

3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Молекулярная структура и электронные спектры окта(4-пропилфенокси)фталоцианина и его металлокомплексов с Al(III) и Ga(III)

А.А.Князева, У.А.Петрова, А.В.Ерошин, Е.В.Шагалов,
М.Н.Завалишин, Ю.А.Жабанов

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, д. 7, Иваново, Россия, e-mail: knyazeva_alina1@mail.ru*

В данной работе проведено исследование геометрического и электронного строения молекулы окта(4-пропилфенокси)фталоцианина и его металлокомплексов с Al(III) и Ga(III) методами квантовой химии. Квантово-химические расчеты проводились методом теории функционала плотности DFT в приближении CAM-B3LYP в комбинации с базисным набором def2-TZVPD.

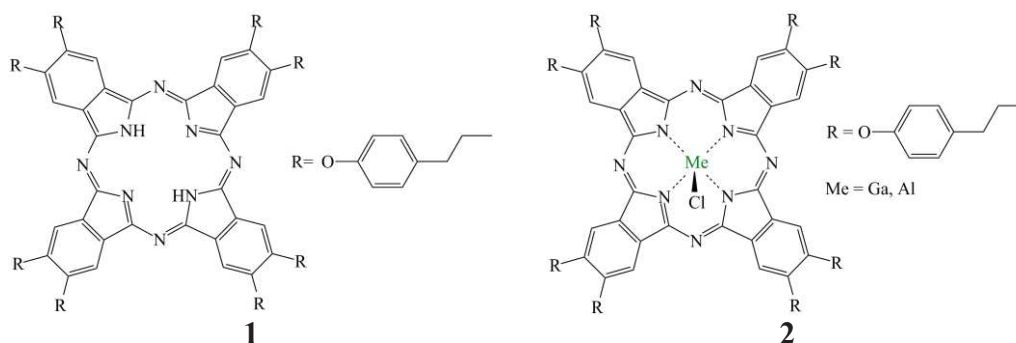


Рисунок 1 – Структурные формулы окта(4-пропилфенокси)фталоцианина (1) и его металлокомплекса с Al(III) и Ga(III) (2)

Установлено, что окта(4-пропилфенокси)фталоцианин (1) обладает плоской структурой макроцикла, в то время как металлокомплексы с Al(III) и Ga(III) (2) характеризуются куполообразным искажением макроциклического остова. Также можно отметить, что все полученные структуры относятся к точечной группе симметрии C_1 вследствие наличия объемных периферических заместителей. Также выполнено моделирование электронных спектров поглощения на основе результатов TDDFT расчетов. Было выявлено, что у окта(4-пропилфенокси)фталоцианина (1) в видимой области спектра самая интенсивная полоса поглощения находится при 630 нм, в то время как у металлокомплексов с Al(III) и Ga(III) (2) наблюдается батохромный сдвиг максимума поглощения на 17 и 14 нм соответственно.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-73-10107