Тематический раздел: Квантово-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Утверждённая научная специальность ВАК: 1.4.4. Физическая химия;
1.4.8. Химия элементоорганических соединений
Дополнительная научная специальность ВАК: 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/23-75-9-97
Цифровой идентификатор объекта – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-75-9-97
Поступила в редакцию 4 сентября 2023 г. УДК 546.9:544.022.

Теоретическое моделирование структур биметаллических кластерных комплексов, содержащих Pt_2Os_3

© Гарифзянова*[+] Гюзель Габдульбаровна, Храпковсикй Григорий Менделеевич
Кафедра интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами.
Казанский национальный исследовательский технологический университет.
ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: +7 (843) 231-89-41. E-mail: garifz@kstu.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантово-химический расчет, платина, осмий, DFT, метод PBEPBE/LanL2DZ.

Аннотация

Выполнены квантово-химические расчеты биметаллических кластерных комплексов, содержащих Pt_2Os_3 с двумя фосфиновыми (PH_3 или $PBut^t_3$) лигандами. Известно, что что группа $Pt(PBut^t_3)$ может облегчить удаление CO из лигандов $Os_3(CO)_{12}$, что приводит к образованию фосфинзамещенных производных Определены оптимизированные значения геометрических параметров модельного соединения $Pt_2Os_3(CO)_{12}(PH_3)_2$, металлическая структура которого повторяла нанокластер Pt_2Os_3. В модельном соединении $Pt_2Os_3(CO)_{12}(PH_3)_2$ наблюдается образование четырех мостиковых связей между лигандами CO и атомами платины и осмия. При замене в комплексе $Pt_2Os_3(CO)_{12}(PH_3)_2$ водородных заместителей на трет-бутильные заместители происходит смещение >C=O групп. В рамках расширенного метода функционала плотности UPBEPBE рассчитаны геометрические данные биметаллического комплекса $Pt_2Os_3(CO)_{12}(PBut^t_3)_2$, которые были сопоставлены с экспериментальными значениями. Для биметаллических комплексов $Pt_2Os_3(CO)_{12}(PH_3)_2$ и $Pt_2Os_3(CO)_{12}(PBut^t_3)_2$ рассматривались спиновые мультиплетности 1, 3 и 5. Из оптимизированных структур при указанных мультиплетностях выбирали ту, которая обладала наименьшей энергией. Расчет параметров рассчитываемых комплексов при мультиплетности, отличной от 1, проводили неограниченным методом (UPBEPBE). Проанализированы тенденции изменения геометрических характеристик и полной электронной энергии в данных биметаллических комплексах с изменением значений мультиплетности. Как в экспериментальных данных, так и в расчетных Pt-мостиковые связи Os-Os, значительно длиннее, чем неплатиновая связь Os-Os. По данным расчета в соединении $Pt_2Os_3(CO)_{12}(PBut^t_3)_2$ наблюдается образование четырех мостиковых связей с лигандами CO между атомами платины и осмия.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:
Гарифзянова Г.Г., Храпковский Г.М. Теоретическое моделирование структур биметаллических кластерных комплексов, содержащих Pt_2Os_3. *Бутлеровские сообщения.* **2023**. Т.75. №9. С.97-104. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-75-9-97

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:
Гарифзянова Г.Г., Храпковский Г.М. Теоретическое моделирование структур биметаллических кластерных комплексов, содержащих Pt_2Os_3. *Бутлеровские сообщения В.* **2023**. Т.6. №3. Id.14. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RB/23-6-3-14