

Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Квантовая химия.

Регистрационный код публикации: 9-15-1-1

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 7 декабря 2008 г. УДК 541.49.

Квантово-химический расчет пространственной структуры темплатных комплексов, образующихся в системах ион Fe(III) [Co(III)] – этандитиоамид-1,2 – формальдегид в желатин-иммобилизованных матрицах

© Чачков Денис Владимирович¹⁺ и Михайлов Олег Васильевич^{2*}

¹ Казанский научный центр РАН. Ул. Лобачевского, 2. г. Казань, 420111. Республика Татарстан.
Россия. Тел.: (843) 231-90-06. E-mail: chachkov@kstu.ru

² Кафедра аналитической химии, сертификации и менеджмента качества. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015.
Республика Татарстан. Россия.

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: темплатный синтез, макроциклический комплекс, B3LYP.

Аннотация

Посредством гибридного метода функционала плотности B3LYP с базисным набором 6-31G(d) программой Gaussian 98 осуществлен расчет геометрических параметров макроциклических комплексов Fe(III) и Co(III) с 2,8-дитио-3,7-диаза-5-окса-нонандитиоамидом-1,9, образующихся в ходе темплатных процессов между желатин-иммобилизованными гексацианоферратами(II) железа(III) или кобальта(III), этандитиоамидом-1,2 и формальдегидом. Приведены координаты атомов, длины связей, углы между связями и двугранные углы в комплексах с металлохелатным узлом MN₂S₂. Отмечено, что как в случае Fe(III), так и Co(III) указанный металлохелатный узел является практически плоским. Образующийся же в результате темплатной «сшивки» дополнительный шестичленный металлоцикл в обоих изучаемых комплексах развернут по отношению к двум пятивалентным циклам на весьма значительный и практически одинаковый угол (немного более 75°), причем входящие в этот цикл атомы в одной плоскости уже не располагаются.