

Квантово-химическое моделирование молекулярного и электронного строения 5,7-дигидрокси-4,8-диметил-2-оксо-2*H*-хромен-6-карбоновой кислоты и ее металлокомплексов

© Намичемази¹ Насрин, Авраменко¹ Оксана Владимировна,
Ковальчукова¹⁺ Ольга Владимировна, Кузнецов² Дмитрий Николаевич,
Али¹ Шейх Бостанабад и Рябов^{1*} Михаил Алексеевич

¹ Кафедра общей химии. Российский университет дружбы народов. Ул. Миклухо-Маклая, 6.
г. Москва, 117198. Россия. Тел.: (495) 955-08-60. E-mail: okovalchukova@mail.ru

² Кафедра органической химии. Московский государственный университет дизайна и технологии.
Ул. Садовническая, д.33., стр.1. г. Москва, 115035. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, координационные соединения, производные салициловой кислоты, хроменкарбоновая кислота.

Аннотация

Методом DFT/B3LYP выполнено моделирование строения молекулы 5,7-дигидрокси-4,8-диметил-2-оксо-2*H*-хромен-6-карбоновой кислоты (H_2L), ее анионных форм, комплексов $ZnL(H_2O)_2$, $AlLNO_3$, $CuL(H_2O)_2$, $FeL(NO_3)$ и комплексных анионов $AlL(NO_3)_2^-$ и $AlL(NO_3)_2(H_2O)_2^-$. Определены межатомные расстояния, углы и заряды на атомах, рассчитанные методом естественных связывающих орбиталей.