

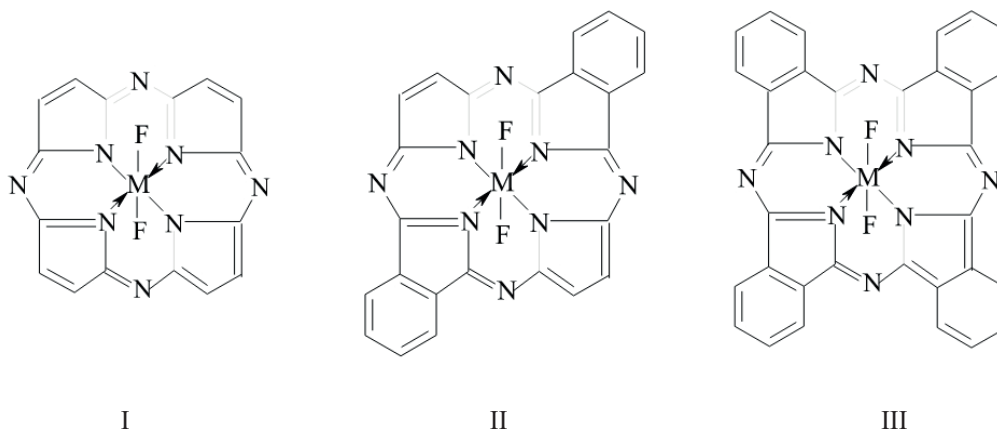
СТАБИЛИЗАЦИЯ «НЕТРАДИЦИОННЫХ» ВЫСОКИХ СОСТОЯНИЙ ОКИСЛЕНИЯ 3D-ЭЛЕМЕНТОВ В ИХ КОМПЛЕКСАХ С ПРОИЗВОДНЫМИ ТЕТРААЗАПОРФИНА И ФТОРИД-АНИОНАМИ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН

Михайлов О.В.,^a Чачков Д.В.^b

^a Казанский национальный исследовательский технологический университет,
420015, Казань, Ул. К. Маркса 68,
e-mail: ovm@kstu.ru

^b Казанское отделение Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской Академии наук –
филиал Федерального государственного учреждения "Федеральный научный центр
Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук"

В настоящем обзорном докладе на основании данных квантово-химического расчета методами DFT OPBE/TZVP и DFT B3PW91/TZVP показана возможность существования (по крайней мере в газовой фазе) гетеролигандных комплексов Cu(IV) и Zn(IV), а также и аналогичных по составу комплексов M(IV) других 3d-элементов (M = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) с тетраазапорфином, его дифенилен- и тетрафенилензамещенными и фторид-анионами типов I, II и III соответственно



Рассчитаны ключевые параметры молекулярных структур данных координационных соединений [длины связей, валентные и торсионные (диздрические) углы], а также их дипольные моменты и спиновые мультиплетности их основных состояний. Отмечено, что комплексы типа I содержат плоские хелатные узлы MN_4 и в целом практически компланарны, тогда как в комплексах II и III имеет место небольшое отклонение от компланарности, причем как в хелатном узле MN_4 , так и в фениленовых фрагментах; при этом в целом в комплексах III такое отклонение выражено сильнее, нежели в комплексах II. Определены также стандартные термодинамические параметры образования этих комплексов.