

СТРОЕНИЕ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ С МАКРОЦИКЛИЧЕСКИМИ ЛИГАНДАМИ В ВОССТАНОВЛЕННОМ СОСТОЯНИИ

Шестаков А.Ф.

Институт проблем химической физики РАН, г.Черноголовка

Макрогетероциклы, порфирины, фталоцианины, корролы и им подобные способны образовывать комплексы с металлами, которые представляют интерес как красители, материалы для оптики и органической электроники, а также интересны с точки зрения их биологической активности.

Комплексы металлов с макроциклическими лигандами изучены мало, но являются перспективными из-за их проводящих и магнитных свойств. В ИПХФ РАН разработаны методы восстановления производных порфирина, тетрапиразинопорфирина, коррола, фталоцианина и нафталоцианина, синтезирован и структурно охарактеризован ряд соединений, включающих восстановленный макроцикл, как в свободном, так и в связанном координированном состоянии.

Согласно проведенному квантово-химическому исследованию, появление электронов на разрыхляющих молекулярных орбиталях макроцикла проявляется в его структурных искажениях, наличии низколежащего триплетного состояния и оптического перехода в ИК области. В случае редокс-активных металлов как компонента противоионов, возникают условия для межмолекулярного переноса электронов между ними и макроциклическими комплексами в восстановленном состоянии. Проведенный теоретический анализ позволил установить взаимосвязь между строением и свойствами комплексов металлов с макроциклическими лигандами в восстановленном состоянии.