

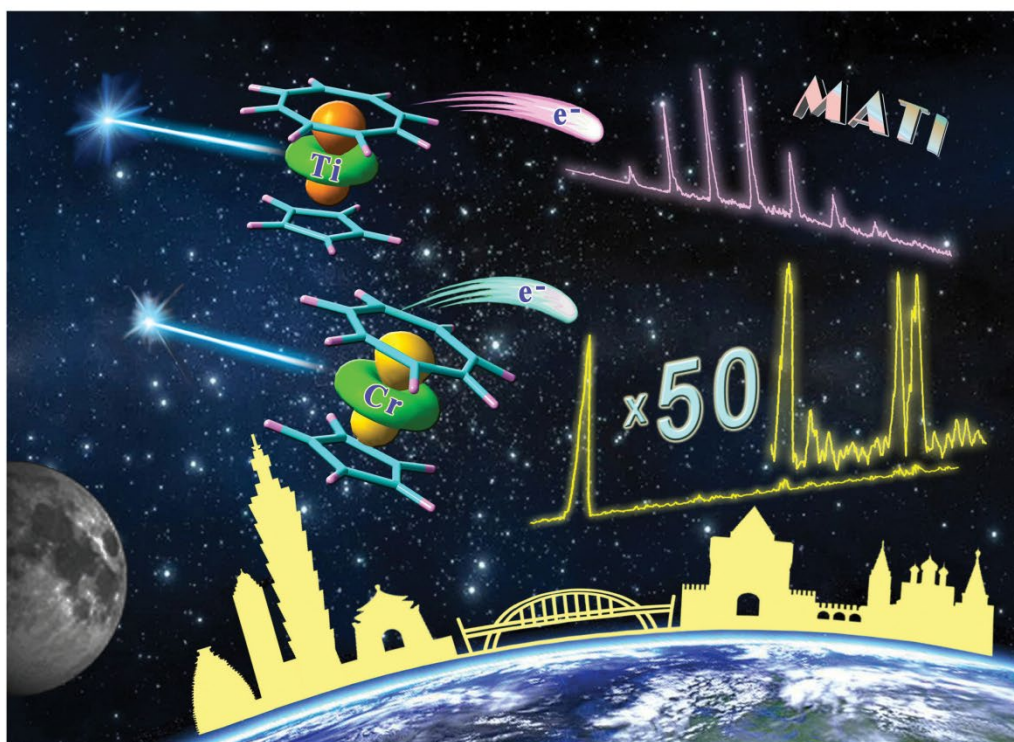
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук

S. Yu. Ketkov, S.-Y. Tzeng, E. A Rychagova, G. V. Markin, S. G. Makarov, W.- B. Tzeng

Исследование методами лазерной спектроскопии и квантовой химии неожиданных структурных изменений сэндвичевых комплексов в процессе ионизации

Dalton Trans. 2021, 50, 10729-10736

Обнаружены неожиданные особенности структурной трансформации сэндвичевых соединений титана и хрома при ионизации. С помощью прецизионной пороговой фотоионизационной спектроскопии и квантово-химических расчетов впервые показано, что отрыв несвязывающего d-электрона от комплекса титана, в отличие от соединения хрома, приводит к существенным изменениям молекулярной геометрии. Обнаруженный эффект отражает новые закономерности влияния строения сэндвичевых комплексов на их способность формировать устойчивые или реакционно-способные катионы, играющую ключевую роль для использования сэндвичевых систем в катализе и биомедицине, а также для создания на их основе молекулярных машин.



Showcasing research from Professor Sergey Ketkov's laboratory, G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry RAS, Nizhny Novgorod, Russian Federation, and Professor Wen-Bih Tzeng's laboratory, Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, Taipei, Taiwan.

Laser spectroscopic and computational insights into unexpected structural behaviours of sandwich complexes upon ionization

The first threshold ionization study of mixed sandwich compounds reveals unexpectedly large differences in the structural deformations accompanying the electron detachment from $(C_7H_7)(C_5H_5)Cr$ and $(C_8H_8)(C_5H_5)Ti$. DFT calculations provide new insights into the interplay between ionic and covalent interactions responsible for this intriguing effect.

As featured in:



See Sergey Yu. Ketkov, Wen-Bih Tzeng *et al.*, *Dalton Trans.*, 2021, 50, 10729.