**Михердов, Александр Сергеевич.**

## Нековалентные взаимодействия в диаминокарбеновых комплексах палладия(II) : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.08 / Михердов Александр Сергеевич; [Место защиты: С.-Петерб. гос. технол. ин-т]. - Санкт-Петербург, 2019. - 136 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Михердов Александр Сергеевич

БЛАГОДАРНОСТИ

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Нековалентные взаимодействия

1.1.1 о- Дырка-взаимодействия

1.1.2 я-Дырка-взаимодействия

1.1.3 Идентификация о-дырка- и я-дырка-взаимодействий

1.2 Диаминокарбеновые комплексы

1.2.1 Строение диаминокарбенов и их комплексов с переходными металлами

1.2.2 Синтез диаминокарбеновых комплексов

1.2.3 Влияние нековалентных взаимодействий на структуру и свойства диаминокарбеновых комплексов

1.3 Постановка задачи и выбор объектов исследования

ГЛАВА 2 РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

2.1 Влияние нековалентных взаимодействий на конформационную стабильность диаминокарбеновых комплексов

2.1.1 Взаимодействие бис(ксилилизоцианидного) комплекса палладия(11) с 2-аминоазолами

2.1.2 Характеризация диаминокарбеновых комплексов

2.1.3 Анализ нековалентных взаимодействий в кристаллической структуре комплексов

2.1.4 Теоретический анализ нековалентных взаимодействий

2.1.5 Влияние я- дырка^"я-взаимодействий с участием изоцианидных лигандов на конформационную стабильность диаминокарбеновых комплексов

2.2 Влияние нековалентных взаимодействий на реакционную способность диаминокарбеновых комплексов

2.2.1 Взаимодействие бис(ксилилизоцианидного) комплекса палладия(11) с аминотиазолами

2.2.2 Характеризация диаминокарбеновых комплексов 26а,Ь-41а,Ь

2.2.3 Анализ нековалентных взаимодействий в кристаллической структуре комплексов 26а,Ь, 31а, 32Ь, 36а,Ь, 37Ь, 39а и 40Ь

2.2.4 Региоизомеризация биядерных диаминокарбеновых комплексов палладия(11)

2.2.5 Влияние нековалентных взаимодействий на региоизомеризацию диаминокарбеновых комплексов палладия(11)

2.3 Влияние нековалентных взаимодействий на супрамолекулярную структуру диаминокарбеновых комплексов палладия(11)

2.3.1 Взаимодействие бис(циклогексилизоцианидного) комплекса палладия(П) c аминотиазолами

2.3.2 Характеризация диаминокарбеновых комплексов 48-51 и

2.3.3 Анализ нековалентных взаимодействий в кристаллической структуре комплексов

2.3.4 Теоретический анализ нековалентных взаимодействий

2.3.5 Изучение димеризации диаминокарбеновых комплексов 56-60 в растворе

ГЛАВА 3 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

3.1 Материалы и инструменты

3.2 Экспериментальная часть к разделу

3.2.1 Синтез и характеризация

3.3 Экспериментальная часть к разделу

3.3.1 Синтез и характеризация

3.4 Экспериментальная часть к разделу

3.4.1 Синтез и характеризация

3.4.2 Расчет константы диммеризации

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена на кафедре физической органической химии Института химии Санкт-Петербургского государственного университета при финансовой поддержке РНФ (грант 14-43-00017), РФФИ (гранты 18-33-00704 мол\_а и 18-0300119) и СПбГУ (12.37.214.2016) с использованием оборудования ресурсных центров СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Образовательный ресурсный центр по направлению химия».

Автор признателен всем, кто способствовал выполнению данной работы, принимал участие в обсуждении результатов и оформлении статей. Автор благодарит научного руководителя д.х.н., профессора кафедры физической органической химии Боярского В. П., а также чл.-корр. РАН, заведующего кафедрой физической органической химии Кукушкина В. Ю. и к.х.н., доцента кафедры физической органической химии Кинжалова М. А.. Автор благодарит к.х.н., старшего научного сотрудника кафедры физической органической химии Новикова А. С. за проведение квантово-химических расчетов.

Автор признателен сотрудникам СПбГУ и ресурсных центров СПбГУ Старовой Г. Л., Золотареву А. А., Авдонцевой М. С., Суслонову В. В. за обучение методикам РСА, помощь в проведении экспериментов РСА и расшифровки структур кристаллов. Автор благодарен сотруднику ресурсного центра СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования» Иванову А. Ю. за проведение двумерных и диффузионных ЯМР экспериментов, а также помощь в интерпретации их результатов.

Диссертант благодарен всем членам научной группы кафедры физической органической химии Института химии Санкт-Петербургского государственного университета.