

EGY MANGÁNKOMPLEX REZGÉSI SPEKTROSKÓPIÁJA

Billes Ferenc, Ziegler Ildikó,

*Budapesti Muszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi
Tanszék*

*H-1521 Budapest, Muegyetem rkpt. 3.
fbilles@mail.bme.hu*

A mangán, mint átmenti fém hajlamos komplexképzésre. $Ar3d^54s^2$ elektronszerkezetével három 1-nitrozo-2-naftol molekulával, mint ligandokkal komplexet alkot.

Eloállítottuk a mangán komplexet a megfelelő ruténium komplex eloállításának receptje szerint [1] magán-kloridból és 1-nitrozo-2-naftolból. Mértük a szintézis kiindulási anyagainak és a terméknek az infravörös spektrumát. A komplex létrejöttének bizonyítására mért infravörös színképből kivontuk a készítéséhez használt mangán(II)klorid színképét, majd a különbségi színképet összehasonlítottuk a tiszta ligand színképével. A két színkép jellegzetesen, több helyen is eltért egymástól. A különbségi spektrumból hiányoznak a ligand egyes sávjai, sáveltolódások és sáv szélesség változások figyelhetők meg, bizonyítva, hogy a komplex létrejött.

Kvantumkémiai számításokat magas szinten, polarizációs függvényekkel végeztük. Az eredmények arra mutattak, hogy hasznos a számításokat diffúziós függvényekkel bővíteni. Ezzel a gyengébb kölcsönhatásokat inkább figyelembe tudtuk venni.

A számításokkal igyekeztünk meghatározni a komplex térszerkezetét és a mangánatom elektronszerkezetét ebben a vegyületben. A számítások során változtattuk a komplex feltételezett töltését és a mangánmag multiplicitását. Végül is a komplex töltése ennek során -1-nek, a mangán multiplicitása 6-nak adódott. Utóbbi azt jelenti, hogy a mangán öt d-elektronjával vesz részt a komplex kötésben, a további 5 elektront a ligandok adják. Így telítődnek a mangán d pályái. A számítások azt mutatják, hogy az OH csoportokból származó Mn-O kötések kissé rövidebbek, mint a nitrozo csoportokból származók. A megfelelő Mn-O kötéshosszak is kissé eltérők. Tehát a három ligand nem teljesen egyenértéku.

[1] A. K. Das, A. Rueda, L. R. Falvello, S. M. Peng, S. Bhattacharya, *Inorg. Chem.*, 38 (1999), 4365-4368.