

Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Квантовая химия. Регистрационный код публикации: 7-11-1-1

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”. <http://butlerov.com/synthesys/>
Поступила в редакцию 8 декабря 2006 г. УДК 539.194.

Молекулярное моделирование строения координационного узла в металлохелатах Pd(II), Cu(II) и Ni(II) пространственно- экранированных *орто*-нитрозофенолов

© Алдошин Сергей Михайлович,* Боженко Константин Викторович,*⁺
Ткачев Валерий Владимирович и Утенышев Андрей Николаевич
Институт проблем химической физики РАН. Просп. Акад. Семенова, 1.
г. Черноголовка, 142432. Россия. E-mail: bogenko@icp.ac.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: неэмпирические квантово-химические расчеты, комплексы металлохелатов, *цис*- и *транс*-ориентация N-O групп, трет-бутильные группы.

Аннотация

Выполнены неэмпирические расчеты (приближение B3LYP/LANL2DZ) комплексов металлохелатов Pd, Ni и Cu с *орто*-нитрозофенолом с *цис*- и *транс*-ориентацией N-O групп, а также комплексов, получающихся из них заменой трет-бутильных групп атомами водорода. Показано, что независимо от наличия или отсутствия трет-бутильных групп в палладиевом комплексе, предпочтительной является *цис*-ориентация N-O групп, а для никелевого и медного комплексов энергетически выгоднее их *транс*-ориентация, обусловленная электростатическим отталкиванием атомов кислорода, связанных с атомом металла.