

**^1H ТА ^{31}P -ЯМР ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАМАГНІТНИХ КООРДИНАЦІЙНИХ
СПОЛУК ЛАНТАНОЇДІВ СКЛАДУ $[\text{Ln}(\text{CPh})_3 \cdot \text{Phen}]$,
ДЕ $\text{CPh} = \text{CCl}_3\text{C}(\text{O})\text{N}^-\text{P}(\text{O})(\text{OCH}_3)_2$**

Труш В. О., *Літис О. О.*, Слива Т. Ю., Амірханов В. М.
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
вул. Льва Толстого, 12, Київ, Україна, 01033
olena_litsis@univ.kiev.ua

Хімічні властивості лантаноїдів (III) та ефекти, які вони індукують у ЯМР-параметрах оточуючих ядер, роблять їх цінними об'єктами для різних застосувань. Катіони лантаноїдів (Ln) та їх хелати використовуються як інструмент у структурному аналізі з використанням ЯМР-спектроскопії. Фізичні та хімічні властивості йонів Ln (III) тісно пов'язані з властивостями Ca (II), і тому парамагнітні катіони Ln (III) є корисними зондами для структурного дослідження ЯМР-нечутливих комплексів Ca (II) в розчині. Лантаноїдні зсуваючі реагенти (ЛЗР) широко застосовують для вивчення будови органічних сполук, їх конформацій у розчині, енантімерної чистоти, виявлення хіральності тощо. В решті решт, хелати Ln (III) стають все більш важливими в медичних методах діагностики з використанням спінової ЯМР-візуалізації. З цих причин важливо розробити більш повне уявлення про структури лантанідних комплексів у розчині.

В даній роботі було досліджено ряд координаційних сполук складу $[\text{LnL}_3 \cdot \text{Phen}]$, де Ln = La-Nd, Sm-Yb; Phen – 1,10-фенантролін. За допомогою методів рентгенофазового та рентгеноструктурного аналізу було встановлено два різні типи координаційного оточення центральних атомів, що обумовило існування двох неізоструктурних серій комплексів: Ln = La-Nd (координаційний поліедр – викривлена двошаркова тригональна призма (ДТП)) та Ln = Sm-Yb (координаційний поліедр - викривлена квадратна антипризма (АП)), рис.

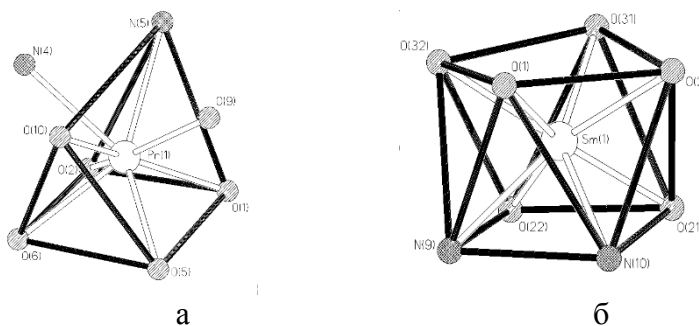


Рис. Будова координаційних поліедрів у комплексах $[\text{LnL}_3 \cdot \text{Phen}]$: (а) двошаркова тригональна призма (Ln=Pr) та (б) квадратна антипризма (Ln=Sm)

Розраховані ізотропні зсуви протонів та фосфору (Δ^{H} і Δ^{P} відповідно), константи надтонкої взаємодії. З використанням різних методів розділення ізотропного хімічного зсуву на контактну та псевдоконтактну складові встановлено, що в ацетонових розчинах $[\text{LnL}_3 \cdot \text{Phen}]$ існують два ряди ізоморфних комплексів, що корелює з результатами РСТА: для легких лантаноїдів (Ce, Pr, Nd та Sm) константа НТВ лантаноїд – фосфор складає 0.18 МГц, для важких (Tb, Dy, Ho та Er) – 0.13 МГц.