

УДК 547.244

**СТРУКТУРА 6,11-ДИХЛОР-9-ДИМЕТИЛТИО-7,8-ДИКАРБА-НИДО-УНДЕКАБОРАНА
[6,11-Cl₂-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₉]****О.Н. Кажева¹, Д.А. Рудаков², Г.В. Шилов¹, О.А. Дьяченко¹, В.И. Поткин²**¹Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка²Институт физико-органической химии НАН Беларуси, Минск

E-mail: deach@list.ru

Статья поступила 3 апреля 2012 г.

Разработана методика направленного синтеза 6,11-дихлор-9-диметилтио-7,8-дикарба-нидо-ундекаборана [6,11-Cl₂-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₉] и методом рентгеноструктурного анализа установлено его молекулярное и кристаллическое строение.

Ключевые слова: галогенирование, дикарба-нидо-ундекаборат, рентгеноструктурный анализ, ядерный магнитный резонанс.

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к производным 7,8-дикарба-нидо-ундекаборат(-1) аниона, содержащим заместители разной природы в положениях В(9) и В(11), постоянно растет ввиду перспективности их использования для целей бор-нейтронозахватной терапии рака [1, 2], рентгеноконтрастной терапии [3, 4], а также для синтеза металлокарборанов, находящих применение в UNEX-технологии переработки высокоактивных отходов атомной энергетики [5—8].

Ранее галогенированием [9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₁₁] (**1**) нами была получена серия В(9,11)-дизамещенных ундекаборанов [11-X-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₁₁] (X = Cl (**2**), Br (**3**), I (**4**)) [9] и выполнено отнесение сигналов в спектрах ЯМР ¹¹B [10]. Установлено, что реакция бромирования элементарным бромом при эквимолярном соотношении реагентов приводит к образованию смеси монобромпроизводных: [11-Br-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₁₀] (**3**) в качестве основного продукта и [6-Br-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₁₀] (**5**) в качестве минорного продукта. Действие избытка брома в хлористом метиле на **1** заканчивается введением двух атомов брома в карборановый кластер: одного в открытую пентагональную плоскость C₂B₃ и второго в экваториальное положение В(6) с образованием дибромиды [6,11-Br₂-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₉] (**6**). Хлорирование **1** N-хлорсукцинимидом в ацетонитриле при кипячении приводит к индивидуальному монохлорпроизводному [11-Cl-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₁₀] (**2**) [9]. Строение молекул соединений **3—6** было определено методом рентгеноструктурного анализа монокристаллов [9].

Цель данной работы — синтез и установление структуры нового представителя дигалогензамещенных В—S производных 7,8-дикарба-нидо-ундекаборана — 6,11-дихлор-9-диметилтио-7,8-дикарба-нидо-ундекаборана [6,11-Cl₂-9-SMe₂-7,8-C₂B₉H₉] (**7**).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Синтез целевого соединения **7** осуществляли действием элементарного хлора на **1** по методике [11]. Монокристаллы **7**, пригодные для рентгеноструктурного анализа, получены путем медленной кристаллизации из раствора ацетон—вода, 2:1.