

## Химики впервые смогли увидеть неуловимый борилнитрен внутри кристалла



Дата публикации: 07.07.2026

Наблюдение за крайне нестабильными молекулами остается одной из самых сложных задач современной химии. Многие реакционноспособные соединения существуют лишь доли секунды, мгновенно превращаясь в более устойчивые структуры. Именно поэтому ученые десятилетиями были вынуждены лишь косвенно судить об их строении, используя компьютерное моделирование и анализ продуктов химических реакций. Теперь исследователям удалось совершить настоящий прорыв: впервые в истории они непосредственно зафиксировали структуру свободного борилнитрена — одной из самых трудноуловимых молекул современной химии.

Результаты работы опубликованы в *Journal of the American Chemical Society* и уже рассматриваются как важный шаг в изучении высокореактивных промежуточных соединений, которые играют ключевую роль в органическом синтезе, материаловедении и разработке новых лекарственных препаратов.

Главным объектом исследования стал борилнитрен — необычная

разновидность нитренов, существование которой теоретически было предсказано еще около 45 лет назад. Несмотря на многочисленные попытки, ученым долгое время не удавалось непосредственно наблюдать эту молекулу. Причина заключается в ее исключительно высокой химической активности. Практически сразу после образования борилнитрен перестраивается в более стабильные соединения, поэтому увидеть его в первоначальном состоянии считалось практически невозможным.

Нитрены представляют собой особый класс азотсодержащих промежуточных соединений. Они образуются в ходе множества химических реакций и отличаются выраженным дефицитом электронов. Благодаря этому нитрены чрезвычайно активно взаимодействуют с окружающими молекулами, инициируя образование новых химических связей. Именно эти свойства делают их незаменимыми инструментами современной синтетической химии.

Особенно сложным объектом оказался борилнитрен. Помимо высокой реакционной способности самого нитрена дополнительную нестабильность создает присутствие атома бора, который также испытывает недостаток электронов. В результате молекула практически мгновенно вступает в последующие превращения, не оставляя возможности для прямого исследования.

Чтобы решить эту проблему, исследователи разработали совершенно новый экспериментальный подход. Вместо попыток наблюдать свободную молекулу в растворе они создали специальное исходное соединение — прекурсор, содержащий фрагмент аценафтена, который эффективно поглощает длинноволновое излучение. Затем это соединение было выращено в виде идеально сформированного монокристалла.

Использование кристалла оказалось принципиально важным. Жесткая кристаллическая решетка ограничивает движение молекул, не позволяя им мгновенно перестраиваться после образования. Благодаря этому ученые получили возможность буквально «заморозить» чрезвычайно нестабильное соединение на короткое время.

Эксперимент проводился при температуре около 100 Кельвинов, что соответствует приблизительно минус 173 градусам Цельсия. При столь низкой температуре скорость химических превращений резко снижается, позволяя исследователям изучить структуру промежуточного соединения до его дальнейшего превращения.

После охлаждения монокристалл облучали светодиодом с длиной волны 370 нанометров. Под действием света исходная молекула теряла молекулу азота, в

результате чего внутри кристаллической решетки образовывался свободный борилнитрен.

Именно в этот момент ученые выполнили рентгеноструктурный анализ монокристалла. Метод рентгеновской дифракции позволил определить расположение отдельных атомов с исключительно высокой точностью и впервые получить прямое изображение структуры борилнитрена.

Исследование показало, что в процессе образования новой молекулы длина связи между атомами бора и азота заметно уменьшается — примерно с 1,437 до 1,398 ангстрема. Такое изменение свидетельствует о перераспределении электронной плотности и возникновении частичной двойной химической связи между атомами.

Не менее важным результатом стало подтверждение электронного состояния молекулы. Дополнительные спектроскопические исследования показали, что борилнитрен существует в триплетном основном состоянии, при котором два электрона остаются неспаренными. Подобная электронная конфигурация встречается относительно редко и во многом определяет необычные магнитные и химические свойства вещества.

Во время эксперимента исследователи наблюдали еще один интересный эффект. По мере образования борилнитрена кристалл заметно менял окраску, переходя от насыщенного красного цвета к синему. Такое изменение связано с перестройкой электронной структуры молекулы и изменением характера поглощения света.

Чтобы окончательно убедиться в правильности идентификации полученного соединения, ученые дополнительно исследовали его химическое поведение вне кристалла. Оказалось, что борилнитрен проявляет именно ту реакционную способность, которую ранее предсказывали теоретические модели. Соединение легко отщепляет атомы водорода от других молекул, внедряется в углерод-водородные и бор-углеродные связи, образует комплексы с основаниями Льюиса и активно участвует в реакциях циклоприсоединения.

Подобные процессы имеют огромное значение для современной органической химии. Именно реакции с участием нитренов широко используются при синтезе сложных органических молекул, включая фармацевтические препараты, агрохимикаты, функциональные полимеры и современные материалы с заданными электронными свойствами.

Авторы исследования отмечают, что предложенная методика открывает совершенно новые возможности для изучения крайне нестабильных промежуточных соединений. Использование специальных фоточувствительных

прекурсоров в сочетании с кристаллизацией и низкотемпературной рентгеноструктурной съемкой может позволить впервые наблюдать множество других молекул, существование которых до сих пор подтверждалось исключительно косвенными методами.

Особенно перспективным это направление выглядит для фундаментальной химии. Возможность непосредственно видеть строение промежуточных соединений позволит значительно точнее понимать механизмы химических реакций, совершенствовать методы направленного синтеза сложных веществ и создавать новые каталитические процессы.

Исследователи считают, что полученные результаты выходят далеко за рамки изучения одного конкретного соединения. Разработанный подход способен существенно расширить возможности структурной химии и открыть доступ к исследованию целого класса короткоживущих молекул, которые до настоящего времени считались практически недоступными для прямого наблюдения. Это открывает новые перспективы для разработки более эффективных лекарственных препаратов, функциональных материалов нового поколения и высокоточных методов химического синтеза.

**Ссылка:** «Кристаллографический захват свободного триплетного борилнитрена» DOI: [10.1021/jacs.6c02601](https://doi.org/10.1021/jacs.6c02601).