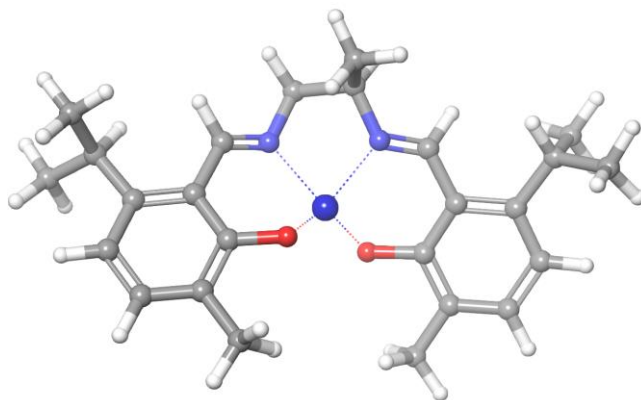


**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ  
Mn, Co И Ni С ТЕТРАДЕНТАТНЫМИ (N2O2) ОСНОВАНИЯМИ ШИФФА***Юлова А.А., Веселов И.Н.*Тверской государственный университет  
170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

Основания Шиффа в качестве лигандов широко изучаются в координационной химии из-за их способности координироваться со многими переходными металлами, стабилизируя их в нескольких степенях окисления. При этом эти соединения находят широкое применение в таких областях, как катализ, создание лекарственных препаратов, химических и оптических сенсоров.

К группе «N2O2» относятся основания Шиффа, которые координируются с ионом металла в четырех точках (тетрадентантные – через два кислорода и два азота), образуя прочные хелатные комплексы.

В данной работе квантово-химическим методом (DFT) исследовались комплексы на основе лиганда, образующегося из 2-гидрокси-6-изопропил-3-метилбензальдегида и 1,2-диаминпропана с переходными металлами (Mn, Co и Ni). Из литературы известно, что для Mn и Co образуются простые хелатные комплексы вида [ML] (см. рисунок), в то время как для Ni образуются димеры [NiL]<sub>2</sub> с металлической связью Ni–Ni, структура которых представляет определенный интерес.



Комплекс вида [ML], где M = Mn, Co

В результате исследования были определены подходящие функционал и базисный набор (с учетом наличия металлической связи Ni–Ni), рассчитаны геометрические параметры комплексов, колебательные ИК-спектры, проведено сравнение расчетных и экспериментальных данных.

Для комплексов дополнительно были рассчитаны молекулярные орбитали и показано, что локализация НОМО-LUMO отражает внутримолекулярный перенос заряда, который может указывать на наличие оптических нелинейных свойств.