

АКТИВАЦИЯ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ КЛАСТЕРНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ

Д. В. КОРОЛЬКОВ

Санкт-Петербургский государственный университет

ACTIVATION OF SMALL MOLECULES BY CLUSTER COMPLEXES

D. V. KOROL'KOV

Chemical activation of small molecules under its coordination on atoms M of cluster complexes of transition metals is described. High activative ability of these clusters is explained based on the parameters of its geometry and electron structure.

Описано явление химической активации малых молекул при их координации на атомах M в кластерных комплексах переходных металлов. На основе параметров геометрической и электронной структуры объяснена высокая активирующая способность этих кластеров.

В химическом мире есть явление, которое не только интригует естествоиспытателей своей простотой, изяществом, целенаправленностью и тем самым вызывает академический интерес, но и представляет собой подсказку Природы в организации технологических процессов и познании процессов жизнедеятельности. В названии этой статьи фигурируют два весьма важных понятия современной химии. Поэтому, прежде чем перейти к изложению сути заглавного явления, необходимо пояснить, что такое активация молекулы и что такое кластер. Термин же “малые молекулы” очевиден — это молекулы из двух, трех или четырех атомов, каждый из которых содержит небольшое число электронов — CO, N₂, H₂O, HCN, CO₂, C₂H₂.

АКТИВАЦИЯ МОЛЕКУЛ

Активация молекул есть модификация электронно-ядерной структуры молекул, повышающая их реакционную способность. Теория активации молекул выясняет, каким образом меняется электронно-ядерная структура молекулы под воздействием различных факторов и как эти изменения влияют на энергию активации реакции при известном механизме реакции. Активация молекул составляет главное звено в предварительной подготовке молекул к реакции, первый этап химического (и биохимического) превращения.

Активированные молекулы — это молекулы, перенесшие активацию и находящиеся в особых, активированных состояниях, отличных от активированных комплексов реакционной системы. Суммарная энергия связей в активированной молекуле существенно меньше, чем в той же молекуле в свободном основном состоянии. Межъядерные расстояния в активированной молекуле увеличены, и иногда весьма значительно, поэтому динамика движения ядер при активации молекулы очевидна: ядра отдаляются друг от друга, чтобы затем при свершении элементарного акта реакции полностью покинуть друг друга и стать частями новых, конечных молекул. Времена жизни активированных состояний молекул малы, часто значительно меньше

разрешающей способности экспериментальных методов исследования, поэтому важное место занимает теоретическое описание активации молекул.

Активация есть снижение энергетического барьера реакции, вызванное определенным воздействием на молекулы, участвующие в элементарном акте реакции. Способы активации молекул весьма различны, но всегда оказывают такое влияние на электронно-ядерную структуру молекулы, в результате которого молекула перестраивается энергетически наиболее выгодным образом для дальнейшего превращения. Активация молекул происходит при воздействии на реакционную систему электромагнитного излучения или потока частиц — электронов, протонов, нейтронов, атомов, молекул. Но здесь главное внимание уделим активации молекул при их координировании неким координирующим центром (К). Прежде всего подчеркнем, что всякая координация молекулы на каком-либо К, то есть всякое связывание молекулы с ним, непременно сопряжена с определенным воздействием такого К на молекулу. Это воздействие приводит к дестабилизации координированной молекулы (S), уменьшению энергий связей в ней, что всегда подтверждается экспериментальными данными — увеличением межъядерных расстояний, уменьшением частот валентных колебаний координированной молекулы в сравнении с соответственными величинами для той же молекулы в свободном состоянии. Поэтому можно, казалось бы, во всех случаях констатировать активацию S, возрастание ее реакционной способности в указанном выше смысле снижения активационного барьера в элементарном акте ее химического превращения. Но это совсем не так. Далеко не всякая координация приводит к увеличению реакционной способности молекулы — часто наблюдается обратная ситуация. Дело в том, что при координации молекулы ее атомы образуют с К во многих случаях прочные (иногда очень прочные) связи, что обуславливает значительное увеличение активационного барьера в элементарном акте взаимодействия S с каким-либо реагентом. Вот почему весьма часто оказывается, что, несмотря на описанное выше разупрочнение S, ее реакционная способность уменьшается или даже вообще исчезает. Так, карбонильные и цианидные комплексы переходных металлов, комплексы с молекулярным азотом, алкенами, алкинами во многих случаях очень стабильны и неактивны. И есть еще один тонкий момент: реакционная способность одной и той же (и на том же самом центре) координированной молекулы в одних реакциях может возрастать, в других — снижаться по сравнению с реакционной способностью этой молекулы в свободном состоянии. Поэтому рассмотрим общие принципы воздействия К на координируемую молекулу (точнее,

на ее электронную структуру и физические характеристики). Это воздействие в некоторых случаях действительно может быть реальным путем повышения реакционной способности S в конкретных реакциях со строго определенным механизмом. Под активацией же молекулы при ее координации будем подразумевать уменьшение суммарной энергии связей в ней, не полагая при этом, что координированная молекула станет более реакционноспособной в любом случае.

Активация как уменьшение суммарной энергии связей молекулы при ее координировании неким центром является следствием электронных перестроек, происходящих при этом в электронной структуре молекулы. Между молекулой и К возникают орбитальные взаимодействия, как правило с участием граничных, то есть верхних занятых и нижних свободных, молекулярных орбиталей (ВЗМО, НСМО). Эти взаимодействия по своему характеру являются электронодонорными и электроноакцепторными. Электронные эффекты при координации базируются на переносе электронного заряда от молекулы к К и в противоположном направлении в зависимости от характеристик взаимодействующих орбиталей. Очевидно следующее утверждение: уменьшение суммарной энергии связей в молекуле и, стало быть, активация молекулы при ее координировании на К усиливаются по мере того, как уменьшается электронная заселенность ее занятых связывающих МО в ходе переноса электронного заряда с этих МО на орбитали К и одновременно увеличивается заселенность вакантных (в изолированной молекуле) разрыхляющих МО в ходе переноса электронного заряда на эти МО с орбиталей К. Эти противоположные по направлению электронные переносы взаимно облегчают друг друга (синергический эффект) и, главное, ограничивают или просто не допускают появления больших, нереалистичных электростатических зарядов на атомах, составляющих взаимодействующие молекулярные системы, в полном соответствии с известным принципом электронейтральности Полинга. Вместе с тем в тех случаях, когда координирующим центром является атом М переходного металла (на поверхности или в комплексе), преимущественным процессом является электронный перенос от К к S. Это следует из строгого описания электронных донорно-акцепторных взаимодействий между центром и координированной малой молекулой в рамках валентного приближения теории МО и теории возмущений, что позволяет сопоставить вклады во взаимодействие К—S за счет связывающих заселенных и разрыхляющих вакантных граничных МО молекулы S и выяснить характер происходящего при этом перераспределения валентной электронной плотности [1].

В общем виде происходящее при координации молекулы перераспределение валентной электронной плотности ($K \rightarrow S$ или $K \leftarrow S$) определяется, конечно, несколькими факторами. Один из главных – формальная валентность координирующего атома. В комплексах формально нуль-валентных металлов $[Co_2(CO)_8]$ превалирует, как правило, перераспределение типа $K \rightarrow S$. При увеличении степени окисления M и сопутствующем возрастании его акцепторных свойств $[Fe_2(CO)_6Br_2]$ преобладать может перераспределение типа $K \leftarrow S$. К тому же для реального и направленного увеличения реакционной способности S нужны разные переносы электронного заряда. Так, для активации координированной молекулы CO в реакции ее взаимодействия с электрофилом важен перенос $K \rightarrow S$, а для активации координированного алкена или алкина в реакции его взаимодействия с нуклеофилом важнее перенос $K \leftarrow S$, увеличивающий электрофильность алкена или алкина.

Итак, электронные эффекты донорно-акцепторных взаимодействий (одно-, двух- и даже многоэлектронные переносы) между активатором K и координированной на нем молекулой S есть решающий фактор активации S . Активация малой молекулы, координированной атомами M переходных металлов, обусловлена главным образом переносом электронов от активатора на вакантные разрыхляющие МО координированной молекулы, то есть заселением валентными электронами ее ранее вакантных разрыхляющих МО. Отсюда следует простой и полезный вывод: в активации малых молекул при участии переходных металлов или их комплексов наиболее благоприятными электронными (чаще всего π -типа) факторами являются предпочтительная акцепторная способность активируемой молекулы S и донорная способность координирующего центра K .

Для того чтобы придать всему изложенному достаточную наглядность, рассмотрим кратко взаимодействие молекулы CO (классический пример) с атомом M переходного металла безотносительно к тому, свободный ли это атом, или атом M в комплексе: моноядерном, полиядерном, кластерном, или, наконец, атом M на поверхности металлического кристалла или твердогo соединения (например, оксида).

Граничными молекулярными орбиталями в электронной структуре молекулы CO являются заселенная двумя электронами связывающая ВЗМО 5σ и вакантная разрыхляющая НСМО $2\pi^*$ (рис. 1; для простоты не показаны более низкие по энергии четыре МО 1σ , 2σ , 3σ и 4σ , заселенные двумя электронами каждая, из которых первые две – это электроны гелиевых оболочек атомов O и C , а две другие образованы в основном при участии низколежащих по энергии валентных $2s$ -орбиталей атомов O и C). Есть еще две валентные МО: дважды

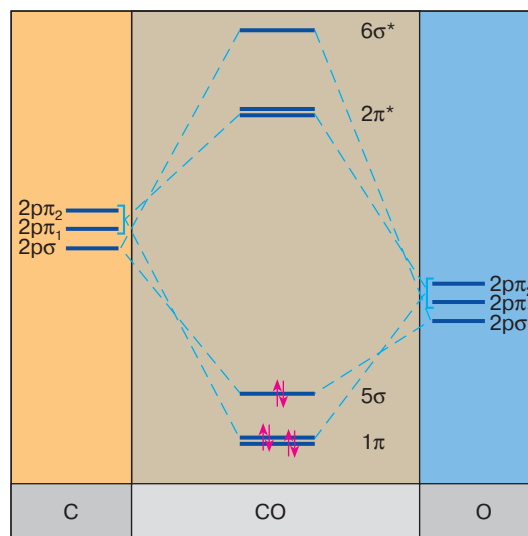


Рис. 1. Граничные молекулярные орбитали в электронной структуре молекулы CO

вырожденная, заселенная четырьмя электронами связывающая 1π и вакантная сильно разрыхляющая (с очень высокой энергией) $6\sigma^*$, но их роль в активации молекулы CO значительно меньше. Эта простая схема иллюстрирует тройную ($\sigma + 2\pi$) шестиэлектронную связь $C\equiv O$ с большой энергией (256 ккал) и малым межъядерным расстоянием (1,12 Å). При взаимодействии молекулы CO с атомом M (при перекрывании их валентных орбиталей) происходит перенос определенной доли электронного заряда со связывающей МО 5σ (CO) на вакантные σ -орбитали атома M и одновременно с занятых π -орбиталей атома M на вакантную разрыхляющую МО $2\pi^*$ (CO). Понижение электронной заселенности связывающей МО и одновременное повышение электронной заселенности разрыхляющей МО молекулы CO при ее координации на атоме M приводят безусловно к резкому уменьшению энергии связи $C-O$ (уменьшению ее кратности) и увеличению межъядерного расстояния $C-O$ (“раздвижению” ядер) по сравнению со свободной молекулой CO . Молекула CO активируется.

КЛАСТЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Английское слово “cluster” означает рой, гроздь, скопление. В научной литературе термин “кластер” используют столь широко и многообразие кластеров столь велико, что необходимо четко указать, какие же именно кластеры имеются в виду в статье. Здесь имеются в виду только кластерные комплексы, составленные из нескольких (в принципе не менее двух) атомов пере-

ходных металлов M и определенного числа связанных с ними лигандов L (хотя существуют и безлигандные кластеры, но они метастабильны). В роли лигандов могут выступать самые разнообразные одно-, двух- и многоатомные ионы и нейтральные молекулы. Общепринятая символика обсуждаемых кластерных комплексов переходных металлов весьма лаконична – M_nL_m . Различают малые кластеры с $n = 2-12$, для них характерно $n/m < 1$, средние кластеры с $n = 13-50$ и $n/m \cong 1$, большие кластеры с $n = 50-150$ и $n/m > 1$. Известны и гигантские кластеры с $n = 10^2-10^3$ и $n/m \gg 1$.

Ниже речь пойдет в основном о малых кластерах и главным образом тяжелых (4d, 5d) металлов. Классическими примерами являются двуядерные $[Mo_2(\mu_2-OH)_2]^{4+}$, $[Re_2Cl_8]^{2-}$, $[W_2Cl_9]^{3-}$, $Co_2(CO)_8$, трехядерные $Os_3(CO)_{12}$, $[Re_3Cl_{12}]^{3-}$, $Pt_3(\mu_2-CO)_3(PR_3)_4$, четырехядерные $Ir_4(CO)_{12}$, $Rh_4(CO)_4(\mu_4-PPh)_2$, $[Re_4Cl_{16}]^{4-}$, $Ru_4(\mu_4-H)_4(CO)_{10}(PPh_3)_2$, шестиядерные $[Mo_6Cl_8]^{4+}$, $[Nb_6Cl_{12}]^{4+}$, $[Ta_6Cl_{12}]^{2+}$, $Rh_6(CO)_{16}$, и один из них – шестиядерный кластер осмия представлен на рис. 2.

Что же отличает кластерные комплексы переходных металлов от обычных, моноядерных комплексов? Прежде всего то, что кластерные комплексы являются полиядерными, то есть содержат не один, а несколько (иногда очень много) атомов M . Эти атомы составляют центральную часть – металлическое ядро – кластера,

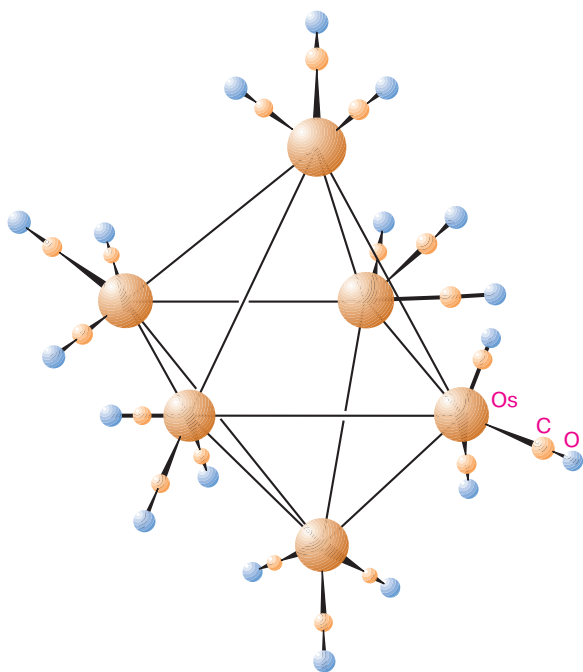


Рис. 2. Шестиядерный октаэдрический карбонильный кластер осмия $Os_6(CO)_{18}$

его M_n -группу, имеющую характеристичную геометрическую структуру. Но главное заключается в том, что в M_n -группе кластера атомы M существуют не обособленно друг от друга. Напротив, между атомами M образуются непосредственные связи. Это проясняет суть химической ниши, занимаемой кластерными комплексами переходных металлов в единой системе координационных соединений. Кластерные связи $M-M$ характеризуются короткими межъядерными расстояниями (нередко меньшими, чем в соответствующем металлическом кристалле), обладают высокими энергиями, часто имеют повышенную (вплоть до двойной, тройной) кратность. Вокруг кластерной M_n -группы располагаются связанные с атомами M лиганды, опять-таки геометрически строго определенным образом, формируя тем самым “лигандную корону” кластера с присущей ей конкретной структурой.

В теории канонических делокализованных молекулярных орбиталей электронная структура кластерных комплексов переходных металлов и ее главные параметры – энергетические и пространственные характеристики валентной электронной плотности – имеют строгое и вместе с тем весьма несложное описание [2]. В M_n -группе каждого кластера M_nL_m строго определенное (характеристичное) число валентных электронов делокализовано по валентным МО связей $M-M$. Эти МО образуются в основном при взаимодействии валентных $(n-1)d$ -орбиталей атомов M , без значительного вклада их ns - и np -орбиталей. Электроны связей $M-M$ делокализованы по связывающим валентным молекулярным орбиталям, число и характер которых регламентированы числом атомов M в M_n -группе, ее геометрией, числом и типом координированных лигандов, симметрией кластера M_nL_m . Главное – эти связывающие МО ($M-M$) являются самыми верхними по энергии занятыми молекулярными орбитальными в единой электронной структуре кластера M_nL_m (рис. 3). Соответствующие разрыхляющие МО ($M-M^*$) в большинстве случаев вакантны и являются самыми нижними по энергии свободными МО. Вклад орбиталей лигандов в МО взаимодействий $M-M$ невелик, и связи $M-M$ в M_n -группе существенно обособлены от связей $M-L$ в единой электронной структуре кластера M_nL_m . В отношении пространственных характеристик валентной электронной плотности в кластерах важно то, что МО взаимодействий $M-M$ (как заселенные связывающие, так и вакантные разрыхляющие) являются в основном d -электронными и потому обладают многообразной симметрией пространственного распределения зарядовой плотности.

В представлении эквивалентных локализованных орбиталей кластерные связи $M-M$ можно рассматривать как ковалентные двух-, трехцентровые σ -, π -, δ -связи,

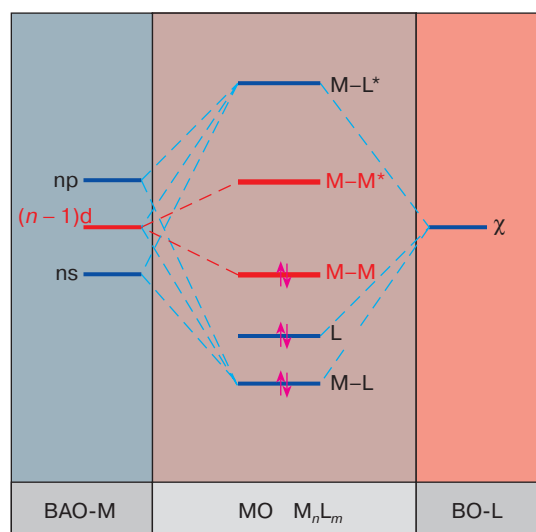


Рис. 3. Схематическая диаграмма валентных молекулярных орбиталей типичного кластера M_nL_m переходного металла; BAO-M и BO-L – валентные орбитали атомов M и лигандов соответственно

которые последовательно (при наличии соответствующего числа валентных $(n - 1)d$ -электронов у каждого атома M) образуются вплоть до высокочастотных многоэлектронных двухцентровых взаимодействий с высокой энергией E_{M-M} и короткими межъядерными расстояниями R_{M-M} .

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ С АТОМАМИ M В КЛАСТЕРАХ

На основе изложенного перейдем к главной теме статьи. Особенности (в указанном выше смысле) энергии валентных электронов или энергии заселенных ими молекулярных орбиталей, энергии вакантных МО, пространственные характеристики распределения зарядовой плотности валентных электронов в кластерных комплексах переходных металлов определяют высокую способность этих комплексов активировать координирующиеся на них молекулы. Активация молекулы при ее координировании кластерными комплексами значительно больше, чем соответствующими (тот же переходный металл в том же состоянии окисления, те же лиганды) моноядерными комплексами. Это так называемый кластерный эффект.

Активация молекулы S при ее координировании кластером происходит, как правило, при переносе электронной плотности с занятых (часто связывающих) молекулярных орбиталей кластера (точнее, его M_n -группы) на незаселенные разрыхляющие орбитали молекулы S. Другими словами, для активации молекулы S предпочтительны такие орбитальные переносы зарядов, ко-

торые отвечают накачке электронной плотности на разрыхляющие МО координированной молекулы S с M_n -группы. Далее активация мало зависит от индивидуальности переходного металла, атомы которого образуют кластер, усиливается (ослабевает) при включении в кластер M_nL_m лигандов с меньшими (большими), чем у координированной молекулы S, π -акцепторными свойствами, то есть с меньшей (большей), чем у координированной молекулы S, способностью акцептировать π -электроны. Для активации координируемых молекул наиболее перспективны стереохимически открытые кластеры, характеризующиеся отсутствием одного или нескольких атомов M в идеальном M_n -полиэдре или его сильным пространственным искажением, а также отсутствием одного или нескольких лигандов в координационной сфере того или иного кластерного атома M или сильным пространственным искажением координационной сферы. Для стереохимически открытых кластеров весьма значительна анизотропия (мера несферического искажения) распределения валентной электронной плотности в пространстве того или иного атома M.

Наибольшее влияние на активацию оказывают способы координации молекулы S на M_n -группе: концевая или μ_2 -, μ_3 -, μ_4 -мостиковые (в возрастающей последовательности) и более сложные варианты, когда двухатомная молекула (или двухатомный фрагмент многоатомной молекулы) координируется M_n -группой таким образом, что связанными с несколькими кластерными атомами M оказываются не только оба составляющих ее атома, но и зарядовая плотность связи в координированной молекуле, например тройной ($\sigma + 2\pi$)-связи $C\equiv O$ в молекуле CO. Так, одна из самых эффективных активаций наблюдается при координации молекулы CO “плашмя” на треугольной Nb_3 -группе в составе трехъядерного кластера $Nb_3(\pi-C_5H_5)_3(CO)_7$, где молекула CO координирована таким образом, что атом C находится над центром треугольной Nb_3 -группы, а область связи C–O – над серединой одного из ребер Nb–Nb (рис. 4). Экспериментальные данные показывают, что здесь происходит сильнейшая активация молекулы CO, поскольку частота валентных колебаний C–O уменьшается (по сравнению со стандартным значением 2170 см^{-1}) до аномально малого значения 1330 см^{-1} , силовая постоянная связи C–O падает почти втрое – от 19 до 7 мдин/А. Об этом же свидетельствуют и результаты расчетов, проведенных методами вибронной теории [3]: со связывающей 5σ -орбитали молекулы CO на Nb_3 -группу переносятся практически оба электрона (σ -связь исчезает), с Nb_3 -группы на разрыхляющую $2\pi^*$ -орбиталь молекулы CO переносятся 1,8 электрона (почти исчезает одна из двух π -связей), тем самым кратность связи C–O уменьшается почти

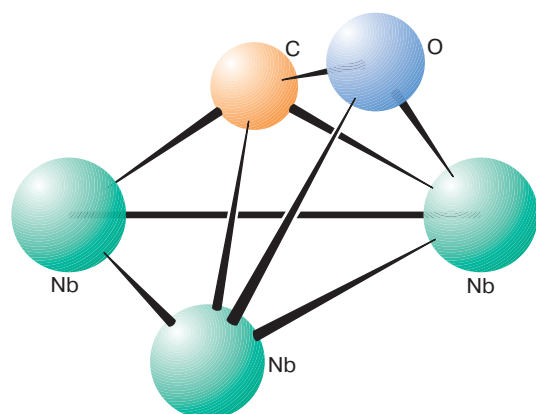


Рис. 4. Структура центрального фрагмента кластера $Nb_3(\pi-C_5H_5)_3(CO)_7$ с μ_3 -CO-группой

втрое (от тройной до практически одинарной), энергия связи уменьшается в 5–6 раз, резко возрастает межъядерное расстояние С–О. Ясно, что молекула СО претерпевает при этом столь сильную дестабилизацию, что можно говорить о ее разрушении на два слабосвязанных друг с другом атома (С и О). Как показывают результаты теоретических расчетов, здесь реализуется тот редкий случай, когда аномально высокая активация координированной молекулы обусловлена изменением электронных заселенностей не только ее граничных (одной ВЗМО и одной НСМО) орбиталей, но и небольшим уменьшением электронной заселенности также и второй занятой связывающей ($1\pi^4$) орбитали: с этой МО небольшая доля электронного заряда переносится на Nb_3 -группу, что дополнительно уменьшает кратность и энергию связи С–О и еще больше усиливает дестабилизацию координированной молекулы СО. Но при этом одновременно атомы С и О образуют с кластерными атомами Nb весьма прочные связи, и поэтому здесь мы сталкиваемся с тем самым случаем, когда очень сильная дестабилизация координированной молекулы не выражается в увеличении ее реакционной способности: эта СО-группа кластера $Nb_3(\pi-C_5H_5)_3(CO)_7$ не вступает во взаимодействие с H_2 и некоторыми другими реагентами.

Квантово-химические расчеты электронной структуры модельного комплекса $[Mo_2Cl_8(N_2)]^{3-}$ в спироформе (рис. 5) показывают [4], что при координации молекулы азота на стереохимически открытом кластере $[Mo_2Cl_8]^{3-}$ в нелинейной геометрии происходит весьма значительная дестабилизация N_2 из-за эффективной накачки электронной плотности высокочастотной связи М–М кластера на разрыхляющие π^* -МО N_2 при одновременном уменьшении электронной заселен-

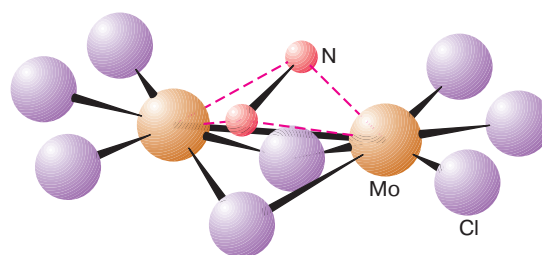


Рис. 5. Структура модельного комплекса $[Mo_2Cl_8(N_2)]^{3-}$

ности и кратности связи М–М и возникновении σ -взаимодействий М–N.

Напротив, в комплексе $[(P_4Cl)Re(N_2)Mo(OC_4)]$ с линейной группировкой Re–N–N–Mo дестабилизация N_2 существенно меньше. Об этом же свидетельствуют результаты расчетов поверхностей потенциальной энергии (а это много более показательное свидетельство) взаимодействия молекулы N_2 с двухядерным фрагментом Mo_2 для различных линейных и нелинейных геометрических конфигураций.

Характер и степень активации молекулы, координированной на кластерном комплексе, можно регулировать, и к тому же весьма тонко регулировать, в широких пределах, целенаправленно изменяя природу переходного металла, число и валентность его атомов в кластере, а также тип связанных с ними лигандов. В принципе возможно предопределять направление последующего химического превращения координированной молекулы и скорость ее взаимодействия с заданным реагентом.

Важным свойством кластерных комплексов, основанным на наличии у них нескольких координирующих М-центров (в M_n -группе), является их способность к одновременной координации и активации как молекулы-субстрата (S), так и молекулы-реагента (R) с последующим взаимодействием между этими молекулами в координационной сфере кластерного комплекса.

Активация координированной кластером молекулы в некоторых случаях непосредственно ведет к кластерному катализу. Каталитическая способность кластерных комплексов переходных металлов особенно ярко проявляется в случае окислительно-восстановительных реакций, и прежде всего в отношении протекающих с переносом электронов реакций редокс-расщепления малых молекул с особо прочными высокочастотными связями N_2 , CO, NO, N_3^- , NO^+ , RNC, CN^- , RN_2^- , $RC\equiv CR$ и др. Активация этих кратных связей (например, при их двух- или многоэлектронном восстановлении) происходит в зависимости от индивидуальности кластерных комплексов (числа, природы и формальной валентности атомов М в M_n -группе типа лигандов), от

геометрической структуры и электронного строения кластерных комплексов, от типа координации активируемой молекулы с M_n -группой и других факторов.

Еще большей способностью активировать координирующиеся молекулы и тем самым катализировать соответствующие реакции обладают кластеры в электронно-возбужденном состоянии (ЭВС). Кластер в ЭВС обладает усиленными электронодонорными (за счет появления электронов на молекулярных орбиталях с повышенными энергиями) и электроноакцепторными (за счет появления вакансий на МО с пониженными энергиями) свойствами. Все это способствует усилению соответственных электронных переносов в комплексе KS, необходимых для дестабилизации молекулы S, координированной с M_n -группой кластера.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Shustorovich E.M.* // J. Phys. Chem. 1983. Vol. 87(1). P. 14–19.
2. *Корольков Д.В.* // Координац. химия. 1995. Т. 21(8). С. 595–611.
3. *Свитин А.П., Будников С.С., Берсукер И.Б., Корольков Д.В.* // Вестн. ЛГУ. Физика, химия. 1983. № 4. С. 76–82.
4. *Щукарев А.В., Корольков Д.В.* // Там же. 1982. № 16. С. 40–47

Рецензенты статьи О.Н. Темкин, Н.Ф. Степанов

* * *

Дмитрий Васильевич Корольков, доктор химических наук, профессор, декан химического факультета Санкт-Петербургского государственного университета, академик Международной академии наук высшей школы, действительный член Российской академии естественных наук. Область научных интересов – теоретическая химия, химия и физика кластеров, координационная химия, электронное строение химических соединений, общая теория химической связи. Автор 200 публикаций, в том числе 11 книг.