**Теоретическое исследование факторов, влияющих на параметр магнитной анизотропии в комплексах шестикоординированного Co(II)**

***Галкина А.С.1***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*1Южный федеральный университет,*

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

*E-mail:* *algal@sfedu.ru*

Использование современных ферромагнитных материалов для получения устройств для сверхплотного хранения и обработки информации ограничено из-за явления суперпарамагнетизма. Решение данной проблемы может быть найдено в применении мономолекулярных магнитов – материалов, которые проявляют магнитные свойства на уровне одной молекулы, что обусловлено наличием у них барьера перемагничивания (Uэфф), пропорционально зависящего от параметра магнитной анизотропии (D), знак которого должен быть отрицательным [1].

С целью исследования влияния природы лигандов на параметр магнитной анизотропии комплексов Co(II) нами были проведены квантово-химическое моделирование структуры и расчет параметра магнитной анизотропии для ряда комплексных соединений Co(II) на основе 4,6-дифенилпиримидилгидразона диацетила (L) с общей формулой [CoIILX2] (X = NCS–, Cl–, Br–) (типа 1) и с общей формулой [CoIILY2] 2BF4 (Y = H2O, Py) (типа 2) (рис. 1). Моделирование структуры проводилось с использованием метода DFT (функционал PBE0 в базисе 6-311G(d)), расчет параметра D проводился в рамках метода CASSCF (DKH, def2-TZVP).

Рис. 1. Схемы строения комплексов типа 1 и 2

В таблице 1 представлены результаты расчетов D, а также результаты сравнения степеней выраженности октаэдрической (OC-6) и тригонально-призматической (TPR-6) геометрий координационного узла, рассчитанных методом Continuous Shape Measures в программе Shape 2.1. Из приведенных данных видно, что для всех комплексов Co(II) ожидается реализация легкой оси намагничивания (D < 0), причем, в основном, значение D тем отрицательнее, чем меньше вклад октаэдрической координации в геометрию координационного узла (т.е. чем больше OC-6).

Таблица 1. Результаты квантово-химических расчетов значений D и анализа геометрии

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| X/Y | D, см–1 | OC-6 | TPR-6 |
| Cl– | –124.0 | 8.552 | 7.437 |
| Br– | –116.4 | 8.285 | 8.221 |
| NCS– | –99.4 | 7.452 | 7.127 |
| Py | –51.6 | 7.028 | 6.143 |
| H2O | –40.1 | 10.833 | 2.612 |

Полученные результаты также указывают на то, что наилучшие свойства мономолекулярных магнитов ожидаются от комплексов, содержащих в качестве солигандов анионы Cl– и Br–.

**Литература**

1. Новиков В.В., Нелюбина Ю.В. Современные физические методы для молекулярного дизайна мономолекулярных магнитов // Успехи химии. 2021. Т. 90. С. 1330-1358.