

## Компьютерное моделирование методом функционала плотности комплексов осмия и рутения, содержащих бипиридиновые лиганды

© **Гарифзянова\*+ Гюзель Габдульбаровна, Герасимов Александр Викторович**

*Кафедра интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами.*

*Казанский национальный исследовательский технологический университет.*

*ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.*

*Тел.: +7 (843) 231-42-53. E-mail: garifz@kstu.ru*

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** квантово-химический расчет, осмий, бипиридиновый лиганд, комплексы рутения(II), метод PBE/PBE/LanL2DZ.

### Аннотация

Рассмотрены результаты моделирования структур методом теории функционала плотности моделирования рутениевого комплекса (с двумя незамещенных бипиридиновыми лигандами) с осмиевым комплексом (с двумя бипиридиновыми лигандами дикарбоновых кислот) (RuH–Os). Данные комплексы соединены между собой бутановым мостиком. Интерес к таким комплексам связан с возможностью использования их в качестве фотосенсибилизаторов в солнечных элементах нового поколения. Бипиридиновые лиганды являются ярко выраженными  $\sigma$ -донорами электронной плотности по связи азот – рутений. Из литературы известно, что возбужденное состояние рутениевого комплекса(II) сильно тушится и преимущественно распадается за счет передачи энергии на соседний комплекс Os(III). Рассмотрение граничных орбиталей рутениевых комплексов дает представление о характере возбужденного состояния. Оптимальную геометрию изучаемых комплексов осуществляли в рамках теории функционала плотности (DFT). GGA функционалы PBE, основанные на обобщенном градиентном приближении широко используются для расчета структур содержащих элементы платиновой группы. Методом PBE/PBE/LanL2DZ было локализовано модельное соединение бис(2,2'-бипиридил)(4-бутил-2,2'-бипиридин)рутения(II) (Ru(bpy)<sub>2</sub>(4-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>-bpy)), имитирующее часть комплекса RuH–Os. Для нейтрального и ионизированного состояния (катион 2<sup>+</sup>) модельного соединения Ru(bpy)<sub>2</sub>(4-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>-bpy) проведена полная оптимизация геометрии с поиском минимума полной энергии по всем геометрическим параметрам и выполнен анализ заселённости натуральных орбиталей методом NBO в Gaussian09. В отличие от нейтрального соединения (Ru(bpy)<sub>2</sub>(4-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>-bpy)), ВЗМО катион-радикала происходит с участием орбиталей рутения. Были рассчитаны дипольные моменты для структуры Ru(bpy)<sub>2</sub>(4-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>-bpy) и комплекса RuH–Os. В дальнейшем метод PBE/PBE/LanL2DZ можно использовать для комплексов рутения и осмия при варьировании различных лигандов.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Гарифзянова Г.Г., Герасимов А.В. Компьютерное моделирование методом функционала плотности комплексов осмия и рутения, содержащих бипиридиновые лиганды. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.72. №11. С.36-41. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-11-36

или

Guzel G. Garifzianova, Alexander V. Gerasimov. Density functional computer simulation of osmium and ruthenium complexes containing bipyridine ligands. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.72. No.11. P.36-41. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-11-36. (Russian)