Pincer típusú ligandumokat tartalmazó vegyületek vizsgálata számításos kémiai módszerekkel

Investigation of pincer ligand-based compounds using computational methods

DEAK Noémi, ATTIA Amr, NEMEȘ Gabriela

Babeş-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering,
Arany János street, no.11, 400028, Cluj-Napoca, Romania, noemi.deak (@) ubbcluj.ro

ABSTRACT

Sulphur containing compounds, particularly those having sulfinyl and sulfonyl moieties, have a wide range of applications.[1] They can be used for example in organic and organometallic synthesis, as ligands in catalyst structures, as fine chemicals and pharmaceuticals, or in biologically relevant compounds. [1] Furthermore, sulfone-based compounds have been shown to contribute to the stabilization of p- and d-block elements by having the role of donor groups in chelating type ligands. [2]

In the present work, we investigated the synergistic effects resulting from the combination of the previously studied sulfinyl and sulfonyl moieties with various phosphine and phosphonate functional groups. For this purpose, a series of molecules were evaluated in order to elucidate the electronic and steric effects associated with the two distinct functional groups using computational methods. Density functional theory (DFT) calculations and molecular modeling were employed to assess the coordination potential of these compounds as novel ligands, with particular emphasis on their ability to stabilize p- and d-block derivatives for potential applications in catalysis.

Keywords: sulphur-based ligand, phosphorus-based ligand, DFT calculations

KIVONAT

A kéntartalmú vegyületek, ezen belül különösen a szulfinil- és szulfonilcsoportot tartalmazó vegyületek, széles körben alkalmazhatóak.[1] Felhasználhatóak többek között a szerves és fémorganikus szintézisben, katalitikus rendszerek ligandumaiként, gyógyszerhatóanyagok előállításában, valamint biológiailag aktív vegyületekben is megtalálhatóak.[1] Emellett a szulfon tartalmú vegyületek kelátképző ligandumok donorcsoportjaiként a p- és d-mező elemeinek stabilizálásában is szerepet játszanak.[2]

Munkánk során a korábban vizsgált szulfinil- és szulfonilcsoportokat tartalmazó vegyületeket különböző foszfin- és foszfonátcsoportokkal kombináltuk és az így kialakított rendszerekben fellépő szinergikus hatásokat tanulmányoztuk. Ennek érdekében egy vegyületsorozat elektronikus és sztérikus tulajdonságait számításos kémiai módszerekkel térképeztük fel. DFT számítások és molekulamodellezés segítségével elemeztük a vizsgált vegyületek lehetséges koordinációs tulajdonságait, különös figyelmet fordítva ligandumként való alkalmazhatóságukra, valamint a p- és d-mező vegyületeinek stabilizálásában betöltött szerepükre. Az eredmények alapján ezen rendszerek potenciális katalitikus alkalmazási lehetőségeit is felmértük.

Kulcsszavak: kéntartalmú ligandumok, foszfortartalmú ligandumok, DFT-számítások

Acknowledgement

The authors thank for financial support provided by UEFISCDI through grant PN-IV-P2-2.1-TE-2023-0612 and Babes-Bolyai University thorough grant AGC-UBB-FCIC.

References

[1] I. Fernández, N. Khiar, *Chem. Rev*. 103, 3651–3706 (2003). [2] N. Deak, D. Madec, G. Nemes, *Eur. J. Inorg. Chem.,* 2769-2790 (2020). [3] N. Deak, O. Thillaye du Boullay, S. Mallet-Ladeira, I.-T. Moraru, D. Madec, G. Nemes, *Eur. J. Inorg. Chem*, 3729-3737 (2020).