**Экспериментальное исследование анион-анионных контактов в ряде неорганических солей**[1]

***Нелюбина Юлия Владимировна***
*студент*
*Российский Химико-технологический Университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
*E-mail: unelya@xrlab.ioneos.ac.ru*

В настоящее время известно, что в кристаллах галогенидов щелочных металлов вследствие плотной упаковки реализуются необычные анион-анионные контакты, отвечающие аттрактивным взаимодействиям [1]. Однако проведенные нами исследования показали, что образование таких взаимодействий наблюдается также в случае некоторых минералов и неорганических соединений (Рис. 1) с неточечными ионами [2].

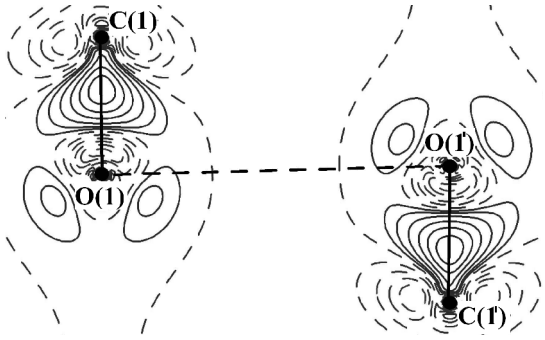


**Рис. 1.** Распределение деформационной электронной плотности в области анион… анионного контакта в кристалле арагонита.

С целью изучения природы и оценки энергии указанных контактов в ионных кристаллах проведен топологический анализ экспериментальной функции распределения электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ [3], полученной в ходе прецизионных рентгенодифракционных исследований ряда карбонатов и неорганических солей, в рамках теории Р.Ф. Бейдера «Атомы в Молекулах» [4].

Помимо изучения характера межионных контактов, проведенные исследования позволили оценить величину переноса заряда, сопровождающего образование катион-анионных взаимодействий в кристалле, и проанализировать на примере азурита $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ влияние координационного окружения катиона меди (II) на его атомные характеристики, а именно, величину заряда и заселенности 3d-орбиталей. Проведенный сравнительный анализ двух модификаций карбоната кальция, кальцита и арагонита, сделал возможным на основе суммарной энергии контактов [5] оценить их термодинамическую стабильность из данных по рентгеновской дифракции. Полученные нами результаты хорошо согласуются с данными как экспериментальных, так и теоретических исследований.

1. Luaña V., Costales A., Mori-Sánchez P., Pendás A. M. // J. Phys. Chem., 2003, 107, 4912.
2. Nelyubina Yu. V., Antipin M. Y., Lyssenko K. A. // J. Phys. Chem. A, 2007, 111, 1091.
3. Koritsanszky T. S., Coppens P. // Chem. Rev., 2001, 101, 1583. Tsirelson V. G., Ozerov R. P. Electron density and Bonding in Crystals: Principles, Theory and X-Ray Diffraction experiments in Solid State Physics And Chemistry, IOP Publishing Ltd., 1996.
4. Bader R. F. W. Atoms in molecules. A quantum theory, Clarendron Press, Oxford, 1990.
5. Espinosa E., Molins E., Lecomte C. // Chem. Phys. Letts, 1998, 285, 170. Espinosa E., Alkorta I., Rozas I., Elguero J., Molins E. // Chem. Phys. Letts, 2001, 336, 457.

[1] Тезисы доклады основаны на материалах исследований, проведенных при финансовой поддержке РФФИ (проект 06-03-32557).