

# ХАЛЬКОГЕННАЯ ИЛИ ГАЛОГЕННАЯ СВЯЗЬ S...I? КАК УТОЧНИТЬ ТИП НЕКОВАЛЕНТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КРИСТАЛЛЕ

Юшина И.Д., Мухитдинова С.Э., Барташевич Е.В.

Южно-Уральский Государственный университет, г. Челябинск, Челябинская область, Россия.

Вопросы идентификации и описания нековалентных взаимодействий стоят в центре современных проблем инженерии кристаллов и дизайна кристаллических материалов с требуемыми свойствами. Несмотря на то, что методы анализа электронной плотности в кристаллах позволяют получить целый ряд атомных и электронных дескрипторов связывания, неоднозначность геометрических критериев приводит к затруднениям при описании свойств нековалентных взаимодействий. Поэтому для разработки надежных критериев типа и сорта нековалентных взаимодействий требуется их тестирование на широкой выборке кристаллических структур, в том числе, включающих структуры с неоднозначной взаимной ориентацией взаимодействующих единиц.

В центре внимания в данной работе находятся органические молекулярные кристаллы с I...S взаимодействиями различных типов. В связи с высоким сродством серы к йоду в CSD представлен широкий набор соединений с множественными I...S взаимодействиями, которые только на основе геометрических критериев трудно отнести однозначно к галогенным или халькогенным связям (рис. 1а). Проанализированы различные электронные критерии для идентификации типов нековалентных взаимодействий (рис. 1б), при этом основное внимание сосредоточено на суперпозиции границ атомных бассейнов в электростатическом потенциале и электронной плотности (рис. 1в). Его применение наглядно показывает, что в паре взаимодействующих атомов часть электронов одного атома притягивается к ядру другого атома, что позволяет однозначно установить, кто в паре атомов является донором, а кто – акцептором электронов. В данном случае (рис. 1в), несмотря на ориентацию атома серы  $\pi$ -дырку трийодид-аниона, акцептором электронов является именно атом серы, а не йода, поэтому нековалентное взаимодействие в данном случае является халькогенной, а не галогенной связью. Также показаны крайние и пограничные случаи между галогенными и халькогенными связями в кристаллах органических полийодидов и нейтральных комплексов с молекулярным йодом.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, грант № 4.1157.2017/ПЧ.

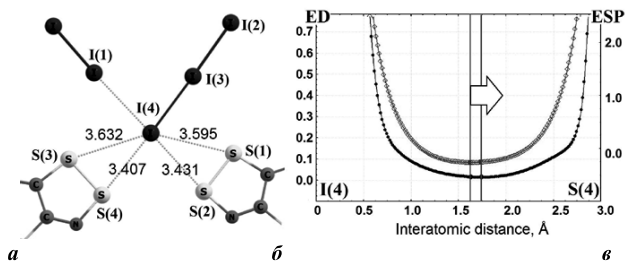


Рисунок 1. а: Множественные взаимодействия I...S; б: распределение функции локализации электронов; в: критерий суперпозиции границ атомных бассейнов в электронной плотности и электростатическом потенциале

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 17-03-00961

## Литература:

1. Bol'shakov O.I., Yushina I.D., Bartashevich E.V., Nelyubina Y.V., Aysin R.R., Rakitin O.A. // Structural Chemistry, 2017, 28(6), 1927–1934.