

## NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC VÀ LIÊN KẾT CỦA PHỨC MONO-GOLD-CHLORIDE VỚI PHỐI TỬ CARBENE, SILYLENE, VÀ GERMYLENE

Huỳnh Thị Phương Loan<sup>1</sup>, Hoàng Văn Đức<sup>2</sup>, Nguyễn Thị Ái Nhung<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế

<sup>2</sup> Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

\*Email: ntanhung@hueuni.edu.vn

Ngày nhận bài: 20/01/2020; ngày hoàn thành phản biện: 21/02/2020; ngày duyệt đăng: 02/4/2020

### TÓM TẮT

Cấu trúc và năng lượng phân ly liên kết Au-E trong các phức tetraylene (carbene, silylene, germylene)  $[AuCl-NHE_{pr}]$  (Au-NHE) (E = C, Si, Ge) sử dụng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ tính toán tại mức BP86/def2-SVP và BP86/def2-TZVPP. Cấu trúc của phức carbene Au-NHC hiển thị phối tử carbene NHC tạo với phân tử AuCl một góc liên kết  $\alpha = 180,0^\circ$ . Tuy nhiên, góc liên kết  $\alpha$  trở nên cong hơn giữa nhóm phối tử và nhóm hợp chất AuCl khi E thay đổi từ C đến Si và Ge. Năng lượng phân ly liên kết Au-E của phức tetraylene-AuCl giảm dần: Au-NHC > Au-NHSi > Au-NHGe. Phân tích bản chất liên kết Au-E có sự đóng góp đáng kể của liên kết  $\pi$  từ phối tử đến hợp chất AuCl,  $ClAu \leftarrow NHE_{pr}$ . Từ kết quả NBO cho thấy phối tử NHE là chất cho liên kết  $\sigma$  mạnh  $ClAu \leftarrow NHE_{pr}$ , cho liên kết  $\pi$  yếu  $ClAu \leftarrow NHE_{pr}$ , và có liên kết  $\pi$  yếu từ hợp chất sang phối tử  $ClAu \rightarrow NHE_{pr}$ .

**Từ khóa:** carbene, DFT, germylene, năng lượng phân ly liên kết, orbital liên kết tự nhiên (NBO), silylene.

## **A THEORETICAL ASSESSMENT OF STRUCTURE AND BONDING OF GOLD-CHLORIDE COMPLEXES WITH CARBENE, SILYLENE, AND GERMYLENE**

**Huynh Thi Phuong Loan<sup>1</sup>, Hoang Van Duc<sup>2</sup>, Nguyen Thi Ai Nhung<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup>Faculty of Chemistry, University of Sciences, Hue University

<sup>2</sup>Faculty of Chemistry, University of Education, Hue University

\*Email: ntanhung@hueuni.edu.vn

### **ABSTRACT**

The structure and bonding situation in platinum complexes containing slight tetrylene ligands [AuCl-NHE<sub>pr</sub>] (Au-NHE) (E = C – Ge) were examined by charge method of density functional theory (DFT) at the levels of theory of BP86/def2-SVP and BP86/def2-TZVPP. The calculation of equilibrium structure of the slight ligands NHE in the complexes Au-NHE are bonded in distorted end-on way to AuCl fragment with the bending angle,  $\alpha$ , exhibiting the biggest value in carbenes systems then slightly decreasing from Au-NHC to Au-NHGe. Bond dissociation energies (BDEs),  $D_e$  (kcal.mol<sup>-1</sup>), decrease from the carbene complex to the weaker bonded silylene and germylene manners: Au-NHC > Au-NHSi > Au-NHGe. The hybridization of atoms E and Au has large p characters while the hybridization of atom Au has greater d character which leads to the Au-E bond possesses not only ClAu←NHE<sub>pr</sub> strong  $\sigma$ -donation but also a significant contribution  $\pi$ -donation ClAu←NHE<sub>pr</sub> and weak  $\pi$ -backdonation metal-ligand ClAu→NHE<sub>pr</sub> in complexes Au-NHE.

**Keywords:** carbene, Bond dissociation energies (BDE), DFT, germylene, NBO, silylene.



**Huỳnh Thị Phương Loan** tốt nghiệp cử nhân chuyên ngành Sư phạm Hóa học tại trường Đại học Quy Nhơn, Bình Định; nhận bằng Thạc sĩ khoa học chuyên ngành Hóa lý thuyết và hóa lý tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế; nghiên cứu sinh chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại khoa Hóa học, trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay, bà giảng dạy tại trường THPT Nguyễn Chí Thanh, huyện Hòa Thành, tỉnh Tây Ninh.

*Lĩnh vực nghiên cứu:* Hóa lý thuyết và Hóa tính toán.



**Hoàng Văn Đức** tốt nghiệp cử nhân Hóa học tại trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế; nhận bằng thạc sĩ khoa học Hóa học chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại trường Đại học Sư Phạm, Đại học Huế; nhận bằng tiến sĩ ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại Viện Hoá học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam. Hiện nay, ông giảng dạy và nghiên cứu tại trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế.

*Lĩnh vực nghiên cứu:* Hóa học vật liệu và vật liệu mới ứng dụng trong hấp phụ, xúc tác.



**Nguyễn Thị Ái Nhung** tốt nghiệp cử nhân hóa học tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế; nhận bằng thạc sĩ khoa học Hóa học chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại trường Đại học Sư Phạm, Đại học Huế; nhận bằng tiến sĩ ngành hóa lý thuyết tại trường Đại học tổng hợp Philipps, Marburg, Cộng Hòa Liên Bang Đức. Hiện nay, bà giảng dạy và nghiên cứu tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.

*Lĩnh vực nghiên cứu:* Hóa lượng tử và hóa lý thuyết.