

## ИК-спектроскопическое исследование комплексов галогенидов меди(II) с 1-трет-бутил-1,2,4-триазолом

Д. С. Сапарова<sup>1</sup>, Вадим Е. Матулис<sup>2</sup>, М. М. Дегтярик<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>2</sup>НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь, e-mail: monija@tut.by

Недавно нами синтезированы и охарактеризованы комплексы галогенидов меди(II) с 1-трет-бутил-1,2,4-триазолом (L) состава  $\text{CuL}_2\text{X}_2$  и  $\text{CuL}_4\text{X}_2$ , где  $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$  [1]. Состав и строение металлокомплексов определены методами элементного анализа, рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии. Необходимо отметить, что методом ИК-спектроскопии относительно быстро и без разрушения исходного образца можно проследить характер изменений, претерпеваемых лигандом при его комплексообразовании с ионом металла, место локализации координационной связи, а также наличие водородных связей и межмолекулярных взаимодействий. Кроме того, структурная особенность ИК-спектров азолов и их КС является внутренним свойством этих соединений, зависящим только от расположения и взаимного влияния связей, входящих в элементарную ячейку атомов, а частота колебаний определяется, главным образом, массой колеблющихся атомов и их групп, а также жесткостью химической связи. Анализ средней области ИК-спектров при  $3200\text{--}2800\text{ см}^{-1}$  свободного L и его КС показывает, что наибольшие изменения при координации L ионом металла претерпевает область валентных колебаний связей C–H триазольного цикла  $\nu(\text{CH})_{\text{Гр}}$  и алкильного заместителя, соответственно  $3160\text{--}3020$  и  $2990\text{--}2880\text{ см}^{-1}$ . В ИК-спектрах изученных комплексов [1] происходит смещение и расщепление полосы  $\nu(\text{CH})_{\text{Гр}}$  на несколько компонент. В связи с тем, что согласно РСА изученные КС хлорида и бромиды  $\text{Cu(II)}$  являются изоструктурными, то и изменения их спектроскопической картины также однотипны и зависят в основном от количества координированных молекул лиганда и природы аниона. Необходимо отметить, что при координации L центральным атомом происходит разрушение полимерной структуры исходного лиганда, образованного водородными связями. В связи с этим в ИК-спектрах металлокомплексов исчезают полосы поглощения  $\nu[\text{C}(5)\text{H} \dots \text{N}(4)]$ . Так как полиазотсодержащие гетероциклы являются амбидентными соединениями, экспериментально сложно получить надежную информацию о характеристичности основных частот в ИК-спектрах изученного триазола и его КС, а также корректно соотнести изменения положения атомов и групп в координационном полиэдре металлокомплекса с интенсивностью их полос поглощения в ИК-спектре. Для решения этой задачи возможны два пути: во-первых, применение ИК-

спектроскопии для получения информации о достаточно большом числе различных по составу КС рассматриваемого класса с целью выявления общих закономерностей с последующей идентификацией наиболее характеристичных частот колебательных спектров; во-вторых, данные квантово-химических расчетов и теоретического анализа колебательных спектров, которые дают хорошее понимание их природы и способствуют более точному и детальному отнесению полос поглощения к определенному виду колебаний.

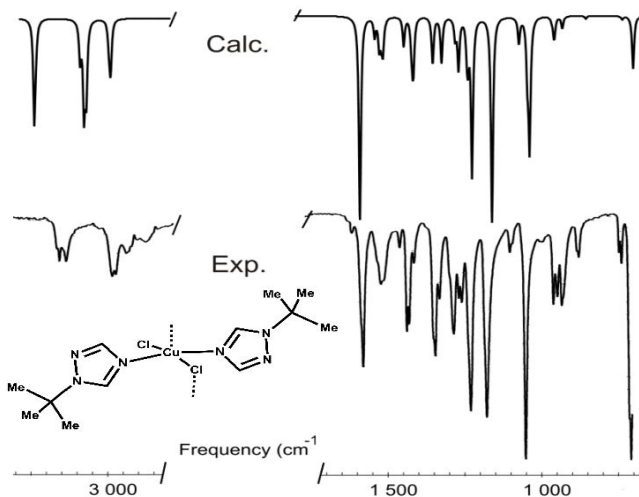


Рис. Расчетный (Calc) и экспериментальный (Exp) ИК спектры  $\text{CuL}_2\text{Cl}_2$   
 ИК-спектры L и его комплексов с хлоридом меди(II) были рассчитаны с использованием программного пакета Gaussian 09 с использованием уровня теории ВЗРW91/6-311G(d,p). Разложение нормальных мод по внутренним координатам выполнялось с использованием программного пакета GAMESS. Как видно из рисунка, экспериментальный ИК-спектр КС хорошо согласуется с теоретически прогнозируемым, что позволило обеспечить надежное отнесение наблюдаемых полос поглощения

### Список литературы

1. S. V. Voitekhovich [et. al.].Z . Anorg. Allg. Chem. (2018) 644 : 100.