



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

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Строение, спектроскопические и термодинамические свойства
комплексов тетрапиррольных макроциклов**

Ю.А. Жабанов

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

Расширение сфер практического применения тетрапиррольных макроциклов, таких, как нелинейная оптика, производство полупроводниковых и жидкокристаллических материалов, сенсорных устройств, требует не только расширения спектра их молекулярной архитектуры и способов ее конструирования, но и расширения исследований взаимосвязи геометрического и электронного строения молекул и их реакционной способности, спектроскопических свойств, как фундаментальной основы для реализации процессов разработки и получения новых материалов с заданными свойствами.

В данной работе проведено экспериментальное и теоретическое исследование геометрического и электронного строения молекул макроциклов с целью установления и теоретического объяснения общих закономерностей в их строении, а также расширения справочной информации. Для комплексного изучения структуры и энергетики макрогетероциклических соединений использован набор теоретических и экспериментальных методов. Состав пара и термодинамические характеристики тетрапиррольных макроциклов определялись методом высокотемпературной масс-спектрометрии. Молекулярная структура свободных молекул экспериментально изучалась методом газовой электронографии, а теоретически с помощью квантово-химических расчетов. Электронографические исследования приобретают особое значение в связи с тем, что получаемая молекулярная структура свободна от коллективных взаимодействий, характерных для рентгеновской и нейтронной дифракции, что позволяет с высокой достоверностью установить мелкие детали геометрического строения молекул, необходимые для надежного предсказания газофазных процессов, используемых в современной микро- и наноэлектронике, а также в оптоэлектронике. Важной составляющей проведенных исследований является теоретическое определение геометрического и электронного строения макроциклов с помощью квантово-химических расчетов, что позволило определить влияние заместителей на структуру и спектральные свойства этих соединений. Квантово-химические расчеты проведены для ряда металлокомплексов с макрогетероциклическими лигандами, например, для порфиринов, фталоцианинов, незамещенных и аннелированных порфиразинов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 24-73-10107