

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЛАТИНЫ С ТЕТРАКИС(4-ПИРИДИЛ)ПОРФИРИНОМ

С.И.Божко<sup>1)</sup>, А.М.Ионов<sup>1)</sup>, В.С.Божко<sup>1)</sup>, Л.В.Яшина<sup>2)</sup>, А.А.Волыхов<sup>2)</sup>,  
М.М.Бржезинская<sup>3)</sup>, G.Dyker<sup>4)</sup>

<sup>1)</sup> Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка

<sup>2)</sup> Химический факультет Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова, Москва

<sup>3)</sup> Институт физики Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург

<sup>4)</sup> Ruhr-Universität, Bochum

Металлокомплексные соединения порфиринов привлекают внимание в связи с высокой биологической и каталитической активностью, которые обусловлены различными структурными и химическими особенностями, в частности, способностью к экстраординации – присоединению дополнительных лигандов в координационную сферу иона металла. Помимо этого, металлопорфирины обладают повышенной термической и химической устойчивостью, обладают полупроводниковыми свойствами. Для понимания физико-химических, каталитических, транспортных и других свойств металлопорфиринов необходимо исследование их атомной и электронной структуры, свойств химических связей, а также условий образования.

В данной работе продукты прямого металлирования тетракис(4-пиридил)порфирина (ТРy4P) изучались экспериментально методами УФЭС, РФЭС и NEXAFS с использованием синхротронного излучения (BESSY II). Объектами изучения были плёнки порфиринов, осаждённые химически (из растворов в хлороформе) и *in situ* из молекулярного потока на монокристалл  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Найдено, что после высоковакуумного осаждения малых количеств платины на монослой 2НТРy4P спектры уровня Pt 4d многокомпонентны, также наблюдаются изменения в спектре N1s. Очевидно, что сигнал Pt складывается из сигналов продукта координирования Pt в ТРy4P по атомам азота и непрореагировавшей платины. Проведены квантово-химические расчёты из первых принципов в рамках теории функционала плотности при помощи программы Gaussian 03 для ТРy4P и Pt-ТРy4P, с их помощью моделированы химические сдвиги основных уровней азота и платины. Результаты моделирования подтверждают сделанные выводы.

старший научный сотрудник Божко Сергей Иванович  
142432, Московская область, Черноголовка, Институтская ул., 2, ИФТТ РАН  
Тел.: (495) 962-80-54; Факс: (496) 524-97-01; E-mail: bozhko@issp.ac.ru