

## R-143

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПОРОШКОВ  
3-(ТРИФТОРМЕТИЛ)-1,3-КЕТОЕНОЛЯТОВ ЛИТИЯ,  
СОДЕРЖАЩИХ 2-, 3- ИЛИ 4-ПИРИДИНИЛЬНЫЕ ЗАМЕСТИТЕЛИ**

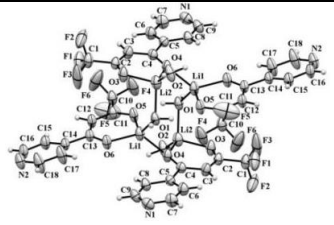
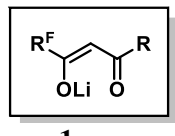
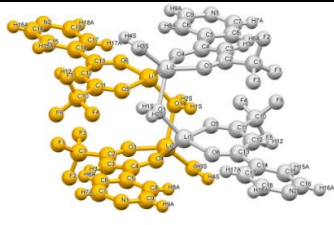



**А. В. Станкевич<sup>1</sup>, Н. С. Болтачева<sup>1</sup>, П. А. Слепухин<sup>1,2</sup>, В. И. Филякова<sup>1</sup>, В. Н. Чарушин<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620108, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22;*

<sup>2</sup>*Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19*

E-mail: stankevich@ios.uran.ru

Кетоеноляты (дикетонаты) лития **1** (R = Alk, Ar, Het-Ar) являются органической основой в синтезе гомо- и гетерометаллических комплексов, а также различных полифункциональных и гетероциклических структур. К настоящему моменту синтезирован довольно широкий круг кетоенолятов **1**, но из-за сложности получения монокристаллических образцов строение только пяти представителей данного ряда исследовано методом РСА. К их числу относятся гидраты (1:1) соединений **1b,c**. Кристаллизация кетоенолята **1a** приводит к формированию слоистой поликристаллической структуры, затрудняющей проведение полноценного структурного анализа<sup>1,2</sup>. В настоящей работе методом порошковой рентгеновской дифракции (ПРД) исследовано строение кетоенолятов **1a-c**, содержащих 2-, 3- и 4-пиридинильные заместители. Соединения **1a-c** являются исходными для формирования 4'-(фторалкил)-2,2':6',2"-, 3,2':6',3"- и 4,2':6',4"терпиридинов.

	 <p><b>1a-c</b></p>	
Строение кетоенолята лития <b>1c</b> по данным РСА <sup>2</sup>	R =  (a),  (b),  (c)	Строение кетоенолята лития <b>1c</b> по данным ПРД

Монокристалл <b>1c</b>				Порошок <b>1c</b>			
T, K	295(2)	g, г/см <sup>3</sup>	3,4539	T, K	298	g, г/см <sup>3</sup>	3,4449
a, Å	9,5512(6)	α, °	66,231(7)	a, Å	9,565(8)	α, °	66,24(6)
b, Å	10,5112(9)	β, °	87,606(5)	b, Å	10,525(10)	β, °	87,58(7)
c, Å	12,8123(9)	γ, °	63,985(7)	c, Å	12,818(10)	γ, °	63,91(5)
V, Å <sup>3</sup>	1043,556	R-Factor, %	5,6	V, Å <sup>3</sup>	1046,30	R <sub>wp</sub>	6,47
				e, Å	(2,526±0,755)×10 <sup>-5</sup>	D, нм	237,0±15,8

Уточнены значения параметров элементарной ячейки частиц порошка для соединений **1b,c**, которые имеют высокую степень согласия с данными монокристаллической дифракции (R<sub>wp</sub> < 7). Определены значения параметров элементарной ячейки соединения **1a**. Для оценки положений независимых координат атомов в соединении **1a** использованы не прямые полнопрофильные методы анализа данных дифракции и рассеяния рентгеновского излучения на порошках с циклом квантового моделирования структуры молекул. В результате в качестве решения предложена спиральная периодическая форма 2-пиридинил-3-(трифторметил)-1,3-кетоенолята лития **1a**.

#### Библиографический список

1. Синтез и строение фторалкилсодержащих 1,3-дикетонатов лития / Н. С. Болтачева, В. И. Филякова, Е. Ф. Хмара [et al.] // Росс. Хим. Журн. – 2009. – Т. 53, № 1. – С. 54–63.
2. Синтез и строение 3-(трифторметил)-1,3-дикетонатов лития, содержащих 2-, 3- или 4-пиридинильные заместители / П. А. Слепухин, Н. С. Болтачева, В. И. Филякова [et al.] // Изв. АН, Сер. хим. – 2019. – № 6. – С. 1213–1218.

*Работа выполнена в рамках государственного задания № гос рег. 124020200072-0*