

Кирина Юлия Владимировна

Окончила бакалавриат на кафедре физической органической химии Института химии СПбГУ в 2017 г. ВКР бакалавра выполнена под руководством Вадима Юрьевича Кукушкина. Работа посвящена изучению галогенных связей в ассоциатах бромидных бис-диалкилцианамидных комплексов платины(II) с иодоформом.

Галогенные связи – это современное перспективное направление науки в области кристаллохимического дизайна. Их исследование играет важную роль как для фундаментальной, так и для прикладной химии. В работе осуществлялось изучение нековалентных взаимодействий между донором галогенной связи – иодоформом и акцепторами галогенной связи – комплексами платины(II). Осуществлён синтез этих комплексов, их сокристаллизация с иодоформом, получены данные рентгеноструктурного анализа для кристаллов, в структурах обнаружены и подробно описаны галогенные и водородные связи, а также приведена детальная характеристика исходных комплексов и ассоциатов.

В итоге проведённого исследования получено пять кристаллосольватов, содержащих множество примеров галогенных связей, в том числе и редких галогенных связей с участием металлоцентра в качестве основания Льюиса. Существование этих коротких контактов достоверно установлено в результате квантовохимических расчётов, подтверждающих наличие критической точки связи. Кроме того, идентичность строения некоторых аддуктов аналогичных бромидных и ранее изученных хлоридных комплексов с иодоформом указывает на успешное осуществление изоструктурной замены в кристаллах. Не менее интересным является факт изменения структуры ассоциата при замене растворителя, не входящего в состав кристаллосольвата.