**Механизмы трансформаций комплекса состава [Fe2(SC2N3C6H4NO2)2(NO)4] в растворе DMSO**

***Загайнова Е.А.,1 Емельянова Н.С.2***

*Студент, 3 курс специалитета*

*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: zagaynova\_evg@mail.ru*

 Поиск и исследование новых серосодержащих нитрозильных комплексов железа является важной фундаментальной задачей, открывающей перспективы создания NO-доноров с заданными биологическими свойствами, которые будут более эффективными препаратами для лечения различных патологий [1]. Особенно актуальным представляется изучение механизмов трансформации таких комплексов в различных условиях с целью выяснения факторов, влияющих на их NO-донорную способность.

Было проведено квантово-химическое моделирование соединений, образующихся при распаде комплекса состава [Fe2(SC2N3C6H4NO2)2(NO)4] в растворе DMSO (рис. 1).

Рис. 1. Энергетическая диаграмма трансформации комплекса в DMSO

Трансформация исследуемого комплекса может протекать по двух механизмам. Первый механизм – это повышение координационного числа атомов железа в комплексе, а второй – это разрыв связей Fe-S и Fe-N с μ-SCN мостиком.

В ходе расчетов были рассмотрены все промежуточные и конечные продукты данных реакций и построены их энергетические диаграммы. Проведена оценка длин связей Fe-NО и показано, что любая трансформация комплекса приводит к ее ослаблению, что объясняет его NO-донорную активность при растворении в DMSO.

**Литература**

1. Т. Н. Руднева. Синтез, исследование строения и NO-донорной активности нитрозильных комплексов железа с 2-меркаптотриазолами, 2007, 132 с.