

КОМПЛЕКСЫ БИДЕНТАТНЫХ КИСЛОТ ЛЬЮИСА $Z[OB(C_6F_5)_2]_2$ ($Z = m\text{-}C_6H_4$, $p\text{-}C_6H_4$, C_6F_4 , $C_{12}F_8$) С ПИРАЗИНОМ

Глухович Е.В.¹, Кудина П.И.¹, Лисовенко А.С.¹, Казаков И.В.¹

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Россия
199034, Россия, г.Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9
e7188@mail.ru

Важной особенностью бидентатных и полидентатных кислот Льюиса является способность выступать в качестве селективных хелатирующих агентов для оснований Льюиса, обеспечивая образование молекулярных комплексов типа «гость-хозяин» [1,2]. Нами был разработан синтетический метод получения бидентатных кислот Льюиса $Z[OB(C_6F_5)_2]_2$ ($Z = m\text{-}C_6H_4$, $p\text{-}C_6H_4$, C_6F_4 , $C_{12}F_8$) путем элиминирования пентафторбензола при взаимодействии растворов $B(C_6F_5)_3$ и соответствующего спирта в толуоле [3].

В данной работе синтезированы и охарактеризованы комплексы бидентатных кислот Льюиса $Z[OB(C_6F_5)_2]_2$ ($Z = m\text{-}C_6H_4$, $p\text{-}C_6H_4$, $p\text{-}C_6F_4$, $p\text{-}C_{12}F_8$) с бидентатным основанием пиразином. Комплексы состава 1:1 обладают яркой окраской, нехарактерной для данного типа комплексов. Методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей показано, что появление окрашивания в комплексах может объясняться эффектом $\pi\text{-}\pi$ взаимодействия между ароматическим кольцом в молекуле кислоты и N-гетероциклическим кольцом пиразина.

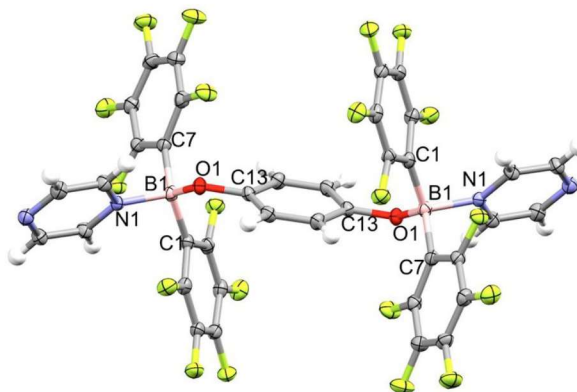


Рис. 1. Структура соединения $p\text{-}C_6H_4[OB(C_6F_5)_2]_2 \cdot 2\text{pyr}$ в кристалле.

Методом квантово-химических расчетов (M06-2X/def2-TZVP) определены термодинамические характеристики процессов диссоциации комплексов на свободные фрагменты в газовой фазе. Показано, что среди комплексов состава 1:1 наиболее энергетически стабильны соединения с одной донорно-акцепторной связью.

ЛИТЕРАТУРА

1. Niermeier P., Blomeyer S., Bejaoui Y.K.J., Beckmann J.L., Neumann B., Stammeler H.-G., Mitzel N.W. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **2019**, 58(7), 1965.
2. Weisheim E., Reuter C.G., Heinrichs P., Vishnevskiy Y.V., Mix A., Neumann B., Stammeler H.-G., Mitzel N.W. *Chem. Eur. J.*, **2015**, 21, 12436.
3. Kudina P.I., Lisovenko A.S., Kryukova M.A., Kazakov I.V. *Eur.J. Inorg.Chem.*, **2024**, e202400548

Авторы выражают благодарность ресурсным центрам СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования».