

Сравнительное исследование атомно-электронной структуры координационных узлов в молекулярных комплексах [M(Salen)] (M=Co, Ni, Cu) по данным рентгеновской абсорбционной спектроскопии

*В. А. Гаас¹, П. М. Корусенко^{1,2}, Е. В. Храмов³, О. В. Петрова⁴, А. А. Верещагин¹,
О. В. Левин¹, К. А. Бакина⁴, Р. Н. Скандаков⁴, А.С. Виноградов¹*

¹ Санкт-Петербургский государственный университет

² Омский государственный технический университет

³ НИЦ «Курчатовский институт»

⁴ ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

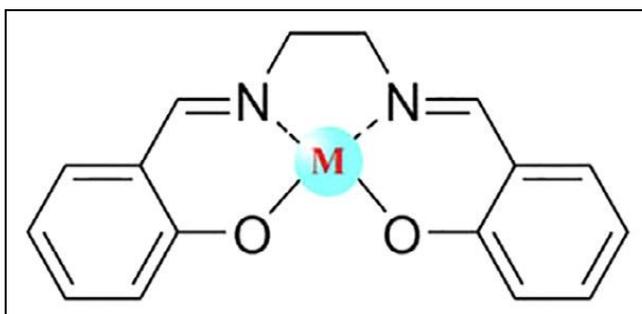


Рис. 1. Схематическое изображение комплексов [M(Salen)]: M = Co, Ni, Cu [1]

Электропроводящие полимеры на основе комплексов переходных металлов с лигандами саленового типа [M(Salen)] привлекают внимание исследователей благодаря возможности настройки их свойств посредством изменения металлического центра и атомов лиганда и находят применение в каталитических процессах, сенсорных технологиях и

энергетической отрасли [1]. Подробная информация об атомном и электронном строении комплексов [M(Salen)] необходима для детального понимания процессов, протекающих в полимерах на их основе.

Целью настоящей работы является получение информации о зарядовом состоянии атома металла, а также геометрической структуре и межатомных расстояниях R(M-O), R(M-N) в координационном узле [MO₂N₂] при замене M3d-атома (Co → Ni → Cu) в комплексах [M(Salen)].

Для этого с использованием источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» и оборудования станции «Структурное материаловедение» были выполнены измерения M1s NEXAFS- и EXAFS-спектров в области жесткого рентгеновского излучения с энергиями квантов 7500–10000 эВ с шагом ~0.35 эВ в режиме на пропускание.

Для описания экспериментальных EXAFS-спектров были использованы 3 вида моделей: мономер, M-M-димер, M-O-M-O-димер. В результате сравнительного анализа были определены модели, наиболее подходящие для описания структур комплексов [M(Salen)]. Также было установлено, что межатомные расстояния R(M-O), R(M-N) в координационном центре [MO₂N₂] изменяются при замене атома металла.