

Строение молекулы Cu(salen), Cu O₂N₂C₁₆H₁₄, по данным методов газовой электронографии и квантовой химии

Медведева Юлия Сергеевна
аспирант

Гиричев Георгий Васильевич
профессор

Гиричева Нина Ивановна
профессор

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия,

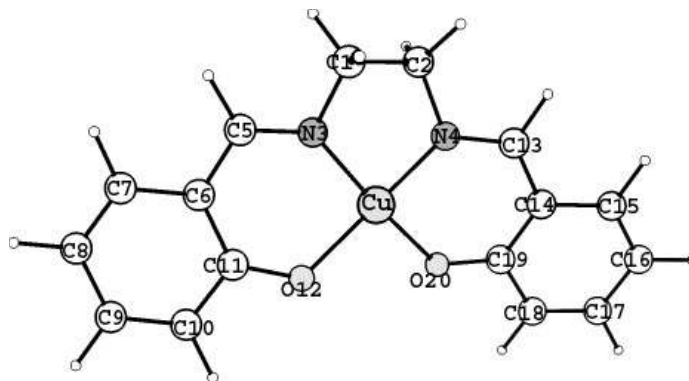
Кузьмина Наталья Петровна
профессор

Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: girichev@isuct.ru

Целью настоящей работы является масс-спектрометрическое исследование состава насыщенного пара Cu(salen), а также изучение строения свободной молекулы Cu(salen) методами газовой электронографии и квантовой химии. Эксперимент проводился на комплексе аппаратуры ЭМР-100/АПДМ-1. Препарат Cu(salen) испарялся из молибденовой ампулы при T=574(5) К. Одновременно со съемкой электронограмм проводилась запись масс-спектра исследуемых паров. Все зарегистрированные в масс-спектре ионы имели единственного молекулярного предшественника – мономерную молекулу Cu(salen).

Структурный анализ проведен в предположении C₂-симметрии молекулы. Полученные в результате МНК-анализа функции sM(s) (значение фактора рассогласования 3,3%) геометрические параметры свободной молекулы приведены в таблице вместе с расчетными параметрами (метод B3LYP, базисы CEP-31G и 6-31G*).



Параметр	Cu(salen) ЭГ, газ	Cu(salen) B3LYP/CEP-31G	Cu(salen) B3LYP/6-31G*
г в Å, углы в град.	r _а структура	r _с структура	r _с структура
r(C1-C2)	1.543(3)	1.554	1.538
r(C-C _{ср}) в C ₆ H ₄	1.414(3)	1.435	1.410
r(C1-N3)	1.467(3)	1.490	1.461
r(N3-C5)	1.306(3)	1.324	1.300
r(C-H _{ср})	1.131(5)	1.098	1.092
r(C11-O12)	1.323(7)	1.336	1.297
r(N3-Cu)	1.920(18)	1.972	1.941
r(O12-Cu)	1.925(16)	1.919	1.891
O12-N3-O20-N4	178.9(67)	163.0	145.6

Межъядерные расстояния C1-C2 и C1-N3 соответствуют представлению об одинарных связях C-C и C-N, а N3-C5 - о двойной связи N=C. Структура пятичленного цикла C₂N₂Cu отвечает твист-конформации с наибольшим торсионным углом вокруг связи C-C φ(NCCN)=42,1°. Электронографическим данным соответствует модель с близкими расстояниями Cu-O и Cu-N и практически плоским фрагментом CuN₂O₂, что заметно отличается от результатов расчетов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 07-03-00656).