

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА $^{13}\text{C}$ -ЯМР ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ ГЕТЕРОЛЕПТИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНИДОВ(III) С ТЕТРАПИРРОЛЬНЫМИ ЛИГАНДАМИ

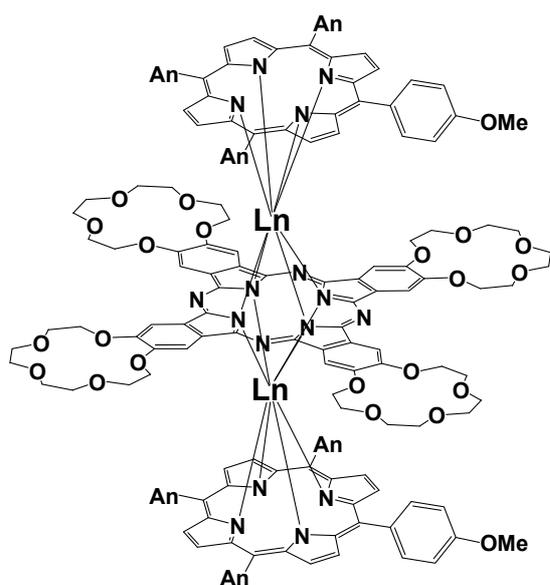
**К.П. Бирин, Ю.Г. Горбунова, А.Ю. Цивадзе**

*ИФХЭ РАН, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д.31, корп.4*

*e-mail: yulia@igic.ras.ru*

Сэндвичевые комплексы лантанидов с циклическими тетрапиррольными лигандами привлекают интерес как перспективные соединения для создания новых функциональных материалов. В ряде публикаций на примерах гетеролептических комплексов лантанидов, показана возможность их применения в нелинейной оптике, супрамолекулярной химии а также для создания устройств хранения информации на молекулярном уровне.

Установление структуры таких соединений методом РСА осложнено в силу необходимости получения комплексов в монокристаллическом состоянии. Кроме того, данные рентгеноструктурного анализа могут не соответствовать структуре изучаемого соединения в растворе. Ранее нами на примере трехпалубных



(порфириinato)(фталоцианинатов) лантанидов первой половины ряда (La-Eu, за исключением Pm) был разработан метод их структурной характеристики в растворах на основе данных лантанид-индуцированных сдвигов (ЛИС) сигналов резонанса протонов в спектрах  $^1\text{H}$ -ЯМР серии полученных соединений. Этот метод заключается в определении геометрического положения протонов системы относительно атомов лантанидов и дальнейшей оптимизации скелета молекулы на основе этой информации.

В данной работе найдены подходы к эффективной регистрации и интерпретации спектров  $^{13}\text{C}$ -ЯМР

(порфириinato)(фталоцианинатов) лантанидов первой половины ряда. Выполнено отнесение сигналов  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$  и  $\text{CH}$ -групп серии комплексов  $[\text{An}_4\text{P}]\text{Ln}[(15\text{C}5)_4\text{Pc}]\text{Ln}[\text{An}_4\text{P}]$  ( $\text{Ln}=\text{La-Eu}$ , за исключением Pm). Показано, что ЛИС резонансных сигналов атомов углерода скелета молекулы подчиняются выявленным ранее на примере протонов линейным корреляциям. Для атомов углерода  $\text{CH}_n$ -групп молекулы выполнено разложение эффективной величины лантанид-индуцированного сдвига сигналов на контактную и магнитно-дипольную составляющие, что будет использовано для точного анализа структурных параметров гетеролептических комплексов в растворах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №08-03-00835) и программ Российской академии наук.