

Тема работы

Квантово-химическое моделирование процессов образования тонких пленок благородных металлов

Состав коллектива

- Ковалева Евгения Андреевна, Сибирский федеральный университет, к.ф.-м.н., PhD SibFU
- Кузубов Александр Александрович, Сибирский федеральный университет, к.ф.-м.н.
- Басова Тамара Валерьевна, Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, д.х.н.
- Морозова Наталья Борисовна, Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, д.х.н.
- Викулова Евгения Сергеевна, Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, к.х.н.

Источники финансирования

ФЦП Разработка прототипа технологических решений нанесения биологически совместимых наноструктурированных покрытий с заданными свойствами на основе металлов платиновой группы на материалы, применяемые при создании изделий и устройств медицинского назначения (Соглашение № 14.604.21.0080 от 30 июня 2014 г., универсальный идентификатор ПНИ RFMEFI60414X0080), руководитель Морозова Наталья Борисовна, 2014-2016 гг.

Научное содержание работы

Постановка задачи: моделирование процессов разложения прекурсоров тонких пленок благородных металлов в газовой фазе и в форме адсорбата, расчет энергий активации и констант скорости для данных процессов. Исследование влияния подложки (поверхности железа, кремния, титана с различной кристаллографической ориентацией) на потенциальные барьеры разложения металл-органических соединений.

Современное состояние проблемы: MOCVD является перспективным методом получения покрытий на основе благородных металлов. Суть метода заключается в том, что соединения целевого состава в виде паров летучих металл-органических соединений транспортируют в реактор, где на подложке происходит разложение паров и образование пленки требуемого состава. Одной из ключевых стадий процесса является именно последняя стадия, поскольку механизм разложения паров прекурсора определяет температуру осаждения и фазовый и примесный состав. Также, исходя из знаний о механизме разложения паров прекурсора, можно сделать вывод о необходимости ввода газа-реагента и его типе. Исследование данной стадии экспериментальными методами зачастую затруднено ввиду отсутствия прямых методов, позволяющих получать информацию о механизме реакции. В связи с этим актуально проведение квантово-химических исследований в этой области.

1. Vasilyev V. Y. et al. Chemical vapour deposition of Ir-based coatings: chemistry, processes and applications //RSC Advances. – 2015. – Т. 5. – №. 41. – С. 32034-32063.

2. Gelfond N. V. et al. Preparation of thin films of platinum group metals by pulsed MOCVD. I. Deposition of Ir layers //Journal of Structural Chemistry. – 2012. – Т. 53. – №. 4. – С. 715-724.

3. Dorovskikh S. I. et al. MOCVD growth of Pt films using a novel Pt (IV) compound as a precursor //physica status solidi (c). – 2015. – Т. 12. – №. 7. – С. 1053-1059.

Полученные результаты:

На начальном этапе работы проведена оптимизация геометрии комплексного соединения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP, базисных наборов def2-SVP, def2-SVP/J и эффективных потенциалов остова (ECP). Вычисления производились в программном пакете ORCA [1].

Критериями остановки процедуры оптимизации служили разница по энергии между итерациями менее 10^{-4} эВ и значение среднеквадратичного градиента энергии менее $5 \cdot 10^{-3}$ эВ/Å.

Геометрические параметры полученной геометрии достаточно хорошо согласуются с имеющимися кристаллографическими данными [2] (таблица 1).

После этого для полученной структуры были рассчитаны ИК и КР-спектры, хорошо воспроизводящие экспериментальные данные (рисунок 1). Все колебания системы проявляются как в ИК, так и в КР-спектрах. Полосы в области $3000-3100 \text{ см}^{-1}$ соответствуют валентным колебаниям связей С-Н ацетилацетонатной группы, $2000-2060 \text{ см}^{-1}$ – валентным колебаниям связи С-О карбонильных групп, 1550 и 1430 см^{-1} – симметричному и антисимметричному валентному колебанию связи С-О ацетилацетонатной группы, $1335-1410 \text{ см}^{-1}$ и $1000-1015 \text{ см}^{-1}$ – деформационным колебаниям метильных групп, $500-520 \text{ см}^{-1}$ – валентным колебаниям связей Ir-C, и, наконец, $220-270 \text{ см}^{-1}$ – валентным колебаниям связей Ir-O. Наличие в экспериментальном спектре ИК слабо выраженных пиков в области 2500 см^{-1} связано с присутствием CO_2 в рабочей камере спектрометра.

Анализ колебаний соединения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$, а также анализ порядков связи по Майеру позволяют предположить, что на начальном этапе разложения комплекса происходит разрыв одной из связей Ir-O. Такой разрыв можно представить как постепенное увеличение угла Ir-O₁-C от равновесного значения 128° вплоть до 220° , что соответствует увеличению связи Ir-O₂ от 2,07 до 4,36 Å (рисунок 2). При этом на потенциальной кривой не наблюдается перегиба, соответствующего переходному состоянию, зависимость энергии системы от длины связи Ir-O₂ выходит на плато (рисунок 2). Это говорит о возможности существования долгоживущего метастабильного состояния, образование которого является промежуточным этапом разложения комплекса. Расчет переходного состояния определил структуру с углом Ir-O₁-C 219° и длиной связи Ir-O₂ 4,20 Å как геометрию с

наибольшей энергией (рисунок 2). Потенциальный барьер при этом составил 1,97 эВ. Согласно проведенному анализу колебаний, комплексные частоты в колебательных спектрах соединения отсутствуют, что подтверждает стабильность структуры и существование не активированного комплекса, а метастабильного состояния.

С целью исключения других возможных вариантов пути реакции, были рассмотрены также отрыв группы CO (рисунок 3), одновременный разрыв обеих связей Ir-O и отрыв протона -CH- группы. Барьеры разрыва составили при этом 2,99, 5,06 и 5,03 эВ, соответственно. Таким образом, описанный выше путь реакции является наименее энергозатратным.

Далее была рассмотрена возможность разрыва связи Ir-O₁ либо отрыва группы C₂H₃O. Барьеры реакции достаточно высоки в обоих случаях (2,62 и 2,73 эВ, соответственно), что говорит о малой вероятности протекания подобных процессов в газовой фазе.

Поскольку экспериментальное разложение комплекса происходит не в вакууме, а на стенках реактора, сделанных из нержавеющей стали, учет взаимодействия с поверхностью позволит более точно описать этапы процесса. С этой целью была рассчитана адсорбция Ir(acac)(CO)₂ на модельной поверхности Fe(001). Расчет производился с использованием периодических граничных условий для пластины железа, состоящей из 8 атомных слоев, что, согласно предварительным тестам, является достаточным для корректного описания материала. С целью расположения молекул комплекса на расстоянии друг от друга, в расчетах была использована суперячейка размером 5×5 элементарных ячеек поверхности Fe(001), что соответствует расстоянию между соседними молекулами комплекса ~7,68 Å. Во избежание взаимного влияния соседних образов по нормали к поверхности был задан вакуумный промежуток ~10 Å. Все расчеты на поверхности Fe(001) производились в программном пакете OpenMX с использованием функционала GGA-PBE [3,4], псевдоатомных орбиталей и сохраняющих норму псевдопотенциалов Вандербиля [5].

Оптимизация геометрии велась до значения максимальных сил, действующих на атомы, менее 0,01 эВ/Å. Обратное пространство в первой зоне Бриллюэна разбивалось по схеме Монхорста-Пака [6] на сетку, содержащую $2 \times 2 \times 1$ k -точек вдоль направлений a, b и c . С целью проверки сопоставимости результатов, полученных разными методами, высота потенциального барьера для разложения в газовой фазе была также рассчитана в программе OpenMX при помощи NEB метода [7,8]. Полученное значение (1,95 эВ) согласуется с ранее полученным при помощи оптимизации переходного состояния в программе ORCA (1,97 эВ).

В процессе оптимизации произошла структурная перестройка комплексного соединения (рисунок 4). Согласно полученным результатам, в процессе адсорбции $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ на поверхности железа происходит заметное увеличение длин связей Ir-O и Ir-C, карбонильные и метильные группы выходят из плоскости комплекса. Таким образом, видно, что разложение комплексного соединения на поверхности железа будет идти принципиально по другому механизму, чем в газовой фазе. С учетом геометрии структуры, адсорбированной на поверхности Fe(001) можно предположить, что на дальнейших этапах будет происходить отрыв карбонильных групп и десорбция газообразных продуктов реакции.

С целью выявления конкретного механизма процесса распада $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$, адсорбированного на поверхности железа, были рассмотрены следующие варианты пути реакции: а) отрыв одной из карбонильных групп с последующей ее адсорбцией на поверхности железа; б) симметричное удаление ацетитилацетонатного фрагмента от атома комплексообразователя с последующим присоединением протона и десорбцией в виде ацетилацетона; и в) несимметричный разрыв одной из связей Ir-O, аналогичный механизму в газовой фазе (Ошибка! Источник ссылки не найден.5). Энергии связи структур рассчитывались как разница между полной энергией соответствующей геометрической конфигурации и суммой полных энергий подложки железа и изолированной молекулы $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$.

Согласно полученным значениям, структура с) является менее энергетически выгодной, чем исходная структура адсорбированного комплекса, что говорит о невыгодности такой структурной перестройки. Выявлено, что, несмотря на то, что вариант б) приводит к полному распаду комплексного соединения, существенно более энергетически выгодным является несимметричный отрыв СО группы. Для нахождения минимального энергетического пути реакции методом NEB [7,8] в качестве начальной и конечной точки были использованы исходный адсорбированный комплекс и вариант б), соответственно. Следует отметить, что для менее энергетически выгодных вариантов а) и с) также наблюдалось несимметричное расположение карбонильных групп.

В ходе расчета минимального энергетического пути реакции было выявлено, что ранее определенная в ходе оптимизации геометрии симметричная структура комплекса $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ является метастабильной, и даже небольшое смещение карбонильных групп относительно друг друга (длины связей Ir-C 2,06 и 2,77 Å, валентные углы Ir-C-O 116,0° и 126,7°) приводит к значительному выделению энергии. Таким образом, на поверхности Fe(001) процесс разложения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ происходит без прохождения через потенциальный барьер, т.е. самопроизвольно. Молекула СО начинает отдаляться от атома комплексообразователя сразу после адсорбции и в дальнейшем перемещается вдоль поверхности, в соответствии с литературными данными [9], десорбируясь при повышении температуры. Данный факт объясняет отсутствие сигнала от молекул СО в масс-спектре при температурах менее 300°C [10].

Далее, согласно ранее предложенному механизму реакции, должна происходить рекомбинация ацетилацетонатного фрагмента с водородом. Тем не менее, миграция большого фрагмента ацетилацетонатной группы по поверхности железа должна быть затруднена в силу стерических причин. Кроме того, ввиду достаточно большой энергии связи с поверхностью ее миграция может сопровождаться частичным разрушением. Более вероятным

представляется вариант, при котором атом водорода отщепляется от одной *асас* группы и затем мигрирует к другой. С целью проверки данной гипотезы была рассчитана энергия отрыва атомов водорода от ацетилацетонатной группы (рисунок б). Она может быть оценена как разница между энергией *асас* фрагмента, адсорбированного на поверхности железа, и суммой энергий дегидрогенизированного фрагмента и изолированного атома водорода, адсорбированного на поверхности железа. Последняя, в свою очередь, рассчитывается как разница энергий пластины железа с адсорбированным атомом водорода и без него.

Согласно имеющимся литературным данным, предпочтительные адсорбционные положения водорода на поверхности железа зависят от степени заполнения поверхности: при большей степени заполнения выгодно расположение атома Н в полости между четырьмя соседними атомами железа (4F), в то время как при меньшем заполнении поверхности более выгодным является мостиковое положение над связью Fe-Fe (2F) [11], которое и было использовано в данных расчетах. Были рассмотрены два различных варианта (рисунок б): а) миграция одного из атомов метильной группы к атому кислорода с образованием водородной связи, сопровождаемая перемещением одного из водородных атомов другой метильной группы вдоль поверхности; и б) одновременный отрыв двух атомов от метильных групп и атома водорода -СН- группы без образования связи с кислородом. Оба варианта оказались более энергетически выгодными по сравнению с исходным *асас* фрагментом (на 0,35 и 5,21 эВ, соответственно). Кроме описанных, возможны также другие пути, приводящие к отрыву атома водорода, рассмотрение которых выходит за рамки данного исследования. Тем не менее, полученные результаты свидетельствуют в пользу предположения о том, что атомы водорода могут мигрировать от одной *асас* к другой и затем десорбироваться в форме ацетилацетона.

В соответствии с результатами проведенного квантово-химического моделирования была составлена уточненная схема механизма реакции термического разложения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ (рисунок 7), включающая следующие стадии:

- 1) адсорбция $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ на поверхности железа;
- 2) отрыв карбонильной группы с последующей миграцией по поверхности подложки;
- 3) отрыв атома водорода от одного *acac* фрагмента и присоединение к другому;
- 4) десорбция ацетилацетона;
- 5) десорбция CO при повышении температуры;
- 6) образование наночастиц иридия на поверхности железа.

Таким образом, в ходе работы были исследованы различные варианты распада комплекса $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ в газовой фазе, рассчитаны энергетические барьеры данных процессов, показано существование долгоживущего метастабильного состояния. В то же время, отсутствие потенциального барьера разложения комплекса на поверхности Fe(001) говорит о том, что взаимодействие с поверхностью стенок реактора играет ключевую роль в процессе термораспада данного соединения. На основании проведенных расчетов предложен уточненный механизм разложения соединения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$.

1. Neese, F. The ORCA program system / F. Neese // Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. – 2012. – Vol. 2, № 1. – P. 73–78.
2. Zherikova, K. V. et al. Crystal structure of (acetylacetonato) (dicarbonyl)iridium(I) / K. V. Zherikova, N. V. Kuratieva, N.B. Morozova // J. Struct. Chem. – 2009. – Vol. 50, № 3. – P. 574–576.
3. Perdew, J.P. et al. Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation / J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, C. Fiolhais // Phys. Rev. B. – 1992. – Vol. 46, № 11. – P. 6671–6687.

4. Perdew, J.P. et al. Erratum: Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation / J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, C. Fiolhais // *Phys. Rev. B.* – 1993. – Vol. 48, № 7. – P. 4978–4978.
5. Morrison, I. et al. Nonlocal Hermitian norm-conserving Vanderbilt pseudopotential / I. Morrison, D.M. Bylander, L. Kleinman // *Phys. Rev. B.* – 1993. – Vol. 47, № 11. – P. 6728–6731.
6. Monkhorst, H.J. et al. Special points for Brillouin-zone integrations / H.J. Monkhorst, J.D. Pack // *Phys. Rev. B.* – 1976. – Vol. 13, № 12. – P. 5188–5192.
7. Henkelman, G. et al. A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths / G. Henkelman, B.P. Uberuaga, H. Jónsson // *J. Chem. Phys.* – 2000. – Vol. 113, № 22. – P. 9901–9904.
8. Henkelman, G. et al. Improved tangent estimate in the nudged elastic band method for finding minimum energy paths and saddle points / G. Henkelman, H. Jónsson // *J. Chem. Phys.* – 2000. – Vol. 113, № 22. – P. 9978–9985.
9. Sorescu, D.C. et al. First-principles calculations of the adsorption, diffusion, and dissociation of a CO molecule on the Fe(100) surface / D.C. Sorescu, D.L. Thompson, M.M. Hurley, C.F. Chabalowski // *Phys. Rev. B.* – 2002. – Vol. 66, № 3. – P. 35416.
10. Gelfond, N. V. et al. Preparation of thin films of platinum group metals by pulsed MOCVD. I. Deposition of Ir layers / N. V. Gelfond, N.B. Morozova, P.P. Semyannikov, S. V. Trubin, I.K. Igumenov, A.K. Gutakovskii, A. V. Latyshev // *J. Struct. Chem.* – 2012. – Vol. 53, № 4. – P. 715–724.
11. Sorescu, D.C. First principles calculations of the adsorption and diffusion of hydrogen on Fe(100) surface and in the bulk / D.C. Sorescu // *Catal. Today.* – 2005. – Vol. 105, № 1. – P. 44–65.

Таблица 1 - Длины и углы связей в оптимизированной структуре

Ir(acac)(CO)₂

Длина связи, Å	Экспериментальные данные [2]	Рассчитанные значения
Ir-O ₁	2,047	2,076
Ir-O ₂	2,043	2,076
Ir-C ₆	1,838	1,865
Ir-C ₇	1,826	1,865
O ₁ -C ₁	1,281	1,293
O ₂ -C ₂	1,280	1,293
C ₁ -C ₄	1,505	1,516
C ₁ -C ₃	1,376	1,413
C ₂ -C ₃	1,388	1,413
C ₂ -C ₅	1,501	1,516
C ₆ -O ₃	1,142	1,164
C ₇ -O ₄	1,153	1,164
Валентный угол	Экспериментальные данные [2]	Рассчитанные значения
O ₁ -Ir-O ₂	89,32	87,69
O ₁ -Ir-C ₆	91,07	90,84
O ₁ -Ir-C ₇	179,62	178,53
O ₂ -Ir-C ₆	179,56	178,51
O ₂ -Ir-C ₇	90,88	90,82
C ₆ -Ir-C ₇	88,72	90,65
O ₃ -C ₆ -Ir	179,9	178,3
O ₄ -C ₇ -Ir	178,0	178,2
C ₁ -O ₁ -Ir	126,1	128,0
C ₂ -O ₂ -Ir	126,6	128,0
C ₁ -C ₃ -C ₂	127,1	125,3
O ₁ -C ₁ -C ₃	125,8	125,5
O ₁ -C ₁ -C ₄	114,1	114,3

$C_3-C_1-C_4$	120,1	120,2
$O_2-C_2-C_3$	125,2	125,5
$O_2-C_2-C_5$	114,8	114,3
$C_3-C_2-C_5$	120,0	120,2

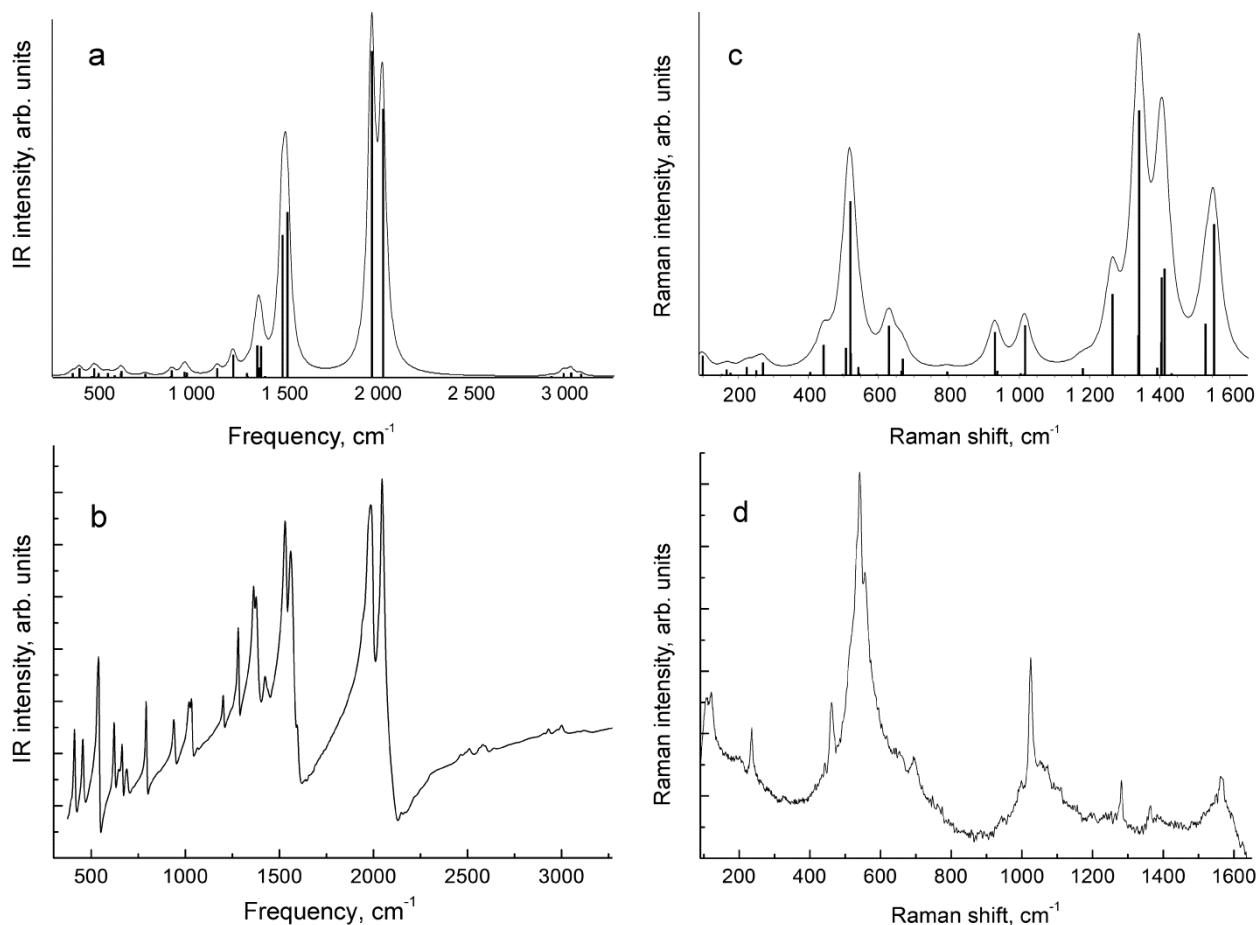


Рисунок 1 - Рассчитанный (a,c) и экспериментальный (b,d) спектры ИК (a,b) и КР (c,d) комплекса $Ir(acac)(CO)_2$

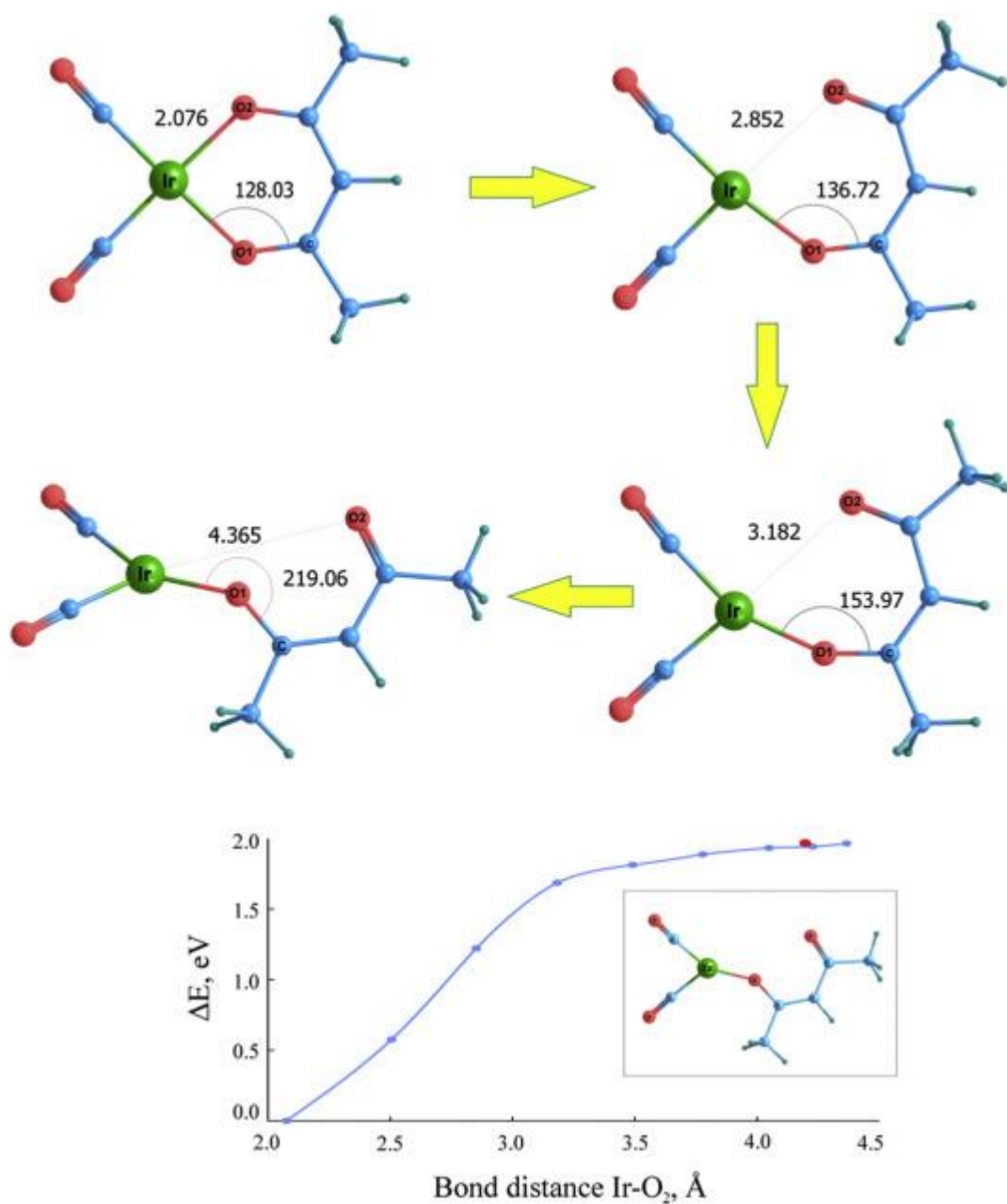


Рисунок 2 - Механизм разложения комплекса $\text{Ir}(\text{acs})(\text{CO})_2$ и соответствующий ему энергетический путь. На вставке внизу представлена структура переходного состояния, соответствующее ей значение энергии обозначено красной точкой.

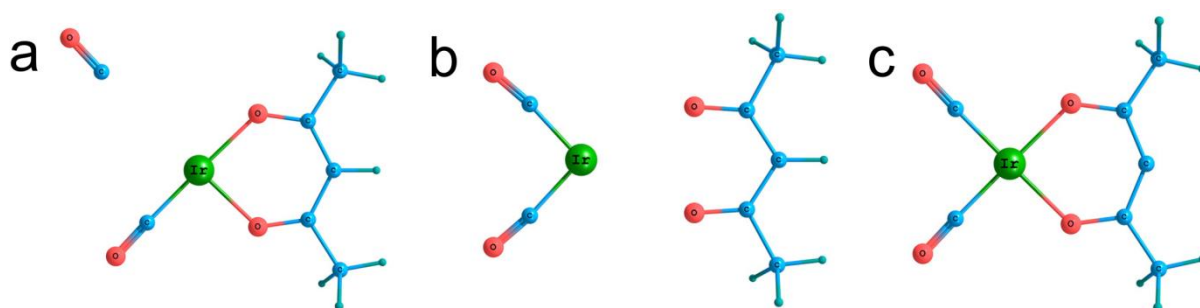


Рисунок 3 - Возможные пути реакции разложения комплекса $\text{Ir}(\text{acs})(\text{CO})_2$

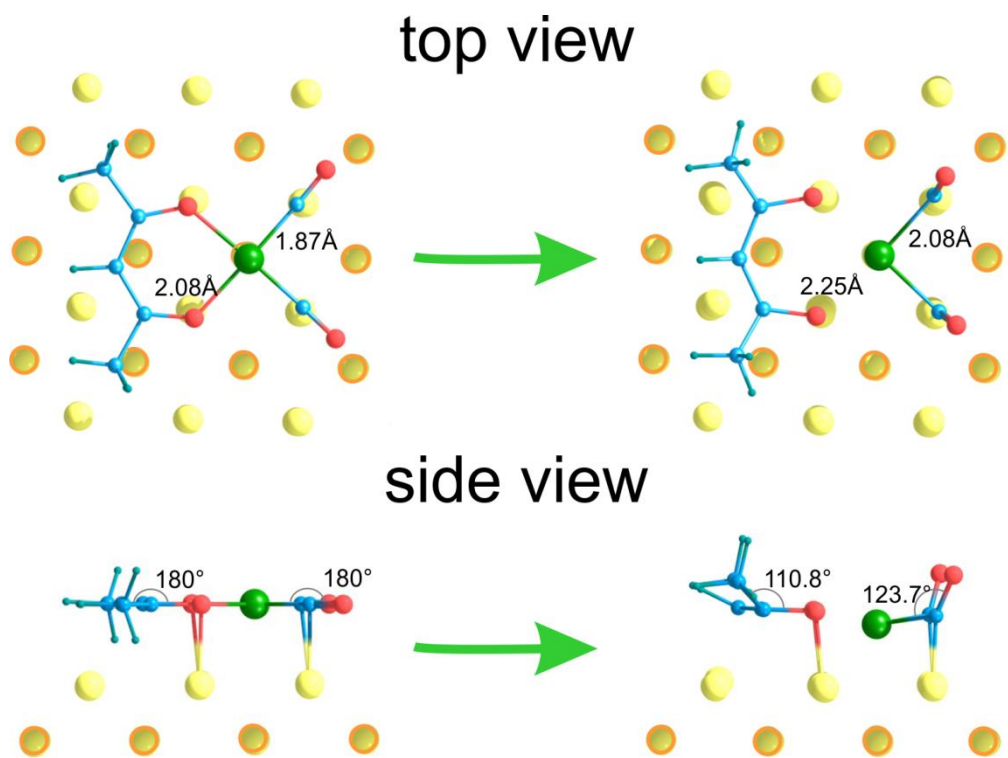


Рисунок 4 - Структурная перестройка комплекса Ir(асас)(CO)₂, адсорбированного на поверхности Fe(001)

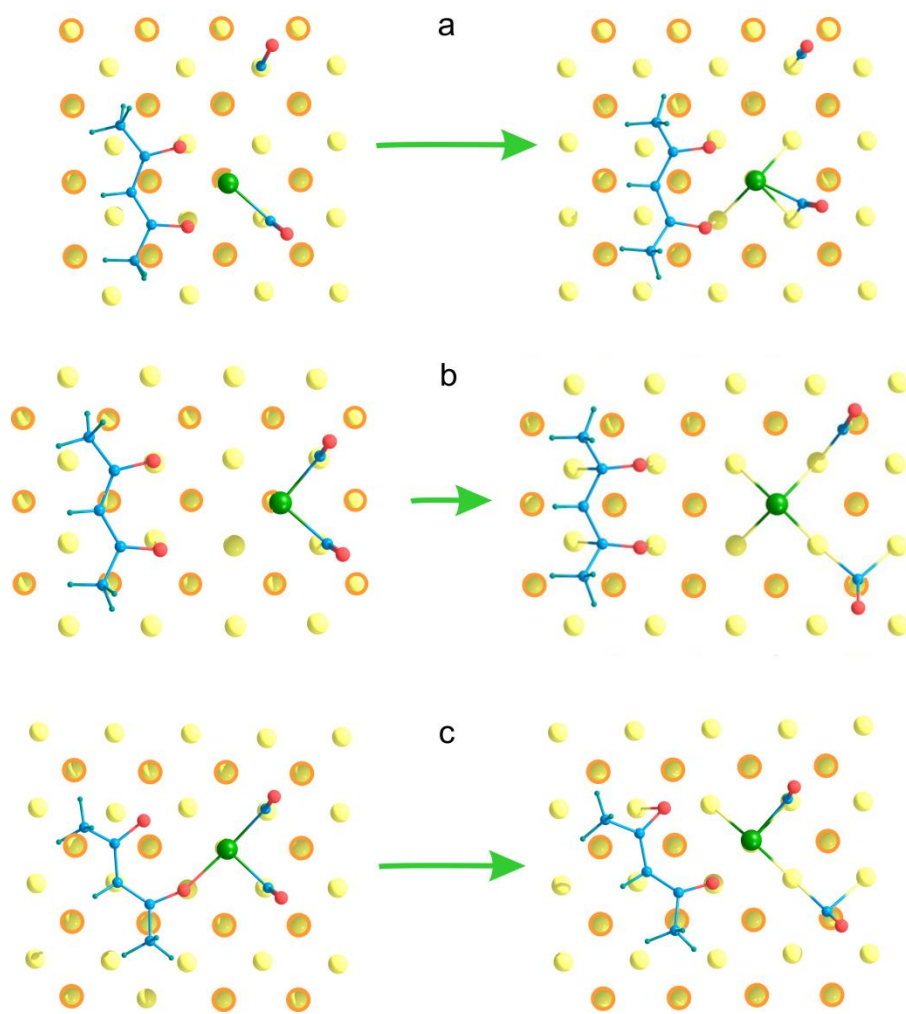


Рисунок 5 - Возможные варианты разложения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ на поверхности $\text{Fe}(001)$

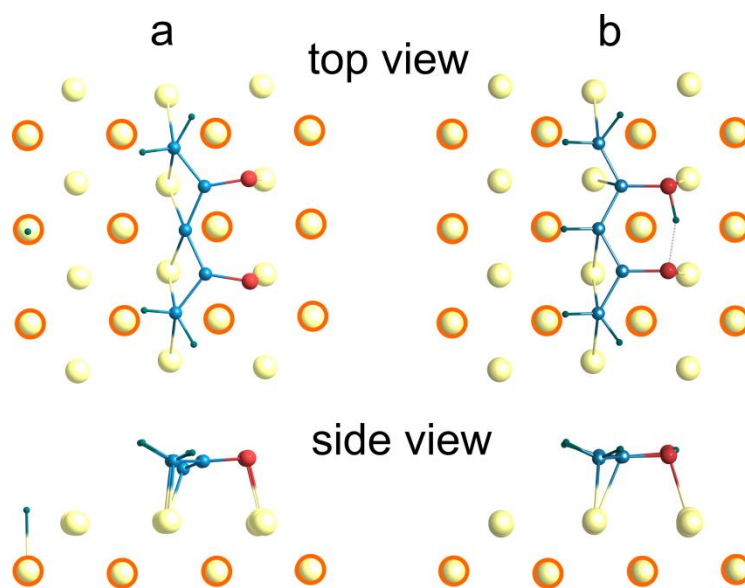


Рисунок 6 - Отрыв водорода от ацетилацетонатной группы

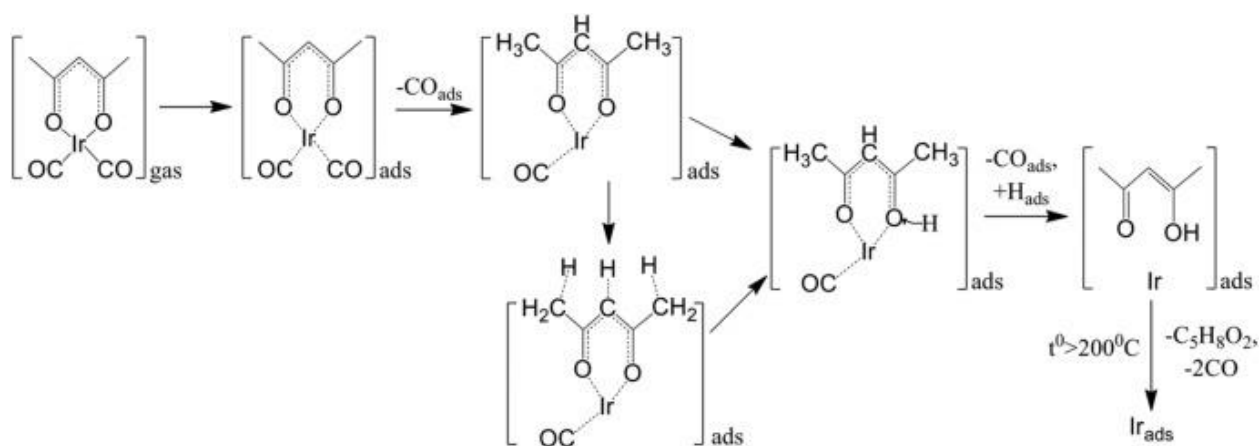


Рисунок 7 - Уточненная схема термического разложения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ на поверхности $\text{Fe}(001)$

Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Вычислительные ресурсы кластера были использованы при выполнении квантово-химических расчетов молекул и интерфейсов в пакетах VASP, OpenMX, Orca.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. Kovaleva, E.A., Kuzubov, A.A., Avramov, P.V., Kuklin, A.V., Mikhaleva, N.S., Krasnov, P.O. Characterization of LSMO/C60 spinterface by first-principle calculations (2016) Organic Electronics: physics, materials, applications, 37, pp. 55-60. Impact Factor: 3.680
2. Kuklin, A.V., Kuzubov, A.A., Kovaleva, E.A., Mikhaleva, N.S., Tomilin, F.N., Lee, H., Avramov, P.V. Two-dimensional hexagonal CrN with promising magnetic and optical properties: A theoretical prediction (2017) Nanoscale, 9 (2), pp. 621-630. Impact factor: 7.233
3. Kuklin, A.V., Kuzubov, A.A., Kovaleva, E.A., Lee, H., Sorokin, P.B., Sakai, S., Entani, S., Naramoto, H., Avramov, P. The direct exchange mechanism of induced spin polarization of low-dimensional π -conjugated carbon- and h-BN fragments at LSMO(001) MnO-terminated interfaces (2017) Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 440, pp. 23-29. Impact Factor: 3.046
4. Krasnov, P.O., Shkaberina, G.S., Kuzubov, A.A., Kovaleva, E.A. Molecular hydrogen sorption capacity of D-shwarzites (2017) Applied Surface Science, 416, pp. 766-771. Impact Factor: 4.439

5. Kovaleva, E.A., Kuzubov, A.A., Avramov, P.V., Kholobina, A.S., Kuklin, A.V., Tomilin, F.N., Sorokin, P.B. A key role of tensile strain and surface termination in formation and properties of La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃ composites with carbon nanotubes (2017) *Computational Materials Science*, 139, pp. 125-131. Impact Factor: 2.530
6. Kovaleva, E.A., Kuzubov, A.A., Vikulova, E.S., Basova, T.V., Morozova, N.B. Mechanism of dicarbonyl(2,4-pentanedionato)iridium(I) decomposition on iron surface and in gas phase: Complex experimental and theoretical study (2017) *Journal of Molecular Structure*, 1146, pp. 677-683. Impact Factor: 2.011
7. Avramov, P., Kuzubov, A.A., Kuklin, A.V., Lee, H., Kovaleva, E.A., Sakai, S., Entani, S., Naramoto, H., Sorokin, P.B. Theoretical investigation of the interfaces and mechanisms of induced spin polarization of 1D narrow zigzag graphene- and h-BN nanoribbons on a SrO-terminated LSMO(001) surface (2017) *Journal of Physical Chemistry A*, 121 (3), pp. 680-689. Impact Factor: 2.836
8. Chepkasov, I.V., Visotin, M.A., Kovaleva, E.A., Manakhov, A.M., Baidyshev, V.S., Popov, Z.I. Stability and Electronic Properties of PtPd Nanoparticles via MD and DFT Calculations (2018) *Journal of Physical Chemistry C*, 122 (31), pp. 18070-18076. Impact Factor: 4.484

Аннотация

В ходе работы был изучен процесс термического разложения комплексного соединения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$. На первом этапе был рассчитан потенциальный барьер для разложения в газовой фазе, который составил 1,97 эВ. Высокая величина потенциального барьера, а также образование метастабильного состояния на пути реакции позволяют сделать вывод о малой вероятности протекания данного процесса без участия подложки.

Поскольку экспериментальное разложение комплекса происходит не в вакууме, а на стенках реактора, сделанных из нержавеющей стали, учет взаимодействия с поверхностью позволит более точно описать этапы процесса. С этой целью была рассчитана адсорбция $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ на модельной поверхности $\text{Fe}(001)$.

В процессе оптимизации произошла значительная структурная перестройка комплексного соединения: в процессе адсорбции $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ на поверхности железа происходит заметное увеличение длин связей Ir-O и Ir-C, карбонильные и метильные группы выходят из плоскости комплекса. Таким образом, разложение комплексного соединения на поверхности железа будет идти принципиально по другому механизму, чем в газовой фазе.

В соответствии с результатами проведенного квантово-химического моделирования была составлена уточненная схема механизма реакции термического разложения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$.