**Комплексы криптанда[2.2.2] с Ni2+: структура и константы устойчивости**

***Католикова А.С., Погодина Е.И.***

*Студентка, 2 курс бакалавриата*

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*

*E-mail:* *katolikova17@mail.ru*

Криптанд[2.2.2] — объёмный полициклический лиганд, узловые атомы азота которого соединены тремя оксиэтиленовыми цепочками, каждая из которых содержит два эфирных атома кислорода (N(CH2CH2OCH2CH2OCH2CH2)3N).

В работе потенциометрическим (а) и спектрофотометрическим (б) методами при *Т* = 298 К и ионной силе µ ￫ 0 определены константы устойчивости моноядерного, протонированного и биядерного комплексов никеля(II) с криптандом[2.2.2] в водном растворе:

[2.2.2] + Ni2+ ↔ [Ni[2.2.2]]2+ lg*К*о1 = 4.58 (а), lg*К*о1 = 4.25 (б)

[2.2.2] + Ni2+ + H+ ↔ [NiH[2.2.2]]3+ lgβо2 = 11.7 (а)

[Ni[2.2.2]]2+ + Ni2+ ↔ [Ni2[2.2.2]]4+ lg*К*о3 = 2.5 (а), lg*К*о3 = 2.71 (б)

Структура криптатных комплексов никеля(II) установлена посредством квантово-химических расчетов *in vacuo.* Образование частиц [Ni[2.2.2]]2+ и [NiH[2.2.2]]3+ сопровождается вхождением катионов в полость криптанда[2.2.2] (рис. 1). Для биядерного комплекса никеля(II) предпочтительной оказалась структура, при которой один ион никеля(II) размещается внутри полости макроцикла, второй находится вне полости.

а.б.

в. г.

Рис. 1. Оптимизированные геометрические модели *in vacuo* (а) свободного криптанда[2.2.2], (б) [Ni[2.2.2]]2+, (в) [NiH[2.2.2]]3+, (г) [Ni2[2.2.2]]4+