

СТРУКТУРА КОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II) И НИКЕЛЯ(II) С N,O-СОДЕРЖАЩИМИ ЛИГАНДАМИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

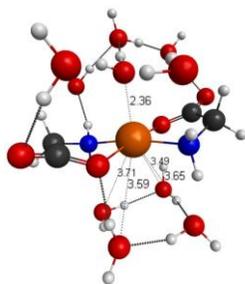
Бухаров М.С., Гилязетдинов Э.М., Крутиков А.А., Серов Н. Ю., Романова Л.А.,

Штырлин В.Г.

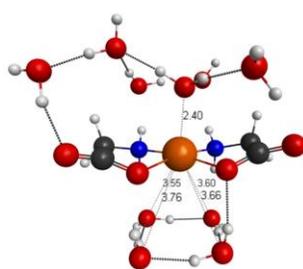
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань

Mikhail.Bukharov@gmail.com

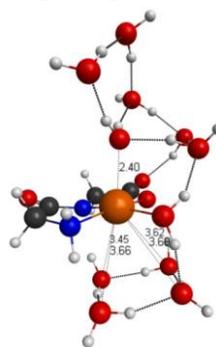
Исследование структуры координационных соединений в растворах составляет крупную проблему современной химии. В настоящей работе квантово-химическими методами оптимизированы структуры комплексов меди(II) и никеля(II) с рядом аминокислот, ди- и трипептидов в водных растворах. Расчеты выполнены с использованием функционалов PBE, B3LYP и CAM-B3LYP и базисов L2, TZVP, TZP и aug-cc-pVTZ с учетом дискретной модели растворителя для второй координационной сферы (КС) в комбинации с континуальной моделью растворителя C-PCM или без нее. Наилучшее соответствие результатов расчета экспериментальным данным получено на уровне CAM-B3LYP/TZVP с сольватной оболочкой из 10 молекул воды и моделью C-PCM. Примеры оптимизированных структур приведены в работах [1, 2] и представлены ниже.



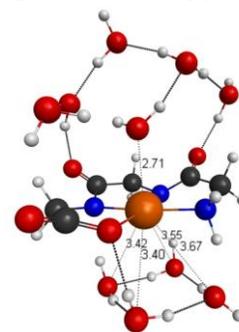
trans-Cu(Gly)₂·10H₂O



cis-Cu(Gly)₂·10H₂O



Cu(GGH₁)·10H₂O



Cu(GGGH₂)·10H₂O

Установлена пентакоординация меди(II) и выявлены основные факторы стабилизации комплексов в водных растворах, включая трансвлияние и образование водородных связей.

Квантово-химические расчеты выполнены с использованием кластера МСЦ РАН.

1. M.S. Bukharov, V.G. Shtyrlin, A. Sh. Mukhtarov, G.V. Mamin, S. Stapf, C. Mattea, A.A. Krutikov, A.N. Il'in, N. Yu. Serov, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014, **16**, 9411-9421.

2. M.S. Bukharov, V.G. Shtyrlin, G.V. Mamin, S. Stapf, C. Mattea, A. Sh. Mukhtarov, N. Yu. Serov, E.M. Gilyazetdinov, *Inorg. Chem.*, 2015, **54**, 9777-9784.