РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И ЭЛЕКТРОХИМИИ ИМ. А. Н. ФРУМКИНА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РОССИЙСКОЕ ХИМИЧЕСКОЕ ОБЩЕСТВО ИМ. Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА
АВТОТРАНСПОРТНИК РОССИИ

VIII Международная конференция по физической химии краун-соединений, порфиринов и фталоцианинов

20 сентября – 24 сентября 2020 г.

ТУАПСЕ

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И NH-ТАУТОМЕРИЯ ГИДРОКСИМЕТИЛ- И ФОРМИЛ-ЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВ

А.Г. Мартынов[1], А.В. Ягодин[1], Д.А. Бунин[1],
Ю.Г. Горбунова[1,2], А.Ю. Цивадзе[1,2], J. Mack,[3] T. Nyokong[3]

[1]Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН; Москва, Ленинский пр., 31, корп. 4, E-mail: Martynov.alexandre@gmail.com
[2] Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН; Москва, Ленинский пр., 31, E-mail: yulia@igic.ras.ru
[3]Department of Chemistry, Rhodes University, Grahamstown 6140, South Africa

Квантово-химическое описание электронного строения несимметричных фталоцианинов – фотосенсибилизаторов в элементах солнечной энергетики является важной задачей для дизайна соединений с улучшенными характеристиками. Среди подходов к такому описанию важное место занимает упрощенное нестационарное приближение теории функционала плотности sTDDFT [1], позволяющее проводить экспрессные расчеты с высокой точностью предсказывающие энергии вертикальных переходов в молекулах, содержащих большое количество атомов.

В данной работе этот метод был впервые применен для изучения электронного строения NH-таутомеров несимметричных фталоцианиновых лигандов, содержащих CH_2OH и COH-группы. С использованием метода B97-3c были оптимизированы геометрии **a**- и **s**-таутомеров метокси-замещенных соединений (Рис.1) и показано, что переход от гидроксиметил- к формил-производным существенно увеличивает стабильность **s**-таутомера. Расчет энергий вертикальных переходов методом sTDDFT CAM-B3LYP/6-31G(d)+SMD($CHCl_3$) и сравнение полученных данных с экспериментальными спектрами (Рис. 2) свидетельствует о правильности идентификации наиболее стабильного таутомера и корректном описании его электронного строения.

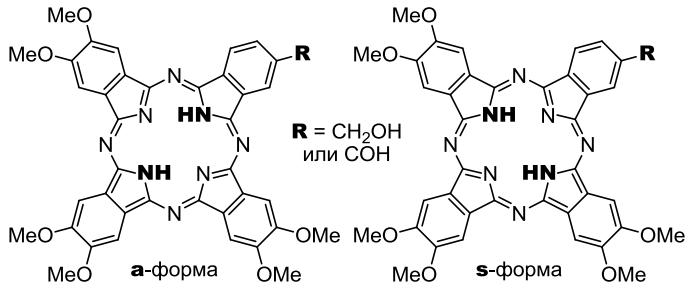

Рис. 1.

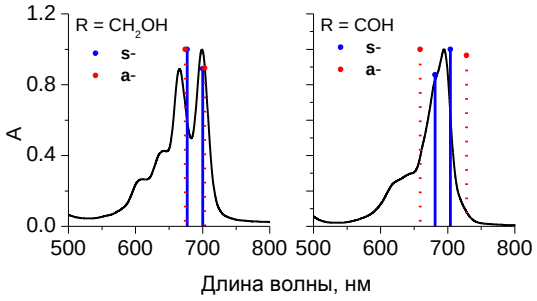

Рис. 2.

[1] Martynov, A. G.; Mack, J.; May, A. K.; Nyokong, T.; Gorbunova, Y. G.; Tsivadze, A. Y. *ACS Omega* **2019**, *4*, 7265–7284

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-53-60001 ЮАР_т.