**Эксперимент, квантово-химическое моделирование TDDFT-спектров и анализ орбиталей, участвующих в электронных переходах, комплекса состава [Fe2(SC2N3C6H4NO2)2(NO)4] в растворе DMSO**

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

*Студент, 4 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*

Исследование новых серосодержащих нитрозильных комплексов железа открывает перспективы создания NO-доноров с заданными биологическими свойствами [1]. УФ-спектры поглощения 8∙10-5 М комплекса состава [Fe2(SC2N3C6H4NO2)2(NO)4] регистрировали в диапазоне 250-750 нм через определенные интервалы времени при 23℃ на UV-Vis Спектрофотометре Agilent Cary 60 в течение 25 часов. По полученному спектру можно сделать вывод, что исследуемое соединение трансформируется в растворе ДМСО. Это представляет интерес для изучения NO-донорной активности и природы образующихся продуктов.

Чтобы более детально понять происходящие в растворе ДМСО процессы, были проведены квантово-химическое моделирование TDDFT-спектров и анализ орбиталей, участвующих в электронных переходах. Было показано, что на теоретическом УФ-спектре (рис. 1) самая интенсивная полоса поглощения наблюдается при длине волны 385.24 нм, которая хорошо совпадает с экспериментальным значением ~380 нм. Согласно TDDFT расчету, она соответствует переходу π(Fe(NO)2) → dz2(Fe) + p(S): данный электронный переход затрагивает Fe-NO-фрагменты, и ее исчезновение в спектре означает исчезновение этой связи, то есть NO-донирование.



Рис. 1. Теоретический УФ-спектр исследуемого комплекса в растворе DMSO

Был рассмотрен переход π(Fe-μ-SCN) → π\*(Ph), который наблюдается при длине волны 493.83 нм на теоретическом спектре: он свидетельствует о разрыве связей Fe-S и Fe-N с μ-SCN мостиком. Также были рассмотрены другие имеющиеся полосы поглощения и соответствующие им переходы.

Таким образом, из анализа спектров был сделан вывод, что в растворе ДМСО протекают 2 процесса распада комплекса – отрыв NO-лиганда и разрушение биядерной структуры. Благодаря полученным результатам была смоделирована энергетическая диаграмма распада исследуемого комплекса железа в растворе ДМСО, которая дала полное понимание всех происходящих трансформаций соединения.

*Работа выполнена по теме государственного задания (Рег.№ 124020500019-2).*

**Литература**

1. G.B. Richter-Addo, P. Legzdins, *Metal Nitrosyls*, Oxford University Press, Oxford, 1992.