



(H)	
Li ³ ЛИТИЙ	Be ⁴ БЕРИЛЛИЙ
Na ¹¹ НАТРИЙ	Mg ¹² МАГНИЙ
K ¹⁹ КАЛИЙ	Ca ²⁰ КАЛЬЦИЙ
²⁹ Cu МЕДЬ	³⁰ Zn ЦИНК
Rb ³⁷ РУБИДИЙ	Sr ³⁸ СТРОНЦИЙ
⁴⁷ Ag СЕРЕБРО	⁴⁸ Cd КАДМИЙ
Cs ⁵⁵ ЦЕЗИЙ	Ba ⁵⁶ БАРИЙ
⁷⁹ Au ЗОЛОТО	⁸⁰ Hg РТУТЬ
Fr ⁸⁷ ФРАНЦИЙ	Ra ⁸⁸ РАДИЙ

ТОМ 54

ВЫП. 2

ISSN 0579-2991

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

СЕРИЯ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Иваново 2011

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
ИЗДАНИЕ ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

**ХИМИЯ
И
ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕХНОЛОГИЯ**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
Основан в январе 1958 года. Выходит 12 раз в год.

**Том 54
Вып. 2**

Иваново 2011

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор О.И. Койфман (*д.х.н., профессор, член-корр. РАН*)

Зам. гл. редактора В.Н. Пророков (*к.х.н.*)

Зам. гл. редактора В.В. Рыбкин (*д.х.н., профессор*)

Зам. гл. редактора А.П. Самарский (*к.х.н.*)

Зав. редакцией А.С. Манукян (*к.т.н.*)

В.К. Абросимов (*д.х.н., проф.*), М.И. Базанов (*д.х.н., проф.*), Б.Д. Березин (*д.х.н., проф.*),
В.Н. Блиничев (*д.т.н., проф.*), С.П. Бобков (*д.т.н., проф.*), В.А. Бурмистров (*д.х.н., проф.*),
Г.В. Гиричев (*д.х.н., проф.*), О.А. Голубчиков (*д.х.н., проф.*), М.В. Ключев (*д.х.н., проф.*),
А.М. Колкер (*д.х.н., проф.*), А.Н. Лабукин (*д.т.н., проф.*), Т.Н. Ломова (*д.х.н., проф.*),
Л.Н. Мизеровский (*д.х.н., проф.*), В.Е. Мизонов (*д.т.н., проф.*), В.И. Светцов (*д.х.н., проф.*),
Ф.Ю. Телегин (*д.х.н., проф.*), М.В. Улитин (*д.х.н., проф.*), В.А. Шарнин (*д.х.н., проф.*)

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

проф. Дудырев А.С. (г. Санкт-Петербург)

проф. Дьяконов С.Г. (г. Казань)

акад. РАН Егоров М.П. (г. Москва)

акад. РАН Еременко И.Л. (г. Москва)

проф. Захаров А.Г. (г. Иваново)

акад. РАН Монаков Ю.Б. (г. Уфа)

член-корр. РАН Новаков И.А. (г. Волгоград)

акад. РАН Новоторцев В.М. (г. Москва)

член-корр. РАН Овчаренко В.И. (г. Новосибирск)

акад. РАН Саркисов П.Д. (г. Москва)

акад. РАН Синяшин О.Г. (г. Казань)

проф. Тимофеев В.С. (г. Москва)

акад. РААСН Федосов С.В. (г. Иваново)

Издание Ивановского государственного химико-технологического университета, 2011

Адрес редакции: 153000, г. Иваново, пр. Фридриха Энгельса, 7, тел. 8(4932)32-73-07, E-mail: ivkkt@isuct.ru,
<http://CTJ.isuct.ru>

Редактор: Н.Ю. Спиридонова
Технический редактор: М.В. Тимачкова
Англ. перевод: В.В. Рыбкин
Компьютерная верстка: А.С. Манукян

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору за соблюдением законодательства
в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-24169 от 20 апреля 2006 г.

Журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук»

Журнал издается при содействии Академии инженерных наук им. А.М. Прохорова

Подписано в печать 27.12.2010. Формат бумаги 60x84 ¹/₈.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 12,6. Усл. кр.-отт. 18,34. Учетно-изд. л. 15,12. Тираж 450 экз. Заказ 1312.

Отпечатано с диапозитивов в ОАО «Ивановская областная типография». 153008, г. Иваново, ул. Типографская, 6.

Подписка: ОАО Агентство «РОСПЕЧАТЬ» (подписной индекс 70381),
ООО «Научная электронная библиотека» (www.e-library.ru).

©Изв. вузов. Химия и химическая технология, 2011

УДК 541.49

Д.В. Чачков, О.В. Михайлов

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ *ТРАНС*-ИЗОМЕРНОГО ХЕЛАТНОГО КОМПЛЕКСА, ВОЗНИКАЮЩЕГО В СИСТЕМЕ Ni(II)– АМИНОМЕТАНТИОГИДРАЗИД

(Казанский государственный технологический университет)
e-mail: ovm@kstu.ru

Посредством гибридного метода функционала плотности B3LYP/6-31G(d) осуществлен расчет геометрических параметров транс-изомера хелатного комплекса состава NiL₂ с однократно депротонированной формой аминотетрагидразидида H₂N-C(=S)-NH-NH₂ (HL), образующегося в результате комплексообразования между триоксонитратом(V) никеля(II) Ni(NO₃)₂ и HL при pH 7-9. Результаты расчета сопоставлены с появившимися недавно в литературе структурными данными для указанного комплекса. Отмечено хорошее согласие рассчитанных и литературных данных, свидетельствующее о дееспособности данного метода для расчета хелатных комплексов с циклами малой членности.

Ключевые слова: B3LYP хелатный комплекс, аминотетрагидразид, никель(II)

ВВЕДЕНИЕ

Изомерные комплексы никеля(II) с аминотетрагидразидом (тиосемикарбазидом) H₂N-C(=S)-NH-NH₂ (HL) известны весьма давно [1]; изомерные же комплексы с однократно депротонированной формой данного лиганда были описаны в статье [2]. Там же на основании данных спектров поглощения в УФ, видимой и ИК областях, а также магнетохимических свойств этих изомеров было высказано предположение о том, что один из них (грязно-желтого цвета), является *транс*-, другой (темно-коричневого цвета) – *цис*-изомером. Осуществить рентгеноструктурный анализ этих комплексов, однако, долго не удавалось, поскольку получение пригодных для этого монокристаллов оказалось весьма трудным делом. И хотя первая информация о рентгеноструктурных данных первого из этих комплексов была представлена в работе [3], надежные данные на этот счет появились лишь совсем недавно в работе [4]. В связи с этим приобретает достаточную актуальность осуществление неэмпирического квантово-химического расчета образующегося в системе Ni(II) – аминотетрагидразид *транс*-изомерного металлохелата, что позволило бы получить, с одной стороны, независимые объективные данные об его структурно-геометрических параметрах, с другой – сопоставить их с экспери-

ментальными данными на этот счет и дать оценку дееспособности соответствующего метода квантово-химического расчета для прогнозирования структур хелатных комплексов, для которых по тем или иным причинам оказываются невозможными рентгенодифракционные исследования. Предлагаемая статья посвящена изложению и обсуждению результатов одного из вариантов такого расчета структурных параметров хелатного комплекса 3d-элемента с (N,S)-донорноатомным лигандом.

МЕТОД РАСЧЕТА

Для проведения квантово-химического расчета нами, как и в более ранней работе [5], был применен гибридный метод B3LYP 6-31G(d), основанный на сочетании метода Хартри-Фока и теории функционала плотности [6]. Расчеты были выполнены по программе Gaussian 98 [7]. Соответствие найденных стационарных точек минимумам энергии во всех случаях доказывалось расчетом вторых производных энергии по координатам атомов. Все равновесные структуры, соответствовавшие точкам минимума на поверхностях потенциальной энергии, имели лишь вещественные значения частот.

Квантово-химический расчет указанного выше комплекса был выполнен в Казанском филиале межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.