

БНЦ

А. М. Банару, Д. А. Банару

**КРИСТАЛЛОСТРУКТУРНЫЕ  
ЗАКОНОМЕРНОСТИ СТРОЕНИЯ КРИСТАЛЛОГИДРАТОВ  
С БЕСКОНЕЧНЫМИ МОТИВАМИ  $\text{H}_2\text{O}\dots\text{OH}_2$**

*Монография*



Научно-инновационный центр  
Красноярск, 2021

Г  
Б23

УДК 548.31:546

ББК 22.37:24.12

Б23

**Рецензенты:**

**Аксенов Сергей Михайлович**, к.г.-м.н.,  
Кольский научный центр РАН;

**Кононович Дмитрий Сергеевич**, к.х.н.,  
Химический факультет МГУ

**Банару, Александр Михайлович.**

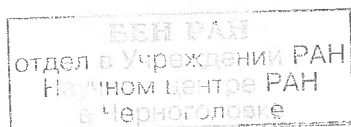
**Б23 Кристаллоструктурные закономерности строения кристаллогидратов с бесконечными мотивами  $H_2O...OH_2$  : монография / А. М. Банару, Д. А. Банару. – Красноярск: Научно-инновационный центр, 2021. – 196 с.**

**ISBN 978-5-907208-49-0**

*Монография посвящена структурным закономерностям в кристаллах молекулярных кристаллогидратов с бесконечными мотивами H-связей, образованных молекулами воды. По самым последним данным за 2021 г., на водные слои, сформированные такими связями, приходится более половины всей энергии кристалла. Это указывает на исключительную значимость этих мотивов для формирования итоговой структуры кристаллогидрата. Отдельное внимание уделено структурным данным, полученным в мире за последнее десятилетие (2010-2020 гг.).*

*Работа одного из соавторов (Д.А. Банару) в части разработки топологической модели кристаллических структур выполнена в ГЕОХИ РАН в рамках госбюджетной темы №АААА-А19-119030690063-б.*

-84367-



УДК 548.31:546  
ББК 22.37:24.12

ISBN 978-5-907208-49-0

© Банару А. М., Банару Д. А., 2021

© Оформление.

Научно-инновационный центр, 2021

## Содержание

Предисловие .....	4
Глава 1. Общие сведения о строении кристаллогидратов органических соединений по рентгенодифракционным данным .....	6
1.1. Изучение закономерностей строения молекул и кристаллов по данным Кембриджского банка .....	6
1.2. Использование Кембриджского банка для исследования водородных связей .....	11
1.3. Строение полигидратов .....	16
1.3.1. Клатратные полигидраты .....	16
1.3.2. Неклатратные полигидраты .....	26
1.4. Методы статистической обработки данных .....	45
Глава 2. Обработка данных Кембриджского банка и критерии формирования выборок .....	51
2.1. Программное обеспечение .....	51
2.2. Критерии достоверности структурных данных .....	53
2.3. Обозначения водных мотивов в кристаллах .....	59
Глава 3. Статистический анализ структурных данных по Кембриджскому банку .....	68
3.1. Распределение гидратов по пространственным группам .....	68
3.2. Анализ координации молекул воды в кристаллогидратах .....	72
3.3. Протоноизбыточность .....	77
3.4. Планы мотивы $(\text{H}_2\text{O})_m$ в кристаллогидратах .....	83
3.4.1. Островные мотивы .....	84
3.4.2. Цепочечные мотивы .....	87
3.4.3. Ленточные мотивы .....	91
3.4.4. Изомерные ленты $\text{H}_2[\text{H}_4\text{O}_3]$ .....	96
3.4.5. Слоистые мотивы .....	102
3.4.6. Изомерные слои $\text{H}[\text{H}_5\text{O}_3]$ .....	106
3.5. Непланарные мотивы $(\text{H}_2\text{O})_m$ в кристаллогидратах .....	112
3.6. Смешанные ионные мотивы $(\text{H}_2\text{O}, \text{OH}^-)_m$ в кристаллогидратах .....	119
Глава 4. Обобщенное описание водных мотивов .....	123
4.1. Следствия формулы Эйлера .....	124
4.2. Кристаллические мотивы $(\text{H}_2\text{O})_\infty$ .....	127
4.2.1. Ленты .....	127
4.2.2. Слои .....	130
4.2.3. Тетраэдрические каркасы .....	135
Глава 5. Водородная связь, стабилизированная $\pi$ -резонансом .....	139
5.1. Протяженные мотивы $\dots\text{HN}-(\text{C}=\text{C})_n-\text{C}=\text{O}\dots$ .....	147
5.2. Влияние $\pi$ -резонансной стабилизации водородных связей на температуру плавления (разложения) .....	153
5.3. Итоги и дальнейшие перспективы .....	164