

РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ТРЕХЪЯДЕРНЫХ МЕТАЛЛОКЛАСТЕРНЫХ ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Федоренко А.Д., Грибанова С.А., Семушкина Г.И., Перегудова Н.Н., Лаврухина С.А.,
Артемкина С.Б., Фоменко Я.С., Гуцин А.Л., Петров П.А., Мазалов Л.Н.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 3,
e-mail: fedorenko@niic.nsc.ru*

В настоящее время наблюдается повышенный интерес к неорганическим соединениям на основе кластерных комплексов переходных металлов, которые могут быть строительными блоками при целенаправленном синтезе материалов с заданными размерными, оптическими и магнитными свойствами. Среди разнообразных типов кластерных соединений особое место занимают комплексы, в которых металлокластеры координированы халькогенидными и полихалькогенидными лигандами. Изучение характера распределения электронной плотности между атомами комплекса и анализ особенностей электронных взаимодействий металл-халькоген необходимы для понимания и прогнозирования их физических и химических свойств.

Современная рентгеновская спектроскопия является эффективным методом изучения электронного строения различных веществ и материалов. Рентгеновские фотоэлектронные, рентгеновские эмиссионные и рентгеновские абсорбционные спектры дают информацию об энергетическом положении и парциальном атомном составе занятых и свободных молекулярных орбиталей комплексов, а также о распределении электронной плотности.

В настоящей работе проведен комплексный анализ особенностей электронного строения трехъядерных халькогенидных комплексов $\{M_3Q_4\}^{4+}$ и $\{M_3Q_7\}^{4+}$ ($M = Mo, W$; $Q = S, Se$). Экспериментальные данные были сопоставлены с теоретическими спектрами, полученными в рамках теории функционала плотности, что позволило определить изменения электронного строения трехъядерных комплексов в зависимости от природы терминальных лигандов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-03-01061 а. Работа была выполнена с использованием ресурсов ЦКП Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиМГ СО РАН. Авторы выражают благодарность Берлинскому центру материалов и энергии им. Гельмгольца за возможность проведения измерений NEXAFS спектров в рамках Российско-Германской лаборатории и персоналу станции за помощь в проведении экспериментов.