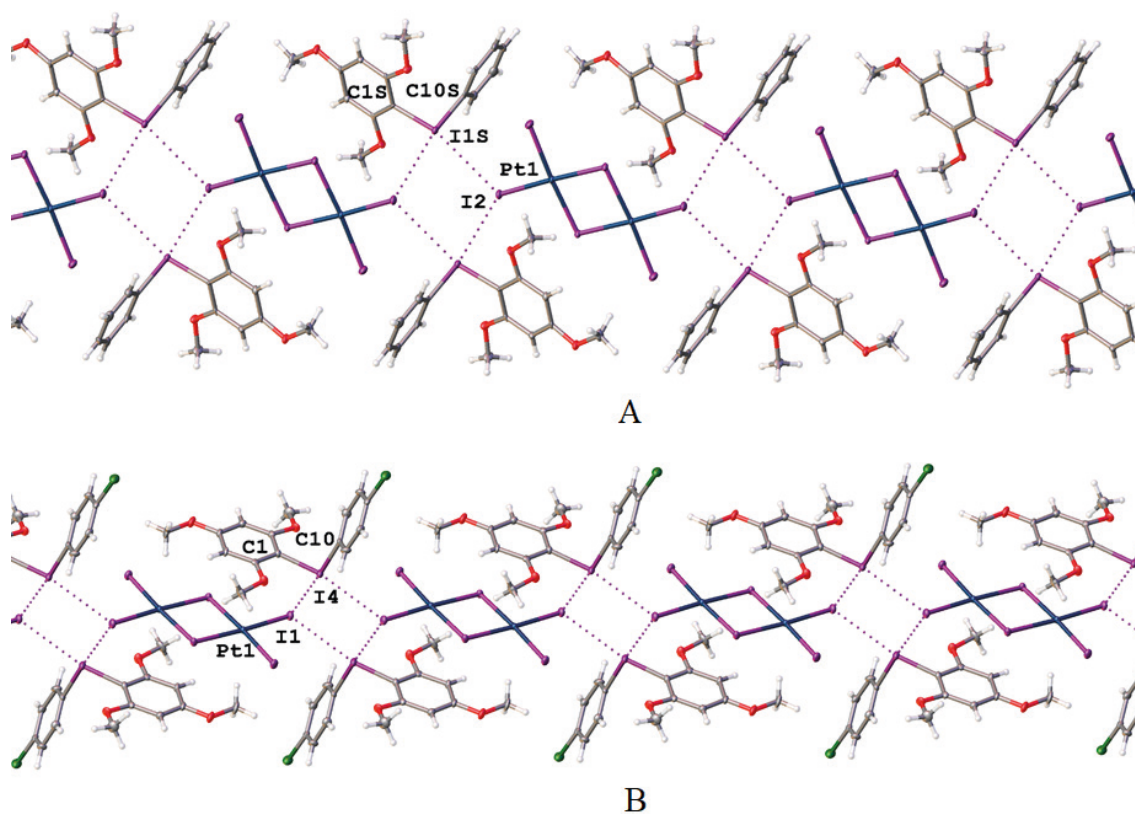


Fig. 2. 1D-chains in the XRD structures of $[Ar^1IAr^2]_2[Pt_2I_6]$ (A); $[Ar^3IAr^2]_2[Pt_2I_6]$ (B)

and the angles around the iodine centers are fulfill to the IUPAC criteria for XBs.

To conclude, we demonstrated the ability of hexaiododiplatinates(II) to form interionic XBs;

$[Pt_2I_6]^{2-}$ anions behave as XB acceptors forming C–I...I–Pt interactions via terminal iodide ligands.

Acknowledgement: This work was supported by the Russian Science Foundation (project 19-73-10016).

References

1. Eliseeva A.A., Ivanov D.M., Novikov A.S., Rozhkov A.V., Korniyakov I.V., Dubovtsev A.Y., & Kukushkin V.Y. // *Dalton Trans.*, 2020. – Vol. 49. – №2. – 356–367.