**Первая кристаллическая структура анионного комплекса Fe(III) на основе тиосемикарбазона пировиноградной кислоты с Li+: синтез, особенности магнитных свойств и теоретический анализ**

***Благов M.А.,1,2 Спицына Н.Г.2***

*Аспирант, 4 год обучения*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия*

*2Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия  
E-mail: max-blagov@mail.ru*

C:\Users\Максим\Desktop\Диссертации\Рисунки к диссертации\Figure 3a.tifmole.tifВпервые аномальное магнитное поведение анионных комплексов Fe(III) было обнаружено В. Зеленцовым с соавт. в 1970-х годах. В работах он описал комплексы Fe(III) с основаниями Шиффа, полученные конденсацией селено-/тиосемикарбазида (se-/th) с производными салицилового альдегида (sa) (se/thsa комплексы) или пировиноградной кислоты (py) (thpy комплексы) (рис. 1). Следует отметить, что в настоящее время известно только десять структур анионных thsa комплексов Fe(III) с катионами щелочных металлов и катионом аммония, но ни одной монокристаллической структуры с анионным thpy комплексом Fe(III) еще не описано. На сегодняшний день известна лишь одна структура анионного thpy комплекса Ba[CrIII(thpy)2]2∙5H2O, которая была получена в 1971 г.

Рис. 1. Схема синтеза соли Li[FeIII(thpy)2]∙3H2O (**1**) (слева) и асимметрический элемент элементарной ячейки в **1** (справа)

В настоящей работе [1] синтезирован и охарактеризован методами ИК-спектроскопии, порошковой и монокристаллической рентгенографии, магнитометрии и мессбауэровской спектроскопии анионный комплекс Fe(III) на основе тиосемикарбазона пировиноградной кислоты с катионом лития: Li[FeIII(thpy)2]∙3H2O (**1**). Катионы Li+ и сольватные молекулы воды располагаются между слоями [Fe(thpy)2]-, что стабилизирует структуру за счет образования водородных связей. Анионы [Fe(thpy)2]– образуют взаимосвязанные димерные пары с расстоянием Fe⋯Fe равным 6.7861(4) Å при 150К. Согласно магнитным измерениям выше 250 K, комплекс **1** демонстрирует зарождающийся спиновый переход из низкоспинового (S = 1/2) в высокоспиновое (S = 5/2) состояние. На основании квантово-химических расчетов c использованием теории функционала плотности выявлен функционал OPBE, который правильно предсказывает спиновый переход для анионных thpy комплексов Fe(III).

*Работа выполнена в рамках Государственного задания, регистрационный номер № АААА-А19-119092390079-8 с использованием приборной базы и вычислительного Центра Коллективного Пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН.*

**Литература**

1. Blagov M.A., Spitsyna N.G., Ovanesyan N.S., Lobach A.S., Zorina L.V., Simonov S.V., Zakharov K.V., Vasiliev A. N. First crystal structure of an Fe(III) anionic complex based on a pyruvic acid thiosemicarbazone ligand with Li+: synthesis, features of magnetic behavior and theoretical analysis. // Dalton Trans. 2023. Vol. 52. P. 1806-1819.