

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Физико-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 12-31-7-24 Подраздел: Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
УДК 543.422.3+547.883+546.56.74+539.194. Поступила в редакцию 8 сентября 2012 г.

Исследование структуры комплексов некоторых переходных металлов с 3-гидразоно-6-(3,5-диметилпиразол-1-ил)-1,2,4,5-тетразинами в комбинации спектральных и квантово-химических методов

© Потемкин¹ Владимир Александрович, Гришина¹ Мария Александровна, Ившина¹ Надежда Николаевна, Черданцева²⁺ Елена Викторовна, Матерн^{2*} Анатолий Иванович, Ишметова⁴ Рашида Иршотовна, Корякова⁴ Ольга Васильевна и Русинов^{3,4*} Геннадий Леонидович

¹ Челябинская государственная медицинская академия Минздравсоцразвития России. Ул. Воровского, 64. г. Челябинск, 454092. Россия. Тел.: (351) 280-62-64. E-mail: rva@modelchem.ru
² Кафедра аналитической химии; ³ Кафедра технологии органического синтеза. Химико-технологический институт. Уральский федеральный университет им. первого президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19, к.3. г. Екатеринбург, 620002. Россия. Тел.: (343) 375-97-56. Факс: (343) 375-61-44. E-mail: e.v.cherdantseva@ustu.ru
⁴ Лаборатория гетероциклических соединений. Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН. Ул. Академическая/С. Ковалевской, 22/20. г. Екатеринбург, 620990. Россия. Тел.: (343) 374-11-89. E-mail: rusinov@ios.uran.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 1,2,4,5-тетразины, комплексные соединения, синтез, спектроскопия ультрафиолетовой и видимой области, ИК-спектроскопия, квантово-химические расчеты.

Аннотация

Проведено спектрофотометрическое исследование реакций комплексообразования 3-гидразоно-6-(3,5-диметилпиразол-1-ил)-1,2,4,5-тетразинов с Cu^{2+} , Ni^{2+} , Mn^{2+} . На основании данных спектроскопии УФ и видимой области синтезированы координационные соединения тетрамина с солями металлов. Проведено моделирование структур синтезированных комплексов. Показано, что расчетные ИК спектры имеют хорошее соответствие с экспериментально полученными.