к.х.н. Вировец Александр Викторович

*Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск*

**Кристаллохимия халькогенидных кластерных соединений Mo, W, Re, Nb, Ta, координационных полимеров и супрамолекулярных соединений на их основе**

Материалы диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Работа нацелена на создание кристаллохимических основ для целенаправленного дизайна кристаллических структур с использованием кластерных халькогенидных и галогенидных комплексов Re, Mo, W, Nb и Ta. Методом рентгеноструктурного анализа монокристаллов определены структуры 105 новых кластерных комплексов, относящихся к трем основным классам: комплексы с ядром {M3(μ3-X)(μ,η2-X2)3}4+ ({M3X7}4+), где M = Mo, W, X = μ3-O, S, Se, Te; супрамолекулярные соединения органических кавитандов кукурбит[n]урилов (*Q*n, n=5,6) с солями треугольных халькогенидных аквакластерных катионов [M3X4(H2O)9-nCln](4-n)+ (M = Mo, W, X = S, Se, n = 1÷3) и кубановыми кластерными комплексами на их основе; цианокластерные комплексы [M6X8(CN)6]q-, [M4X4(CN)12]q- и [M4(μ4-O)X4(CN)12]q- (M = Re, Mo, W, Nb, Ta, X = S, Se, Te) и координационные полимеры, построенные за счет координации атомов азота CN-групп кластерных комплексов к катионам переходных металлов и лантаноидов.

На основании систематического анализа собственных результатов и литературных данных по кристаллическим структурам кластерных комплексов {M3X7}4+ предложена классификация специфических невалентных взаимодействий с участием атомов халькогенов μ,η2-X2-лигандов, найдены 10 супрамолекулярных синтонов, построенных на основе обнаруженных взаимодействий, и продемонстрирована возможность описания кристаллических упаковок во всех 154 структурах с использованием комбинации найденных синтонов. На основании структурных данных впервые установлен факт и найдены предпосылки образования комплементарных ассоциатов треугольных и кубановых хлораквакомплексов Mo и W с кукурбит[6]урилом, в которых 6 атомов кислорода порталов *Q*6 образуют систему водородных связей с шестью аква-лигандами, входящими в состав кластерного комплекса. В результате систематического анализа собственных и литературных данных по 100 кристаллическим структурам с использованием геометрических и топологических кристаллохимических подходов проанализирована взаимосвязь между строением цианокластерных комплексов и топологическим типом слоев и каркасов в структурах координационных полимеров на их основе.