

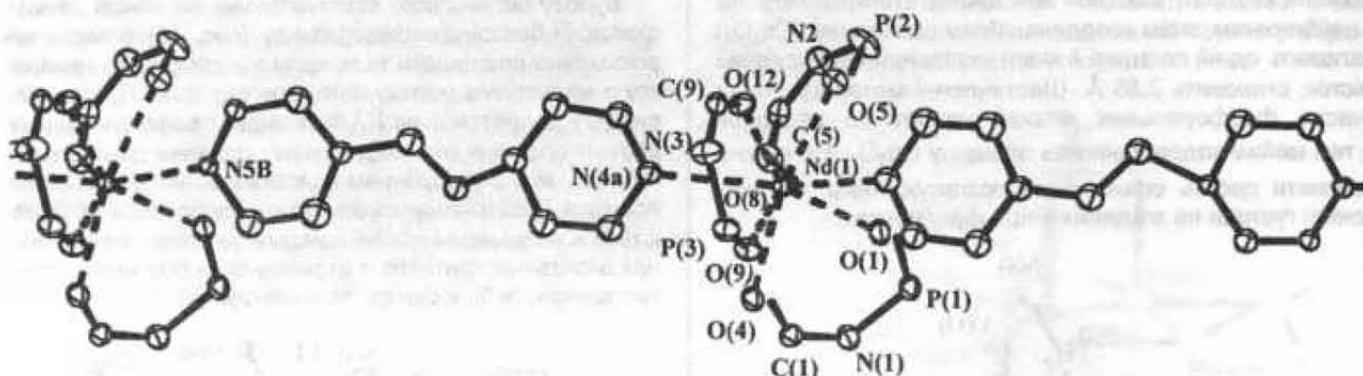


Рис. 14. Координаційні полімери на основі КАФ лігандів. Фрагмент структури комплексу $[NdL_3 \cdot \mu-(DPE)]_n$ (HL = диметил-N-трихлороацетиламідфосфат)

Підсумовуючи розглянуті дані, дійшли таких висновків:

- "прости" солі складу ML_2 або ML_3 (де M – d- або f-метал, а L – карбациламідфосфатний ліганд у депротонованому стані), мають ненасичену координаційну сферу та, як наслідок, схильні до утворення ди-, тетра- й полімерних координаційних часток;

- для комплексів d-металів на основі КАФ лігандів тенденція до утворення асоціатів є настільки характерною, що одержання моноядерних комплексів перетворюється на досить складне завдання. Металеві центри об'єднуються за рахунок місткових атомів оксигену фосфорильних або карбонільних груп. Наявність донорних центрів у складі замісників біля фосфорильних, чи карбоксильних груп також сприяє утворенню асоціатів;

- ди- та полімерні комплекси лантаноїдів вдалося синтезувати за рахунок використання стеричних особливостей лантаноїдних *трис*-комплексів та додаткових нейтральних лігандів, що виконують бідентатно-місткову функцію;

- на основі одержаних експериментальних даних можна очікувати одержання в майбутньому різнометалевих ди- та полімерних комплексів d- та f-металів на основі КАФ лігандів із специфічними магнітними властивостями.

1. Амирханов В.А. Координаційна хімія карбациламідфосфатів : Дис. ... д-ра хім. наук. – К., 2002. 2. Lanthanide probe in life, chemical and earth sciences, theory and practice / Ed. J.C.G. Buenzli, G.R. Chopin. – Amsterdam, 1989. 3. Moril T. Lanthanide shift reagents in stereochemical analysis. – Deerfield Beach, FL, 1986. 4. Morton R.C. // Anal. chem. – 1990. – Vol. 62, № 17. – P. 1841–1845. 5. Silva F.R., Goncalves de Longo R., Malta O.L. et al. // Phys. chem. chem. phys. – 2000. – Vol. 2, № 23. – P. 5400–5403. 6. Skopenko V.V., Amirkhanov V.M., Silva T.Yu et al. // Uspekhi Khimii (Russ. Chem. Rev.). – 2004. – Vol. 73 (8). – P. 797. 7. Trush E.A., Amirkhanov V.M., Ovchinnikov V.A. et al. // Polyhedron. – 2003. – Vol. 22. – P. 1221–1229. 8. Trush V.A., Gubina K.E., Amirkhanov V.M. et al. // Polyhedron. – 2005. – Vol. 24. – P. 1007–10014. 9. Trush V.A., Swiatek-Kozłowska J., Skopenko V.V., Amirkhanov V.M. // Z. naturforsch. – 2001. – Vol. 56b. – P. 249–255. 10. Wenzel N.J. NMR Shift Reagents. – Boca Raton, FL, 1987.

Надійшла до редколегії 19.12.06

И. Еременко, д-р хім. наук, В. Новоторцев, д-р хім. наук, В. Овчаренко, д-р хім. наук

ВЫСОКОСПИНОВЫЕ КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ 3d-МЕТАЛЛОВ – ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МАГНЕТИКИ

На примерах полиядерных структур с высокоспиновыми атомами 3d-металлов VII и VIII групп рассмотрены случаи проявления ферромагнетизма, а также способы химического конструирования магнитоактивных молекул.

The phenomena of ferromagnetism as well as ways of chemical designing of magnetoactive molecules are considered for the cases of polynuclear structures with high-spin 3d-metals atoms of the VII and VIII groups.

Введение. Ферромагнетики принадлежат к числу тех материалов, которые составляют фундамент современной цивилизации. Известны два типа ферромагнетиков – металлические (железо, кобальт, сплавы типа Co_5Sm и др.) и ионные (типа Fe_3O_4 , $CoFe_2O_4$ и др.). И в тех, и в других носителями магнетизма являются атомы (или ионы) металлов с незаполненными внутренними d- или f-электронными оболочками; именно d- и f-электроны ответственны за магнетизм.

Однако на закате ушедшего века на химической сцене появился новый, третий тип – молекулярные ферромагнетики. "Строительным" материалом для них являются органические парамагнитные молекулы (стабильные радикалы и полирадикалы, высокоспиновые молекулы типа карбенов и т.д.) или парамагнитные комплексы, в которых ионы металлов, носители магнетизма, заключены в лигандную оболочку из органических молекул. Химики научились производить такой "спиновый" материал разнообразной структуры и спиновой плотности и конструировать

из него новые молекулярные магнетики. При этом принципиально важным моментом является то, что сборка материала ведется из отдельных молекул управляемыми химическими методами.

Разработка принципов получения молекулярных магнетиков и понимание присущих им магнито-структурных корреляций является фундаментальной проблемой. Фактически, исследователи, работающие в области дизайна молекулярных магнетиков, бросили вызов природе, ограничившей круг природных магнитных материалов небольшим количеством переходных металлов или их оксидов и направляющей исследователей при расширении числа магнитных материалов в основном к сплавам металлов и керамическим оксидам. Проводимые же в области дизайна молекулярных ферромагнетиков исследования позволяют резко расширить круг магнитоактивных соединений и магнитных материалов, т.е. существенно пополнить элементную базу новой техники. Кроме того, возможность дизайна мо-

лекулярных магнетиков с использованием обычных мягких синтетических подходов, типичных для органической химии и химии координационных соединений, таит в себе принципиальную возможность создания новых магнитных материалов с помощью технологии альтернативной традиционным металлургическим методам и энергоемким методам получения оксидных магнитоактивных керамик. Нельзя не отметить, что число исследований в области дизайна молекулярных ферромагнетиков стремительно нарастает. При этом заложенная в самой идее молекулярных ферромагнетиков высокая *интеграционность* проблемы вовлекла в данную область как специалистов, работающих в неорганической, металлоорганической или органической химии, так и специалистов в области материаловедения, химической физики, физики твердого тела, физики магнетизма, биологии и медицины.

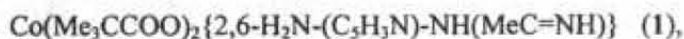
Бурное развитие исследований в области молекулярного магнетизма привело к созданию новой области экспериментальных и прикладных исследований – *спинтроники* [1, с. 104], в базе которой лежит систематическая разработка синтеза молекулярных магнетиков, необходимых для их детальной физико-химической паспортизации и последующих технологических испытаний.

Уже сегодня отчетливо видны высокие инновационные технологии создания молекулярных магнитов на основе одной молекулы (одномолекулярные магниты) и области использования новых магнитных материалов: магнитная защита от низкочастотных полей; трансформаторы и генераторы малого веса; гибкие низкотемпературные процессоры; магнитные накопители информации нового типа; увеличение плотности информации; квантовый компьютер; манипуляторы поляризованного света в интегральных оптических устройствах; жидкие и коллоидные магниты; генерация магнитных изображений и контроль за имплантатами в медицине; создание магнитных материалов и устройств, не требующих изоляции при контакте с токопроводящими материалами [6, с. 124; 5]. При этом потенциальными потребителями материалов данного типа могут быть: научное приборостроение; криогенная техника; современные информационные технологии; медицина и энергетика.

Молекулярные магнитные кристаллы – ферромагнетики нового типа. Молекулярный магнетизм – это по сути супрамолекулярное явление, поскольку он порождается коллективными свойствами компонентов, обладающими неспаренными электронами, и зависит от их относительного расположения в организованных ансамблях и кристаллических структурах. Инженерия молекулярных магнитных систем требует поиска новых высокоспиновых металлосодержащих компонентов с соответствующим размещением их в подходящих полиядерных или супрамолекулярных ансамблях так, чтобы в результате обменных взаимодействий между спинами возникало их упорядоченное расположение [5, 11, 10, 18]. Несомненно, в этой области особый интерес представляет поиск веществ, обладающих молекулярным ферромагнетизмом.

Проблема определенной межмолекулярной организации молекул в высокоэффективный обменно-связанный макроансамбль – ключевая в конструировании молекулярных магнетиков, в том числе, молекулярных ферри- и ферромагнетиков. Однако для

большинства известных типов молекулярных магнетиков практически полностью отсутствуют методы управляемого воздействия на структуру многоспиновой системы. Как правило, проявление ферромагнетизма для кристаллов высокоспиновых комплексов пока еще дело случайное, хотя некоторые корреляции между структурой кристалла и его магнитными свойствами все-таки уже найдены. Одним из таких примеров является соединение



содержащее атом кобальта(II) ($S = 3/2$) в тетраэдрическом окружении хелатного амидинового лиганда и двух концевых карбоксилатных групп [3; 7]. Кристаллы 1 проявляют магнитные свойства весьма необычные для мономерной молекулы. В области гелиевых температур у комплекса появляются ферромагнитные свойства, причем при температуре 2 К наблюдается петля гистерезиса с коэрцитивной силой 2 КОе (рис. 1). Такой эффект возможен из-за наличия межмолекулярных спин-спиновых взаимодействий, которые особенно сильно проявляются при низких температурах за счет сжатия элементарной ячейки кристалла и, как результат, сближения магнитных центров. Анализ кристаллической упаковки молекул 1 в кристалле при -110°C показал наличие водородных связей $\text{O}(\text{OOCR})\dots\text{H}-\text{N}(\text{амидин})$ и стэкинг взаимодействия между соседними молекулами (рис. 2), которые потенциально могут служить каналами межмолекулярного обмена [7].

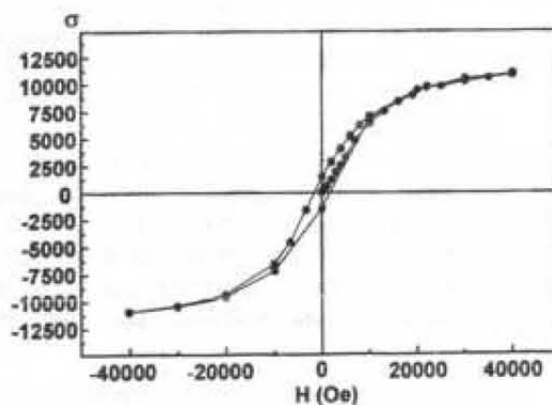
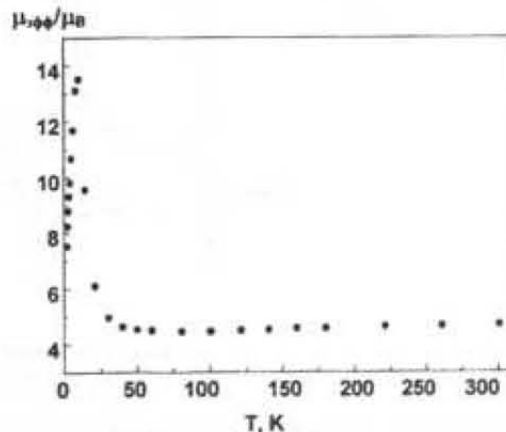


Рис. 1. Магнитные свойства $\text{Co}(\text{Me}_3\text{CCOO})_2\{2,6\text{-H}_2\text{N}(\text{C}_5\text{H}_3\text{N})\text{NH}(\text{MeC}=\text{NH})\}$

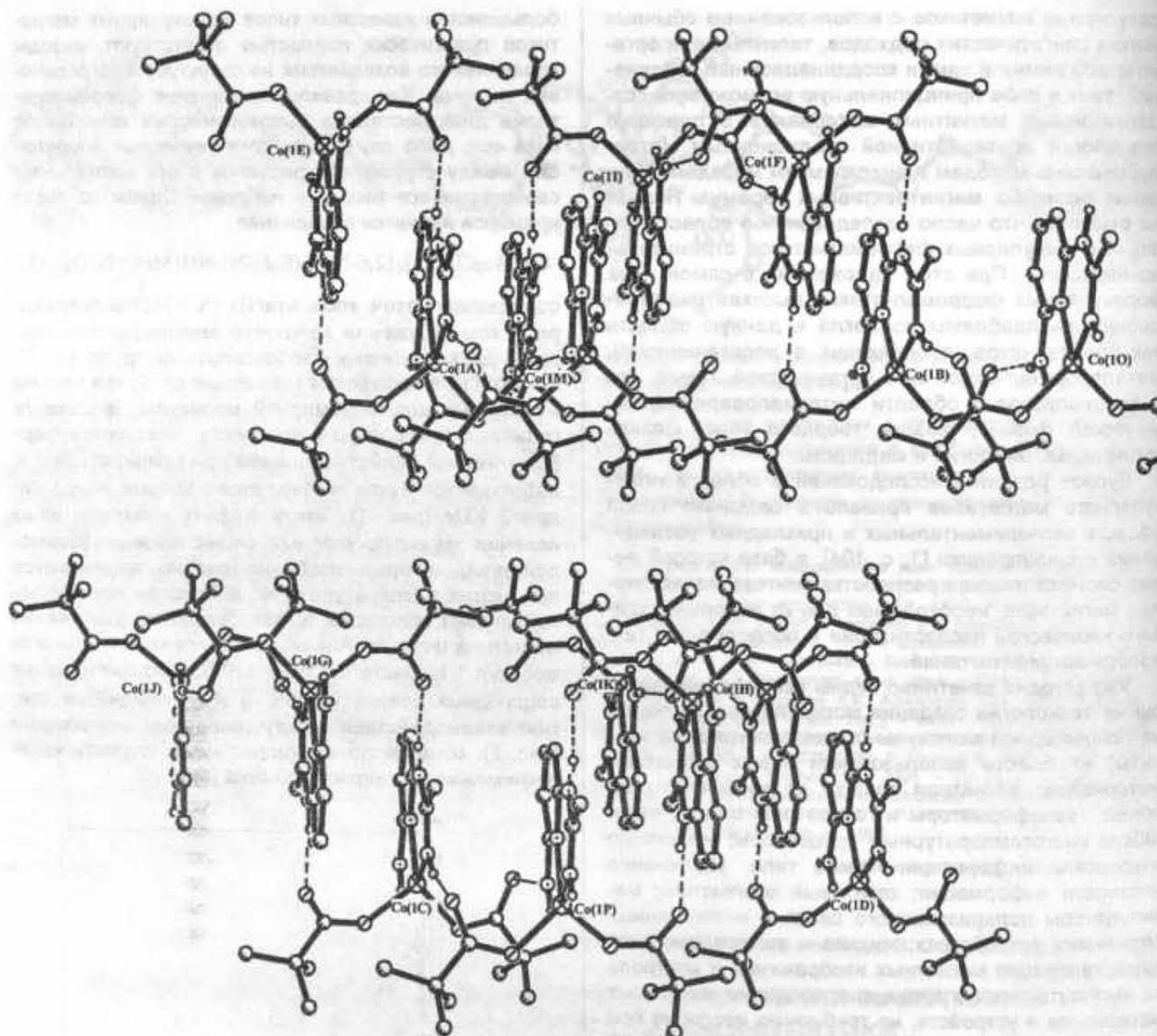
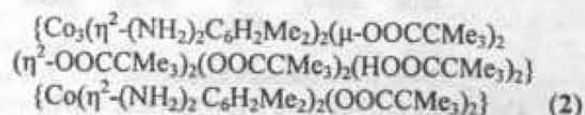


Рис. 2. Фрагмент кристаллической упаковки мономера $\text{Co}(\text{Me}_3\text{CCOO})_2(\text{H}_2\text{N}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})\text{NH}(\text{MeC}=\text{NH}))$

Формальное "диамагнитное разбавление" исходного "спинового" материала в кристалле путем появления сольватных молекул бензола и пивалиновой кислоты приводит к драматическим изменениям магнитных свойств вещества, которое проявляет антиферромагнитные характеристики. При этом существенно меняется кристаллическая упаковка, и молекулы магнитного мономера оказываются блокированы диамагнитными бензолом и кислотой (рис. 3) [7].

Кроме "диамагнитного" встречается и "магнитное" разбавление в кристалле магнетиков, которое иногда приводит к неожиданным результатам. Так, сокристаллизат



состоит из магнитного мономера с атомом $\text{Co}(\text{II})$ ($S = 3/2$) в октаэдрическом окружении из двух хелатных орто-фенилендиаминовых лигандов и двух карбоксилатных групп с концевым типом координа-

ции, а также из магнитной трехъядерной молекулы, в которой высокоспиновые атомы кобальта связаны за счет карбоксилатных мостиков. Оба этих компонента формируют супрамолекулярные цепи (вдоль оси c) с чередующимися моно- и трехъядерными магнитными фрагментами за счет водородных связей между протонами NH_2 -групп лиганда мономера и атомами O -хелатирующих карбоксилатных анионов и $\text{C}=\text{O}$ -групп координированных молекул пивалиновой кислоты периферийных атомов тримера ($\text{H}(1\text{N}3)\dots\text{O}(8)$ 2.107(7)Å, $\text{H}(1\text{N}4)\dots\text{O}(6)$ 1.997(5)Å) [9] (рис. 4).

Ниже 5 К для 2 наблюдается магнитный фазовый переход и петля гистерезиса с коэрцитивной силой 2 КОе (рис. 5). Это первый пример полимерного кобальторганического ферромагнетика [2]. Наконец, в кристалле возможно образование ансамблей из металлосодержащих магнитных молекул и органических радикалов, также имеющих неспаренные электроны [9; 12; 14; 15; 17].

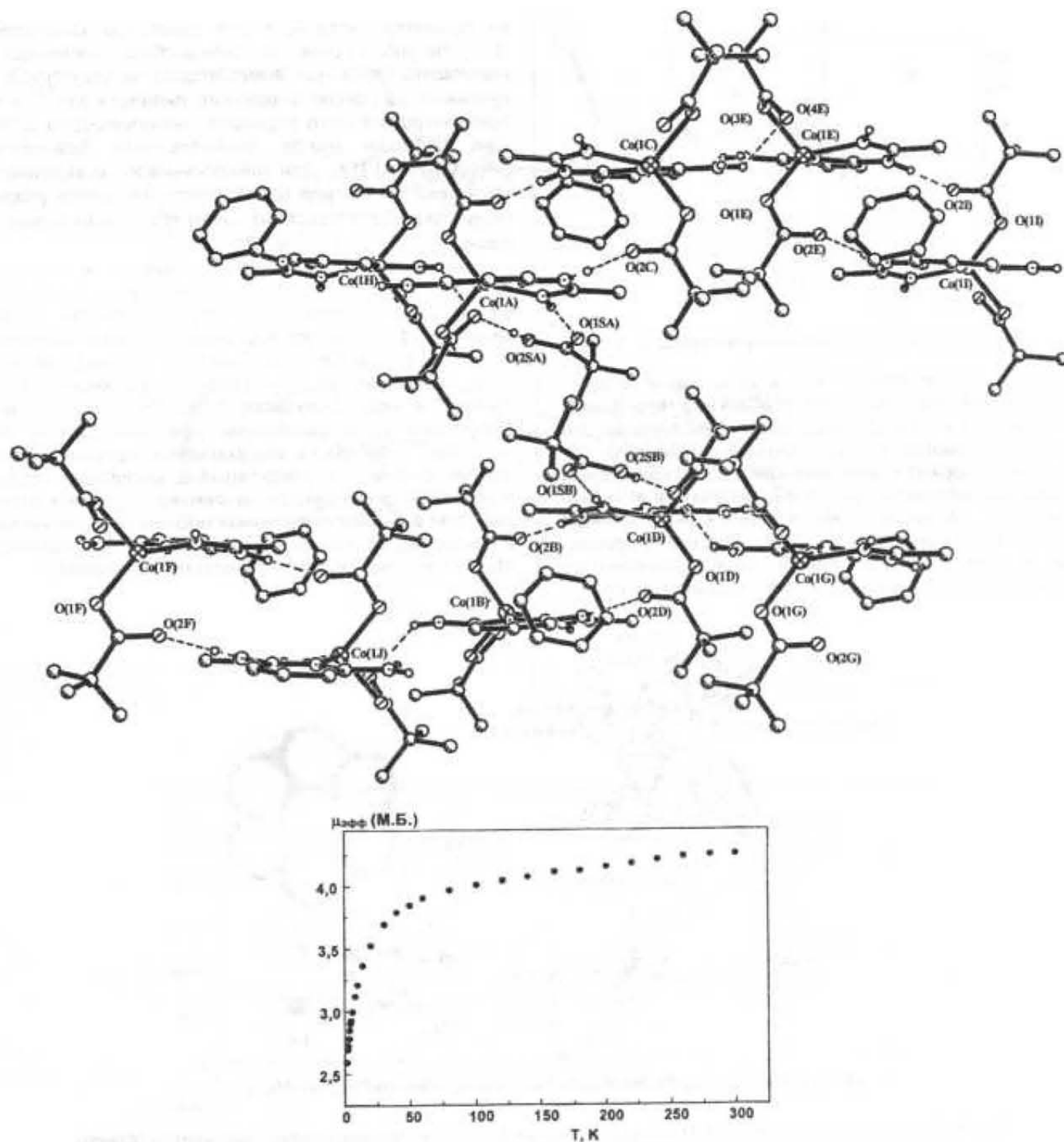


Рис. 3. Фрагменты упаковки молекул комплекса 1 в сольвате с бензолом и пивалиновой кислотой и температурная зависимость магнитного момента сольвата $1 \cdot \text{C}_6\text{H}_6 \cdot 0.5\text{HOOCMe}_3$

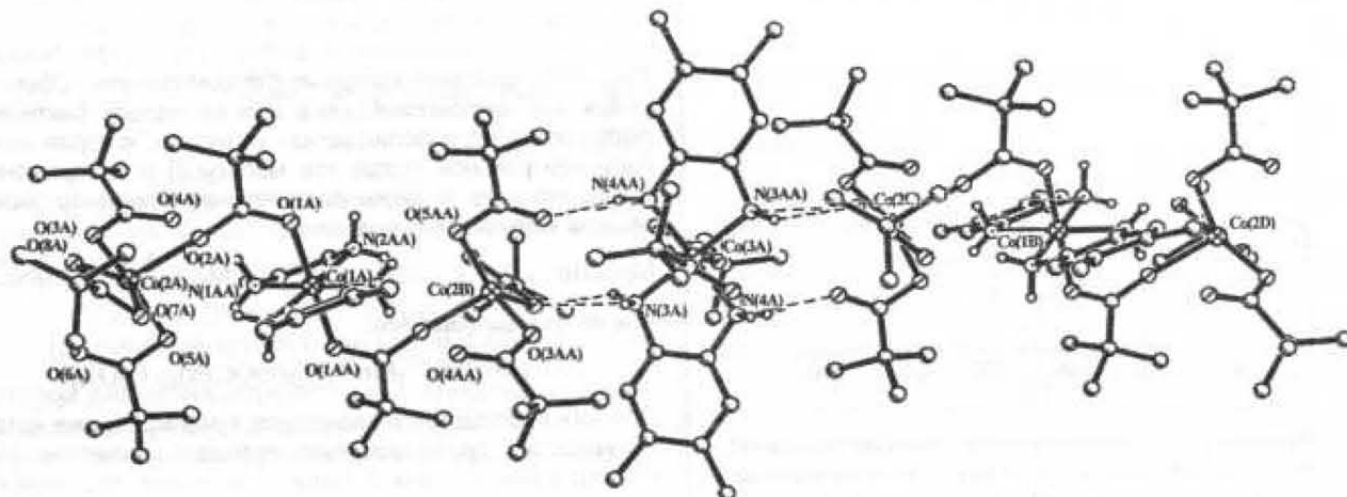


Рис. 4. Фрагмент супрамолекулярной цепи в кристалле 2

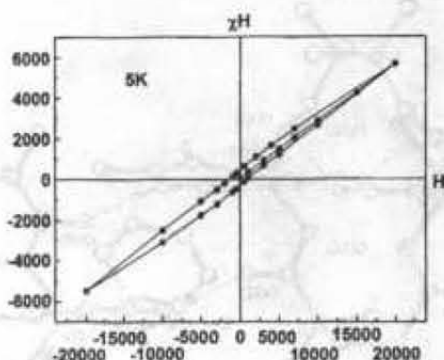


Рис. 5. Магнитное поведение комплекса 2

Открыт принципиально новый путь сборки гетероспиновых магнетиков на основе стабильных нитрокислородных радикалов и полиядерных соединений (рис. 6). Эти объекты отличаются высокой функциональностью, поскольку не содержат примесных или магнитонеактивных композитных включений. Их можно получать в виде монокристалла, т.е. сразу в виде изделия с выделенными осями магнитной анизотропии. Данные объекты принадлежат к числу наиболее перспективных компонентов современной элементной базы для создания на их осно-

ве логических устройств для квантовых компьютеров [1; 6]. На рис. 6 приведен пример сборки магнетика, обладающего каркасной алмазоподобной структурой, полученного на основе 6-ядерного пивалата $Mn^{II,III}$ и нитронитрокислородного радикала, выполняющего связующую функцию между полиядерными фрагментами $[Mn_6(O)_2Piv_{10}]$ [14]. Для многоспинового молекулярного магнетика такого типа наблюдается магнитное упорядочение ниже 3.5 К со спонтанным магнитным моментом, равным $2800 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{моль}$ (2 К).

Это небольшое количество примеров молекулярных ферромагнетиков наглядно демонстрирует широчайшие возможности синтетической координационной химии в качестве эффективного инструмента сборки "магнитных" кристаллов. Однако такие удачные примеры являются лишь песчинками на фоне огромных терриконов "пустой породы" в виде комплексов с довольно тривиальными магнитными характеристиками. При этом следует заметить, что, несмотря на молекулярную природу рассмотренных систем, их удивительные магнитные свойства в основном формируются за счет коллективных взаимодействий в супрамолекулярных ансамблях образующихся в кристаллах за счет различных невалентных взаимодействий между молекулами "спиновой" материала.

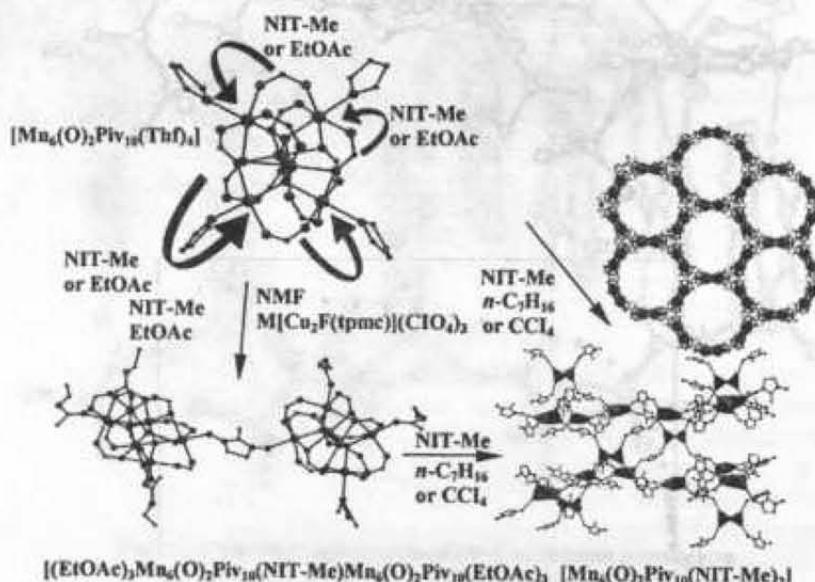


Рис. 6. Сборка гетероспинового 3-D алмазоподобного каркаса из молекулярных фрагментов (схема)

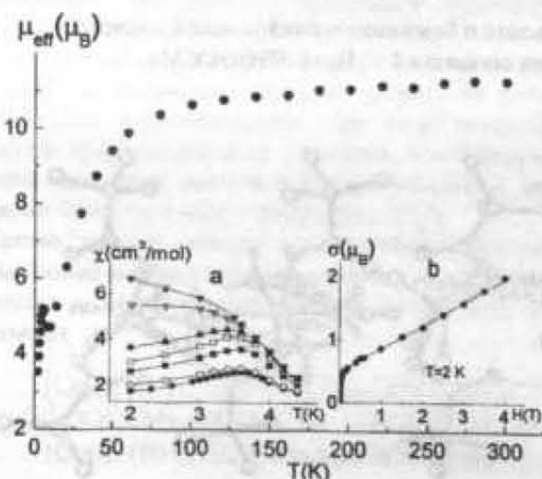


Рис. 7. Функция $\mu_{\text{eff}}(T)$ для гетероспинового магнетика (•). На вставке а: зависимость $\chi(T)$ в различных магнитных полях: 6 Э (•), 14 Э (◻), 24 Э (◻), 44 Э (◻), 100 Э (◻), 150 Э (◻), и 200 Э (◻); на вставке б: кривая намагниченности

Одномолекулярные магниты (Single Molecular Magnets). К еще более редкому классу ферромагнетиков относятся системы, магнитные свойства которых определяются лишь внутримолекулярным магнетизмом. Это так называемые SMMs или "Single Molecular Magnets" – одномолекулярные ферромагнетики. Обменно-связанным макроансамблем в этих веществах фактически оказывается одна полиядерная структура, которая может быть нейтральной (тогда это молекула) или заряженной (тогда это ион). К таким соединениям, например, можно отнести нейтральный комплекс

$Mn^{II}_3Mn^{III}_{26}Mn^{IV}_{24}(OH)_8(O_2CCH_2CMe_3)_{32}(H_2O)_2(MeNO_2)_4$

или анионный комплекс



Для них наблюдается квантовое тунелирование намагниченности, существование которого возможно для полиядерных систем с множественными состояниями различной мультиплетности, и петли гистерезиса при низких температурах [16; 8; 13].

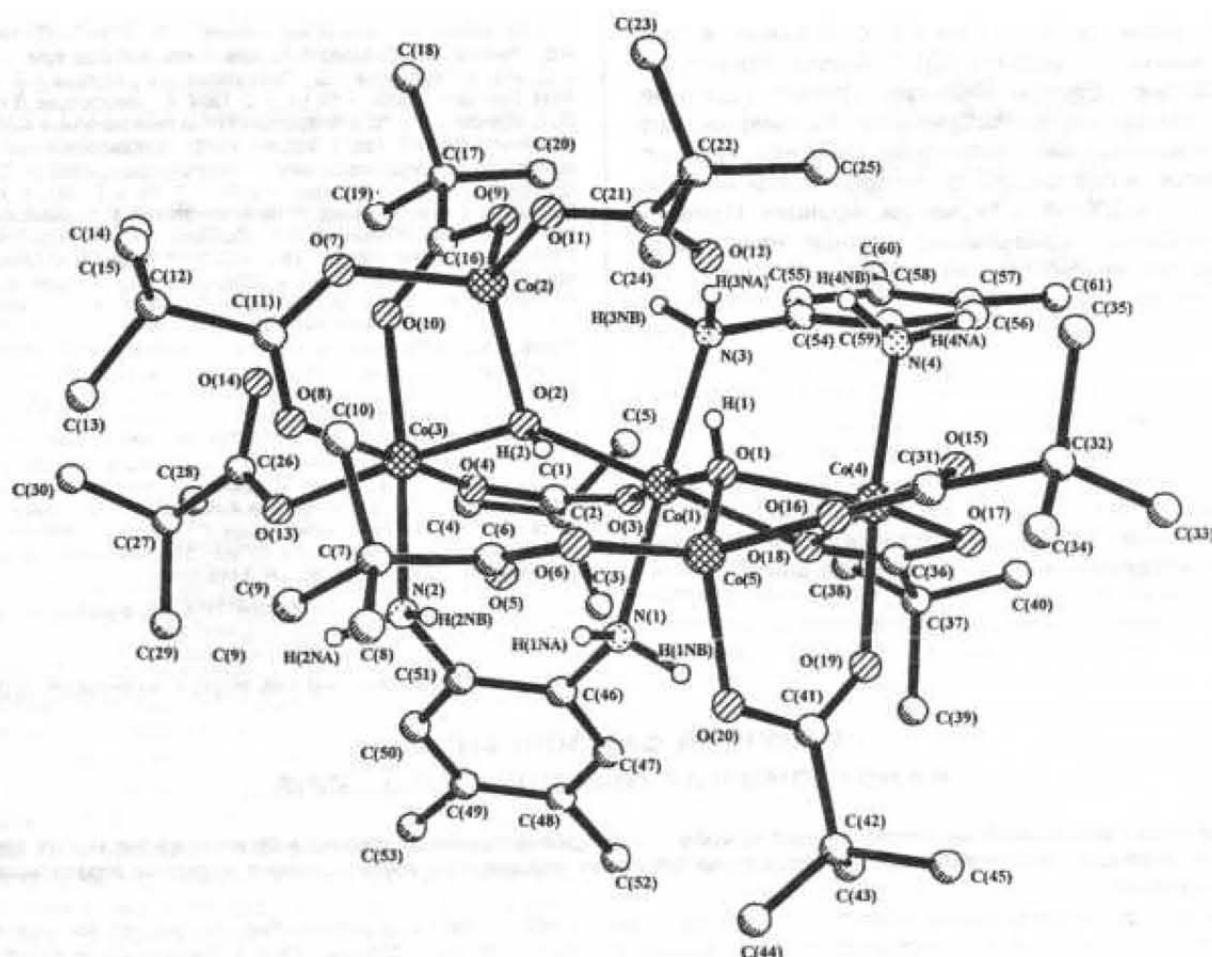


Рис. 8. Строение самого малого магнита в мире на основе 5-ядерного комплекса 3

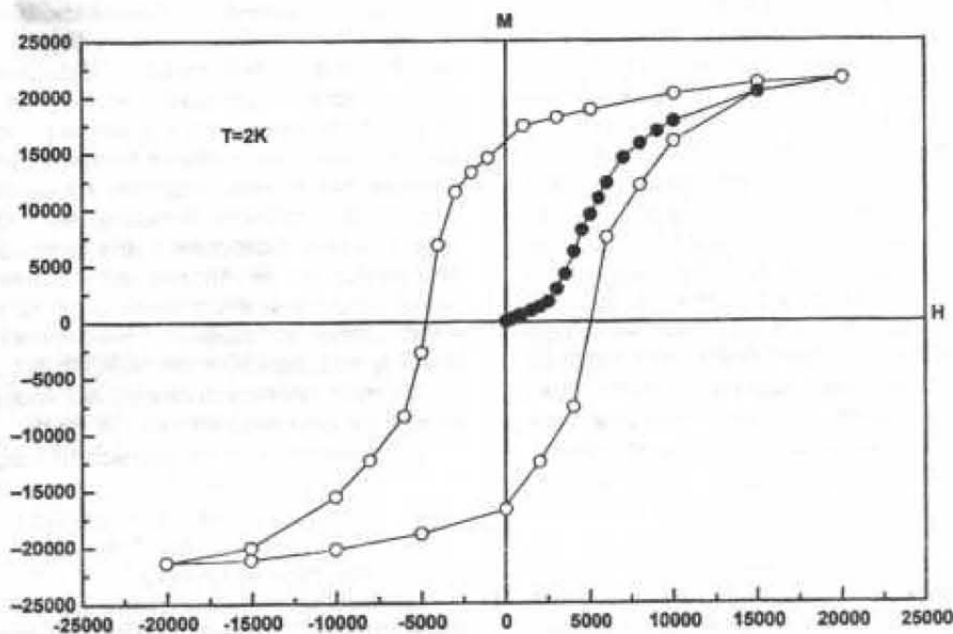
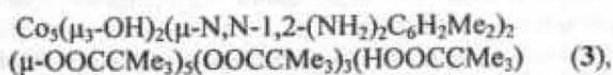


Рис. 9. Магнитное поведение соединения 3

Достигнут рекордный минимальный "молекулярный предел" для магнитных материалов. На рис. 8 приведено строение 5-ядерного комплекса



в котором два металлотреугольника объединены двумя мостиковыми $\mu_3\text{-OH}$ группами.

Ниже 12 К комплекс переходит в магнитоупорядоченное состояние и при 2 К его намагниченность достигает $\sim 20000 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{моль}$. При этом петлю гистерези-

са характеризует большая величина коэрцитивной силы 5 КОе (рис. 9) [4, с. 33].

В итоге представленные примеры несомненно демонстрируют актуальность развития этого направления, которое можно сформулировать как химия молекулярных магнитоактивных систем и материалов. Работы по синтезу высокоспиновых молекул и поиску молекулярных магнетиков активно развиваются в Японии, Франции, США, Италии, Великобритании, Китае, Испании. Проблемы, возникающие при исследовании магнитоактивных веществ и материалов, многогранны, и поскольку для их комплексного решения необходим высокий уровень инте-

грації спеціалістів різних областей знання, в країнах Тихоокеанського басейну (США, Канада, Японія, Китай) і Західної Європи (Франція, Італія, Німеччина, Іспанія, Швейцарія, Великобританія, Австрія) уже створені регіональні Міжнародні комітети, координуючі розвиток досліджень по молекулярним магнетикам, а в 2000 і 2001 гг. в Німеччині, Франції, Італії і Іспанії створені Національні наукові комітети по проблемам молекулярного магнетизму, які в наші часи об'єдналися в єдину європейську мережу. В деяких країнах СНГ, наприклад, в Росії, в Україні і в Молдові ця проблематика також розвивається, хоча темпи її розвитку суттєво зменшуються через недостаток фінансування і відсутність належного рівня співпраці між партнерами. Можливо лише сподіватися на покращення ситуації за рахунок появи належного взаємодія між національними науковими фондами Росії, України і Молдови, країн, де наукові зв'язки між ученими традиційно сильні.

1. Бучаченко А.П. Химия как музыка. — М., 2004. — С. 104.
2. Малков А.Е., Фомина И.Г., Сидоров А.А. и др. // Изв. АН. Сер. хим. — 2003. — № 2. — С. 489.
3. Михайлова Т.Б., Пахмутьева Е.В., Малков А.Е. и др. // Изв. РАН. Сер. хим. — 2003. — № 10. — С. 1994.
4. Новоторцев В.М., Еременко И.П., Малков А.Е. и др. // Ферромагнитные пентадентерные карбоксилатные комплексы Co(II) // Тез. I Всерос. конф. "Высокоспиновые молекулы и молекулярные ферромагнетики". — Черноголовка, 2002.
5. Сагдеев Р.З., Овчаренко В.И. // Успехи хим. — 1999. — Т. 68. — С. 381.
6. Уильямс Р.С. Молекулярная электроника // Нанотехнология в ближайшем десятилетии. — М., 2002.
7. Фомина И.Г., Сидоров А.А., Александров Г.Г. и др. // Изв. АН. Сер. хим. — 2004. — № 7. — С. 1422.
8. Bial G.-Q., Kuroda-Sowa T., Konaka H. et al. // Inorg. Chem. — 2004. — Vol. 43. — P. 4790.
9. Ikorshii V.N., Ovcharenko V.I., Shvedenkov Y. et al. // Inorg. Chem. — 1998. — Vol. 37. — P. 4360.
10. Khan O. Molecular Magnetism. — N. Y., 1993.
11. Khan O. // Acc. Chem. Res. — 2000. — Vol. 33. — P. 647.
12. Koreneva O.V., Romanenko G.V., Shvedenkov Yu.G. et al. — 2003. — Vol. 22 (14–17). — P. 2487.
13. Kuroda-Sowa T., Nogami T., Konaka H. et al. // Polyhedron. — 2003. — Vol. 22. — P. 1975.
14. Ovcharenko V., Fursova E., Romanenko G., Ikorshii V. // Inorg. Chem. — 2004. — Vol. 43 (11). — P. 3332.
15. Ray P., Ovcharenko V.I. Copper(II) Nitroxide Molecular Spin-Transition Complexes // Magnetism: Molecules to Materials IV / Eds. J.S. Miller, M. Drillon. — Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., 2002.
16. Sessoli R., Tsai H., Schake A.R. et al. // J. Am. Chem. Soc. — 1993. — Vol. 115. — P. 1804.
17. Shvedenkov Y., Ikorshii V., Romanenko G. et al. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. — 1999. — Vol. 334. — P. 405.
18. Verdager M. // Polyhedron. — 2001. — Vol. 20. — P. 1115.

Надійшла до редакції 21.02.06

В. Скопенко, д-р хім. наук, І. Фрицький, д-р хім. наук

ІЄРАРХІЧНА САМООРГАНІЗАЦІЯ НАНОРОЗМІРНИХ ОБМІННИХ КЛАСТЕРІВ

Подано огляд можливостей застосування одного з найперспективніших підходів до одержання нових цікавих молекулярних об'єктів — високоядерних нанорозмірних обмінних кластерів — використання процесів ієрархічної самоорганізації у розчині.

The paper is dedicated to review of possibilities of application of one of the most perspective approaches for new interesting molecular objects — nano-sized exchange clusters of high nuclearity — use of processes of hierarchical self-assembly in solution.

В останні роки спостерігається все більше зростання інтересу до поліядерних координаційних сполук. Це насамперед пов'язано з бурхливим розвитком таких напрямків сучасної хімії, як біоорганічне моделювання [6; 10; 15], молекулярний магнетизм [12; 13], металокомплексний каталіз [4] та інженерія кристалів [16; 3]. Саме в зазначених галузях науки поліядерні металокомплекси найбільш інтенсивно вивчаються і є найбільш затребуваними. Особливо цікаву групу поліядерних сполук складають комплекси, які містять велику кількість ядер (чотири і більше). Такі системи за своїми розмірами можуть розглядатися як справжні наноб'єкти, а їхні властивості можуть бути насправді унікальними. Наприклад, високоядерні металокомплекси, які містять кілька парамагнітних іонів металів, з'єднаних містковими молекулами, можуть виявляти дуже специфічні магнітні властивості, у зв'язку з чим розглядаються як перспективні речовини для одержання молекулярних магнітних матеріалів [12; 13]. Крім цього, такі сполуки в багатьох повідомлених випадках виявили цікаві каталітичні, фото- та електрохімічні властивості, які можуть суттєво відрізнятися від відповідних властивостей їхніх менш високоядерних аналогів [16; 2]. Нарешті, високоядерні нанорозмірні кластери ще чекають свого визнання як потенційно перспективна група унікальних фармацевтичних засобів. Слід підкреслити, що дослідження, які проводяться в цьому напрямку, фактично тільки розпочинаються, і немає жодних сумнівів, що найближчими роками буде багато нових результатів, які відкриють нові аспекти цікавих функціональних властивостей високоядерних кластерів, які, у свою чергу, можуть стати підґрунтям для їхнього подальшого практичного застосування.

На сьогоднішній день найважливішим питанням у хімії високоядерних координаційних сполук залишається питання про розробку раціональних методів синтезу таких речовин. Необхідність одержання нових молекулярних топологій і виразна тенденція до все більшого ускладнення об'єктів дослідження в цій галузі стимулюють зусилля

дослідників щодо розробки все витонченіших підходів до створення високоядерних металокомплексів [20; 17].

Нами не ставилося за мету подати в даній статті детальний огляд методів синтезу поліядерних координаційних сполук, оскільки ця тема невичерпна і, слід сказати, досить погано висвітлена в монографічній та оглядовій літературі. Нам лише хотілося би дати загальну класифікацію відомих синтетичних підходів до одержання поліядерних сполук, аби зробити висновки, які з цих підходів можуть бути успішно застосовані для цілеспрямованого синтезу високоядерних нанорозмірних обмінних кластерів і, зокрема, представити короткий опис методу ієрархічної самоорганізації як одного з найперспективніших сучасних підходів до одержання високоядерних сполук.

Методи синтезу поліядерних координаційних сполук можна умовно поділити на дві групи:

- методи, що базуються на свідомому молекулярному дизайні;
- методи, в яких використовуються процеси самоорганізації, що призводять до утворення поліядерних структур.

До першої групи належать дві розповсюджені синтетичні стратегії: дизайн і синтез полінуклеативних лігандів, тобто таких лігандів, в яких присутні два або більше окремих донорних вузла, здатних незалежно координувати два або більше іонів металів, а також використання моноядерних комплексів з вакантними донорними групами та/або хелатними вузлами як конструкторних блоків для одержання поліядерних комплексів шляхом екзокоординації додаткових іонів металів (іноді цей підхід коротко називають використанням моноядерних комплексів як лігандів).

Застосування дизайну полінуклеативних лігандів нерідко дозволяє заздалегідь спланувати просторову організацію лігандів, яка б задовольняла певним стереохімічним перевагам іонів металів, певному взаємному розташуванню координаційних сфер, очікуваним міжметалевим відстаням, певним конформаційним