**Механизм электрохимической реакции восстановления водорода с участием комплексов Ni(II) на основе *бис*-тиосемикарбазонов диацетила**

***Баранникова А.С., Логвинов Д.А., Щербаков И. Н.***

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*Южный федеральный университет,*

*химический факультет, Ростов-на-Дону, Россия*

*E-mail:* [*annasergeevna.888045@yandex.ru*](mailto:annasergeevna.888045@yandex.ru)

В настоящее время большое внимание исследователей уделяется разработке углеродно-нейтральных энергетических систем, в том числе и водородного топливного элемента. Молекулярный водород образуется благодаря реакции выделения водорода (Hydrogen Evolution Reaction – HER), основанной на двухэлектронном восстановлении протонов [1]. Актуальной задачей является поиск устойчивых, эффективных и недорогих электрокатализаторов для данной реакции. Было выяснено, что из-за своей способности действовать в роли резервуаров для электронов, некоторые редокс-активные лиганды могут не только радикально изменять реакционную способность комплексов переходных металлов, но и усиливать их каталитические свойства.

В данном исследовании в качестве потенциальных электрокатализаторов были выбраны комплексы Ni(II) на основе *бис*-4-R-тиосемикарбазонов диацетила (**H2L**). Строение соединений было установлено методами ИК спектроскопии и РСА (рис. 1).

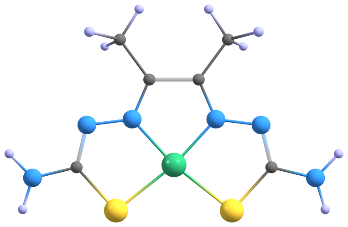
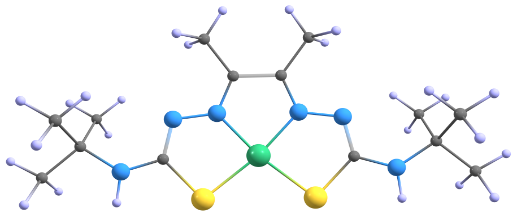


Рис. 1. Молекулярная структура комплексов Ni(II): **A** – R = H, **B -** R = t-Bu

Оба комплекса имеют плоско-квадратное строение координационного узла. Бис-тиосемикарбазоны выступают как тетрадентатные N2S2-донорные лиганды в дважды депротонированной форме с сопряженной системой кратных связей, способные одновременно принимать на себя как протон, так и электрон, что облегчает протекание HER [2].

Изображение выглядит как диаграмма, линия, белый

Автоматически созданное описаниеНа основе результатов квантово-химических расчетов был предложен механизм HER, одинаковый для обоих комплексов (схема 1). Оптимизация структур проводилась с использованием функционала B3LYP и базисного набора 6-311G(d).

Cхема1. Предполагаемый механизм восстановления водорода комплексом [NiIIL]

В дальнейшем мы планируем провести электрохимические исследования с синтезированными комплексами и изучить зависимость эффективности катализатора от различных заместителей в лиганде.

**Литература**

1. Wang S., Lu A., Zhong C. J. Hydrogen production from water electrolysis: role of catalysts // Nano Convergence. 2021. Т. 8. P. 1-23.

2. Haddad A. Z. et al. Metal-assisted ligand-centered electrocatalytic hydrogen evolution upon reduction of a bis (thiosemicarbazonato) Cu (II) complex // Inorganic chemistry. 2017. Т. 56. Vol 18. P. 11254-11265.