

## КОМПЛЕКС SM(III) НА ОСНОВЕ ДТТА-ЗАМЕЩЁННОГО 5-ФЕНИЛ-2,2'-БИПИРИДИНА КАК АБСОРБЕНТ АТМОСФЕРНОГО CO<sub>2</sub> С ОБРАЗОВАНИЕМ 1D-ПОЛИМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ

Криночкин А.П.<sup>1,3</sup>, Аль-Саммаррайи И.Ш.А.<sup>1,2</sup>, Платонов В.А.<sup>1,3</sup>,  
Литвинов И.А.<sup>5</sup>, Копчук Д.С.<sup>1,3</sup>, Зырянов Г.В.<sup>1,3</sup>, Гавико В.С.<sup>1,4</sup>

<sup>1)</sup> ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Технологический университет Ирака, Багдад, Ирак

<sup>3)</sup> ФГБУН «Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения РАН» (ИОС УрО РАН), Екатеринбург, Россия

<sup>4)</sup> Институт физики металлов, Уральское отделение РАН, Россия, Екатеринбург, Россия

<sup>5)</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

E-mail: a.p.krinochkin@urfu.ru

## SM(III) COMPLEX BASED ON DTTA-SUBSTITUTED 5-PHENYL-2,2'-BIPYRIDINE AS AN ABSORBENT OF ATMOSPHERIC CO<sub>2</sub> WITH FORMATION OF A 1D-POLYMER STRUCTURE

Krinochkin A.P.<sup>1,3</sup>, Al-Sammarrayi I.Sh.A.<sup>1,2</sup>, Platonov V.A.<sup>1,3</sup>, Litvinov I.A.<sup>5</sup>,  
Kopchuk D.S.<sup>1,3</sup>, Zyryanov G.V.<sup>1,3</sup>, Gaviko V.S.<sup>1,4</sup>

<sup>1)</sup> Yeltsin Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> Technological University of Iraq, Baghdad, Iraq

<sup>3)</sup> Postovsky Institute of Organic Synthesis, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

<sup>4)</sup> Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

<sup>5)</sup> Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences, Kazan, Russia

The structure of crystal of samarium complex of 5-phenyl-2,2'-bipyridine, containing DTTA-residue at position C6 was studied by the XRD method. It was shown, it's structure is a one-dimensional coordination polymer, and fragments of 2,2'-bipyridine do not chelate the Sm<sup>3+</sup> cation.

Структуры на основе 2,2'-бипиридинового ядра получили широкое распространение в качестве лигандов для координации с различными металлами. Введение в них дополнительного хелатирующего узла - остатка полиаминокарбоновой кислоты (ДТТА или ДОЗА) - делает возможным их эффективное использование для хелатирования катионов лантанидов; подобные структуры представляют интерес с точки зрения фосфоресцентного иммуноанализа [1], в качестве сенсоров на катионы металлов [2], а также синглетный кислород [3]. Ценность данных соединений обуславливает интерес к

изучению их структуры, её знание важно с точки зрения прогнозирования ожидаемых свойств.

Ранее нашей научной группой были получены и охарактеризованы лантанидные комплексы на основе 5-арил-2,2'-бипиридинов [4]. В ходе настоящей работы медленным упариванием водного раствора комплекса Sm(III) были получены его кристаллы, пригодные для проведения РСА.

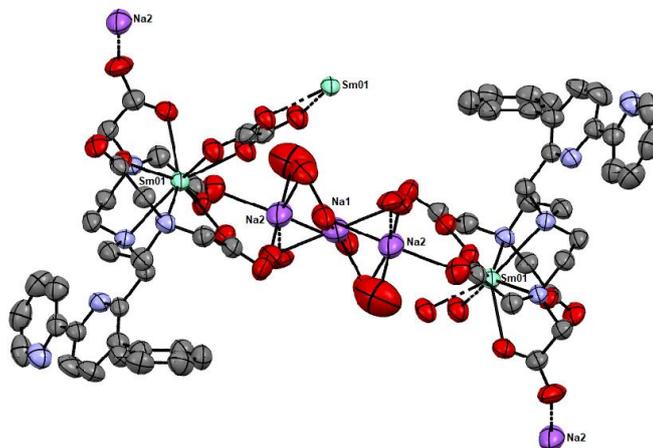


Рис. 1. Структура мономерного звена комплекса Sm(III) (1D полимера) по данным РСА

Его результаты показали, что структура полученного соединения отличается от ожидаемой. А именно, вместо одновременного участия в хелатировании катиона Sm(III) фрагментами 2,2'-бипиридина и ДТТА произошло образование сложной полиядерной структуры, образующей координационный 1D полимер. «Мономерное звено» этого полимера является центросимметричным димерным пятиядерным кластером, образованным тремя катионами натрия и двумя катионами самария(III). Геометрия этого фрагмента представлена на рис. 1.

Уточнение структуры показало, что в кристалле имеются крупные полости, в которых не обнаружено сольватных молекул; в разностных рядах Фурье электронной плотности нет сильных пиков, которые можно было бы отнести к сольватным молекулам. Объем полостей в кристалле составляет  $1062 \text{ \AA}^3$  или 24% от объема ячейки. В этом свободном объёме могут находиться до 27 молекул воды (до 7 молекул в асимметрической части кристалла). Полости представляют собой бесконечные каналы вдоль кристаллографической оси *b*, небольшие молекулы растворителя могут перемещаться в них свободно, без образования кристаллической упорядоченности.

Участвующий в хелатировании оксалат-анион предположительно был образован из содержащегося в воздухе углекислого газа, подобные превращения, катализируемые соединениями самария, ранее были описаны в литературе [5]. Способность необратимо связывать  $\text{CO}_2$  обуславливает возможность использования данного самариевого комплекса в качестве своеобразного

атмосферного очистительного агента с образованием в качестве продукта связывания необычной 1D структуры.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2022-1118 от 29 июня 2022 г.).*

1. Hovinen J., Guy P.M. // *Bioconjugate Chem.* 2009. V. 20. P. 404.
2. Hanaoka K., Kikuchi K., Kojima H. et al. // *J. Am. Chem. Soc.* 2004. V. 126. P. 12470.
3. Song B., Wang G., Tan M. et al. // *J. Am. Chem. Soc.* 2006. V. 128, P. 13442.
4. Krinochkin A.P., Korpchuk D.S., Kim G.A. et al. // *Polyhedron.* 2020. Vol. 181. art. № 114473.
5. Evans W.J., Perotti J.M., Brady J.C. et al. // *J. Am. Chem. Soc.* 2003. V. 125. P. 5204.