

**ПРИМЕНЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В КАЧЕСТВЕ ЛИНКЕРОВ ДЛЯ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Бурлакова А.А. (ИТМО), Чудина М.П. (ИТМО)

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, PhD Мельчакова Ю.А. (ИТМО)

**Введение.** Металлоорганические каркасы (MOF) представляют собой класс перспективных пористых материалов, формируемых путем самосборки металлических узлов (кластеров) и органических лигандов, соединенных координационными связями [1, 2]. Такая архитектура позволяет создавать материалы с высокой площадью поверхности и настраиваемой пористостью, что делает MOF привлекательными для широкого спектра применений. Ключевую роль в формировании структуры и определении свойств MOF играют органические линкеры – лиганды, которые влияют на размер пор, стабильность и функциональные характеристики каркаса. Изменение лигандов позволяет настраивать свойства MOF, такие как сорбция, катализ, проводимость [3]. Разработка линкеров с заданными электронными и пространственными характеристиками важна для синтеза MOF с нужными свойствами. Компьютерное моделирование, включая квантово-химические расчёты, используется для рационального проектирования лигандов.

**Основная часть.** Для анализа свойств лигандов и оценки их потенциального использования в металл-органических каркасах были выбраны такие молекулы, как терефталевая кислота, валин и аминокислота. Квантово-химическое моделирование было проведено с использованием программы GAMESS для исследования ковалентно-связанных комплексов исходных молекул (терефталевая кислота + валин и аминокислота + терефталевая кислота) с целью оценки их потенциала для применения в качестве лигандов в металл-органических каркасах и сравнения их свойств.

Для вычислений использовался метод функционала плотности (DFT), с функционалом B3LYP и базисным набором 6-31G\*\*, что позволило наиболее точно оценить электронный обмен и корреляцию [4]. В ходе расчетов были смоделированы стабильные структуры комплексов молекул, определены малликовские заряды, вектор поляризуемости и дипольный момент, а также получены данные по ширине запрещенной зоны и локализации граничных молекулярных орбиталей (HOMO, LUMO). Делокализация HOMO и LUMO на различных функциональных группах, а также конфигурация молекул определяет способность участвовать в координации с металлическими центрами. Величина энергетического разрыва характеризует стабильность структуры и потенциальную фотокаталитическую активность. Также был проведен расчет матрицы вторых производных и получен инфракрасный спектр колебательных частот молекул.

**Выводы.** Полученные структуры комплексов исходных молекул и визуализация распределения электронной плотности были использованы для сравнительного анализа структуры молекул, оценки геометрического расположения лигандов, электронных и проводящих свойств. Совокупность этих факторов позволяет оценить перспективность применения молекул в качестве линкеров для MOF с разными целями. [5]

**Список использованных источников:**

1. Ma T., Li H., Ma JG., Cheng P. Application of MOF-based materials in electrochemical sensing // Dalton Trans. – 2020. – № 49. – С.17121-17129.
2. Бутова В.В., Солдатов М.А., Гуда А.А., Ломаченко К.А., Ламберти К. Металлоорганические каркасные структуры: строение, свойства, методы синтеза и анализа // Успехи химии. – 2016. – № 85. – С.280-307.

3. Сопыева О., Рахманов М. Синтез и применение металлоорганических каркасных структур (MOF) в катализе // Вестник науки. 2024. – №5 (74) — С.1389-1393.
4. Hai G., Wang H. Theoretical studies of metal-organic frameworks: Calculation methods and applications in catalysis, gas separation, and energy storage // Coordination Chemistry Reviews. – 2022. – № 469. – С.214670.
5. Gao S., Cen W., Li Q., Li J., Lu Y., Wang H., Wu Z. A mild one-step method for enhancing optical absorption of amine-functionalized metal-organic frameworks // Applied Catalysis B: Environmental. – 2018. – 227 – С.190-197.