

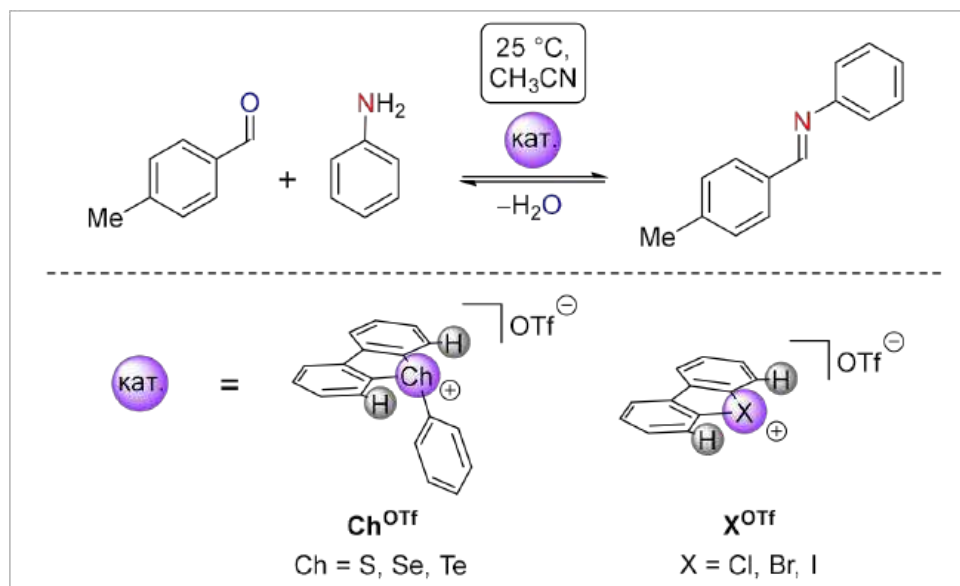


Рис. 1. Модельная реакция и структуры исследуемых катализаторов S^{OTf} , Se^{OTf} , Te^{OTf} , Cl^{OTf} , Br^{OTf} , I^{OTf}

Значения $\Delta\Delta G^\ddagger$ рассчитаны как разница между $\Delta G^\ddagger$ реакции, протекающей без катализатора, и $\Delta G^\ddagger$ реакции, протекающей в присутствии катализатора.

В ходе сделанной работы установлено, что величина $\Delta\Delta G^\ddagger$ возрастает с увеличением электростатического потенциала на σ -дырке гетероатома катализатора (V_s^{max}), что согласуется с расчётными данными, представленными в публикации [1] (Рисунок 2).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-73-10013) и СПбГУ (грант 103922061) с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования» и «Методы анализа состава вещества».

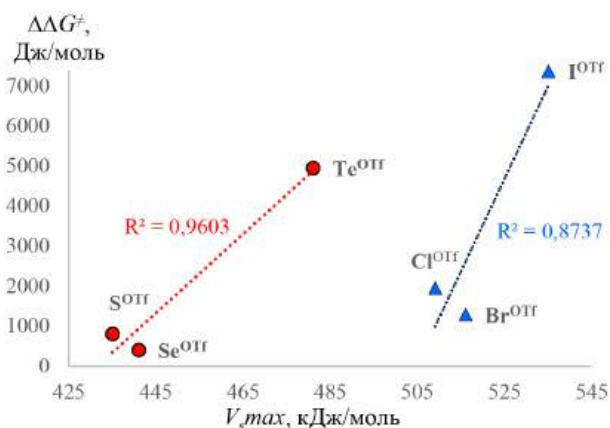


Рис. 2. Влияние V_s^{max} на величину $\Delta\Delta G^\ddagger$ модельной реакции

Список литературы

1. Novikov A.S., Bolotin D.S. // *Org. Biomol. Chem.* – 2022. – 20. – P. 7632–7639.

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ГИБРИДНЫХ ДОНОРОВ ГАЛОГЕННЫХ СВЯЗЕЙ НА ОСНОВЕ ФТОРИРОВАННЫХ АРИЛИОДИДОВ

А. Д. Раджабов

Научный руководитель – к.х.н., доцент Н. С. Солдатов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, Томск, проспект Ленина, 30

За последние десятилетия возросло внимание к области гипервалентного иода из-за уникальных свойств этого типа соединений. Одним

из наиболее изучаемых классов соединений в этой области являются диарилиодониевые соли (ДАИС). Диарилиодониевые соли широко при-

меняются для арилирования различных субстратов [1] и в органокатализе [2]. В отличие от моновалентных соединений иода с одной сигма-дыркой, ДАИС имеют две сигма-дырки в направлении двух связей C–I. Благодаря своей легкой поляризуемости, иод в виде катиона в ДАИС обладает более высоким сигма-дырочным потенциалом по сравнению с моновалентными аналогами. Все эти преимущества делают ДАИС интересным объектом в области кристаллохимического дизайна невалентно-связанных супрамолекулярных систем [3].

Одной из основных стратегий усложнения супрамолекулярных структур на основе ДАИС является усложнение как катионной, так и анионной части. Усложнение катионной части молекулы может иметь существенное влияние на характер супрамолекулярной сборки. Для этого можно внедрить дополнительные сигма-донорные центры связывания в структуру ДАИС.

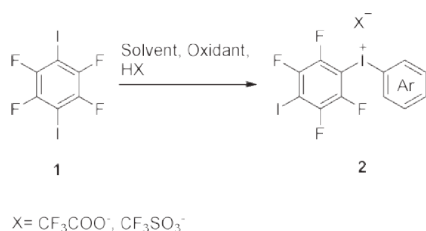


Схема 1. Синтез 4-иод-2,3,5,6-тетрафторбензол(арен)иодониевых солей

В данном исследовании мы синтезировали соли на основе 1,4-дииод-2,3,5,6-тетрафторбензола и получили несколько кристаллических структур. Полученные соединения содержат как иод в окислительном состоянии (III), так и иод (I) в структуре. Эта особенность соединений может привести к неожиданным результатам в формировании супрамолекулярных структур.

Для получения соединений **2** (Схема 1), были определены условия для селективного окисления одного из атомов иода в исходном иодсубстрате **1** с выходами до 89 %. Структура полученных соединений была подтверждена с использованием современных методов физико-химического анализа, включая рентгеноструктурный анализ (Рис. 1).

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (23-73-10091).

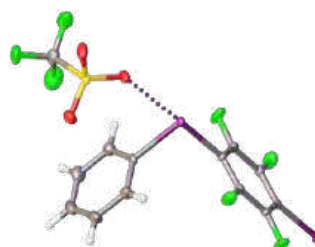


Рис. 1. Молекулярная структура 4-иод-2,3,5,6-тетрафторбензол(фенил)иодоний трифторацетата

Список литературы

1. Villo P., Olofsson B. *Arylations Promoted by Hypervalent Iodine Reagents* // *PATAI'S Chemistry of Functional Groups*. Wiley. – 2018. – P. 1–61.
2. Sutar R.L., Huber S.M. *Exploration of Halogen Bonding for the Catalysis of Organic Reactions* // *Supramolecular Catalysis*. Wiley. – 2022. – P. 413–426.
3. Soldatova N.S. et al. Zwitterionic iodonium species afford halogen bond-based porous organic frameworks // *Chem Sci*. – 2022. – Vol. 13. – № 19. – P. 5650–5658.