

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ МАГНИТНОЙ БИСТАБИЛЬНОСТИ В БИЯДЕРНЫХ СМЕШАННОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСАХ МЕТАЛЛОВ

Старикова А.А., Чегерев М.Г., Стариков А.Г.

*НИИ физической и органической химии Южного федерального университета,
344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки 194/2
e-mail: alstar@ipoc.sfedu.ru*

Магнитно-активные координационные соединения рассматриваются в качестве перспективной основы устройств молекулярной электроники и спинтроники. Наиболее распространенными механизмами переключения спиновых состояний и, соответственно, магнитных свойств комплексов переходных металлов являются спин-кроссовер (СКО)¹ и редокс-изомерия, или валентная таутомерия (ВТ)².

С целью поиска соединений, склонных к переключению спиновых состояний посредством СКО и ВТ, проведены расчеты (DFT UTPSSH/6-311++G(d,p)) биметаллических (Fe, Co) комплексов 5,6-бис(салицилиденимино)-1,10-фенантролина. Ожидалось, что при формировании салицилидениминовых комплексов кобальта или железа и их последующего аддуктообразования с одной или двумя молекулами пиридина может быть достигнута сила поля лигандов, достаточная для протекания термически инициированных СКО переходов. С другой стороны, координация бис-о-бензохинонового комплекса кобальта к фенантролину позволит получить редокс-активный центр.

В результате квантово-химического изучения гомо- и гетерометаллических комплексов 5,6-бис(салицилиденимино)-1,10-фенантролина выявлена возможность управления энергетическими и магнитными характеристиками изомеров таких соединений посредством модификации природы металла, вспомогательных лигандов и координации дополнительного азотсодержащего основания. Предсказана способность исследованных аддуктов претерпевать синхронизированные термически индуцированные внутримолекулярные перегруппировки, сопровождающиеся переключением спинового состояния.

Литература

1. Spin-Crossover Materials: Properties and Applications, Ed. Halcrow M.A., John Wiley and Sons, Chichester, 2013. – 564 p.
2. Tezgerevska T., Alley K.G., Boskovic C. Coord. Chem. Rev., 2014, 268, 23.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения гос. задания № 4.1774.2017/4.6.