

УДК 541.49:547.476

**СТРУКТУРА ГЕКСАЯДЕРНОГО ЦИТРАТА АЛЮМИНИЯ(III) ПО  
ДАНЫМ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{27}\text{Al}$**

Иванова В.Ю.<sup>1</sup>, Чевела В.В.<sup>1</sup>, Клочков В.В.<sup>2</sup>, Ефимов С.В.<sup>2</sup>, Безрядин С.Г.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Химический институт им. А.М.Бутлерова КФУ, 420008, Казань,*

*Кремлевская 29/1, Vladimir.Chevela@kpfu.ru.*

<sup>2</sup>*Институт физики КФУ, 420008, Казань, Кремлевская 16а.*

<sup>3</sup>*Оренбургский аграрный университет, 460014, Оренбург, Челюскинцев, 18.*

Проведено моделирование структуры гексаядерного цитратного комплекса алюминия(III)  $\text{Al}_6(\text{Cit})_6(\text{OH})_2^{8-}$  ( $\text{H}_4\text{Cit}$  – лимонная кислота) методами молекулярной механики и квантовой химии (программа PRIRODA). По данным моделирования данный комплекс можно представить как результат объединения трех димерных фрагментов  $\text{Al}_2(\text{Cit})_2^{2-}$ , в каждом из которых реализуется четырехчленный цикл  $\text{Al}_2\text{O}_2$  (O – атомы кислорода оксигрупп). Для уточнения структуры данного комплекса в водном растворе было предпринято его ЯМР – исследование. Спектры ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$   $^{27}\text{Al}$  регистрировались на спектрометре Bruker Avance HD 700. Данные спектров на ядрах  $^{13}\text{C}$  указывают на наличие 6 типов  $\text{CH}_2$ - групп цитрато-лигандов, что не противоречит предложенной геометрии комплекса  $\text{Al}_6(\text{Cit})_6(\text{OH})_2^{8-}$ , рассчитанной методом DFT.