**Синтез, структура и спектрально-флуоресцентные свойства орто-дифтор замещённых Mg(II) и Zn(II) октафенилтетраазапорфиринов**

***Русанов А.И.,1,2 Чижова Н.В.,2 Мамардашвили Н. Ж.2***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*1Ивановский государственный химико технологический университет, факультет Неорганической химии и технологии, Иваново, Россия*

*2 Институт химии растворов РАН им. Г.А. Крестова, Иваново, Россия*

*E-mail:* *rusanov.a.i@mail.ru*

Порфиразины или тетраазапорфирины обладают интересными и уникальными фотофизическими, фотохимическими и электрохимическими свойствами. В последнее время порфирины и их аза-аналоги широко используются в фотодинамической терапии и фотодинамической диагностике. Фторзамещенные порфиразиновые комплексы обладают повышенной n-проводимостью и могут быть использованы для создания новых материалов, обладающих нелинейно-оптическими и каталитическими свойствами. Известно, что порфирины проявляют свои полезные свойства в составе комплексов с металлами. Самым простым, исторически сложившимся, методом получения металлопорфиринов является темплатный синтез.



Схема 1. Синтез и строение исследуемых соединений

В настоящей работе показано, что взаимодействие орто-дифторзамещенного дифенилмалеиндинитрила с ацетатом магния и цинка (при мольном соотношении 1:1) в кипящем этиленгликоле приводит к образованию Mg(II)-окта-(2,6-дифторфенил)тетраазапорфирина (**1**) и Zn(II)-окта-(2,6-дифторфенил)тетраазапорфирина (**2**), соответственно. Синтезированные соединения идентифицированы методами электронной абсорбционной, 1Н ЯМР, ИК спектроскопии и масс-спектрометрии. Для синтезированных соединений также получены флуоресцентные характеристики. Показано, что квантовый выход флуоресценции комплекса магния **1** выше по сравнению с комплексом цинка **2**. Проведено сравнение полученных квантовых выходов с литературными данными с целью выявления тенденции изменения этой величины при фторировании фенильных колец в комплексах октафенилтетраазапорфиринов. Проведена геометрическая оптимизация исследуемых комплексов Mg(II) и Zn(II) методом теории функционала плотности (DFT) с применением гибридного трехпараметрического обменно-корреляционного функционала Ли-Янга-Парра Бекке (B3LYP) и базисного набора 6-31G++. Для оптимизированных структур построены граничные молекулярные орбитали, рассчитаны их энергии, а так же методом TD-DFT предсказаны спектры поглощения соединений **1** и **2**, которые сравниваются не только с экспериментально полученными, но так же и с значениями предсказанными при помощи методов машинного обучения.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 075-15-2021-579).*