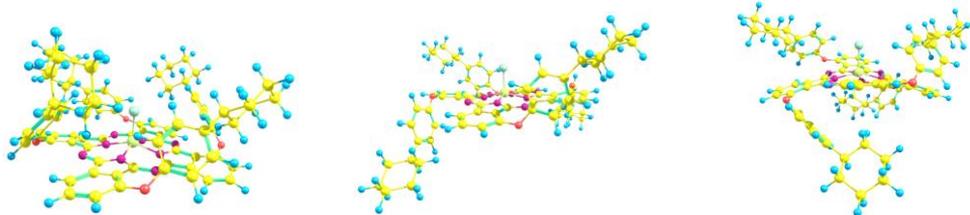


**МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА
ТЕТРА-3-(4-ЦИКЛОГЕКСИЛФЕНОКСИ)ФТАЛОЦИАНИНА
АЛЮМИНИЯ ХЛОРИДА**

Вьялкин Д.А., Жабанов Ю.А., Тихомирова К.Ю., Казарян К.Ю.
Ивановский государственный химико-технологический университет
153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7

В настоящее время большое внимание ученых уделяется комплексам фталоцианинов с металлами, что связано с возможностью создания на их основе светочувствительных материалов с высокими скоростями фотоотклика. Введение на периферию макромолекулы объемного заместителя позволяет повысить растворимость в органических средах и снизить склонность комплексов к агрегационным процессам. Настоящая работа посвящена тетра-3-(4-циклогексилфенокси)фталоцианину алюминия хлориду и изучению его геометрического и электронного строения, а также спектральных характеристик.

Конформационный анализ для комплекса $\text{ClAlPc}(3'\text{-OPhC}_6\text{H}_{11})$ был выполнен с помощью современного полуэмпирического метода GFN2-xTB ($\epsilon_{\text{win}} = 6$ ккал/моль), реализованного в программном пакете CREST. Для каждой конформации были выполнены «single-point» расчеты энергии в приближении V3LYP-D3/dgdzvp и идентифицирована наиболее энергетически выгодная структура (конформер I) (рисунок, а). Дополнительно были рассмотрены конформации, полученные в результате оптимизации комплекса в приближениях CAM-V3LYP/dgdzvp (конформер II) (рисунок, б) и V3LYP-D3/dgdzvp (конформер III) (рисунок, в). Все полученные структуры были повторно оптимизированы в приближении PBEh-3c (программа ORCA 5.0) с последующим расчетом гармонических частот колебаний. Электронные спектры поглощения (ЭСП) рассмотренных конформеров были смоделированы с помощью метода TDDFT (CAM-V3LYP, V3LYP-D3/def2-TZVP). Были рассмотрены переходы из основного в 20 возбужденных электронных состояний.



Конформер I; а

Конформер II; б

Конформер III; в

Молекулярные структуры конформеров комплекса $\text{ClAlPc}(3'\text{-OPhC}_6\text{H}_{11})$

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 21-73-10126.
Авторы выражают благодарность к. х. н. Отлётову Арсению Андреевичу за
полезные предложения.*