

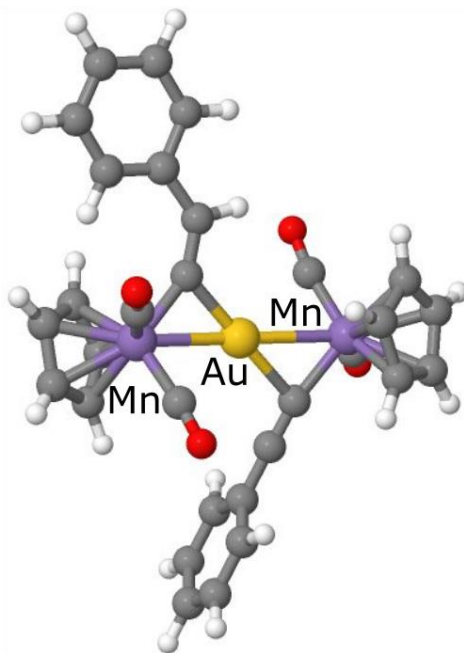
Исследование структуры трёхъядерных кластеров с остовами MAuM (M = Mn, Re) спектроскопическими, электрохимическими и квантово-химическими методами

Иванова-Шор Е.А., Верпекин В.В., Чудин О.С.,
Зимонин Д.В., Лалетина С.С., Шор А.М.

*Институт химии и химической технологии СО РАН, Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр СО РАН",
Красноярск, Россия
shor-elena@rambler.ru*

Изучены реакции комплексов золота (I) (L)Au-C≡C-Ph (L = тетрагидротиофен, диметилсульфид, пиридин), содержащих слабокоординирующие, легко замещаемые нейтральные лиганды с фенилвинилиденовыми комплексами марганца и рения $\text{Cr}(\text{CO})_2\text{M}=\text{C}=\text{CHPh}$ (M = Mn, Re). Показано, что реакции приводят к образованию трёхъядерных кластеров с остовами MAuM (M = Mn, Re), содержащих винилиденовый и ацетиленидный лиганды. На основании данных метода РСА установлено, что в образующихся кластерах винилиденовый фрагмент является мостиковым, образуя две связи с атомами Au и M, тогда как ацетиленидный фрагмент образует связь с другим атомом металла и несимметрично π-координируется атомом золота. Исследованы спектроскопические характеристики кластеров. Редокс-свойства полученных гетерометаллических комплексов изучены электрохимическими методами.

Методом функционала плотности (B3LYP, базис TZVP) рассчитана структура MnAuMn комплекса. Показан донорно-акцепторный характер металл-лигандного взаимодействия.



Благодарность.

Представленное исследование осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научно-исследовательского проекта "Новые соединения на основе золота и благородных металлов: синтез, физико-химические свойства, каталитическая способность" (грант №18-43-240010 р_а). Авторы благодарят Сибирский суперкомпьютерный центр (www.sssc.ru) и за предоставленные вычислительные ресурсы.