

Redox trends in cyclometalated palladium(II) complexes

Dudkina Y., Kholin K., Gryaznova T., Islamov D., Kataeva O., Rizvanov I., Levitskaya A., Fominykh O., Balakina M., Sinyashin O., Budnikova Y.

Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya 18, Kazan, Russia

Abstract

© The Royal Society of Chemistry. A series of diverse binuclear and mononuclear cyclometalated palladium(ii) complexes of different structure was investigated by electrochemical techniques combined with density functional theory (DFT) calculations. The studies including cyclic and differential pulse voltammetry, X-ray structure analysis and quantum chemical calculations revealed a regularity of the complexes oxidation potential on the metal-metal distance in the complexes: the larger Pd-Pd distance, the higher oxidation potentials. The reduction potentials feature unusually high negative values while no correlation depending on the structure could be observed. These results are in a good agreement with the electron density distribution in the complexes. Additionally, ESR data obtained for the complexes upon oxidation is reported.

<http://dx.doi.org/10.1039/C6DT03786K>

References

- [1] E. Negishi and A. de Meijere, Handbook of Organopalladium Chemistry for Organic Synthesis, 2 Vol. Set, Wiley-VCH, Hoboken, 2002
- [2] X. Chen K. M. Engle D.-H. Wang J.-Q. Yu Angew. Chem., Int. Ed. 2009 48 5094-5115
- [3] A. Jutand Chem. Rev. 2008 108 2300-2347
- [4] D. C. Powers T. Ritter Top. Organomet. Chem. 2011 35 129-156
- [5] J. M. Racowski M. S. Sanford Top. Organomet. Chem. 2011 35 61-84
- [6] S. R. Neufeldt M. S. Sanford Acc. Chem. Res. 2012 45 936-946
- [7] T. W. Lyons M. S. Sanford Chem. Rev. 2010 110 1147-1169
- [8] C. Li T. Yano N. Ishida M. Murakami Angew. Chem., Int. Ed. 2013 52 9801-9804
- [9] Ch.-G. Feng M. Ye K.-J. Xiao S. Li J.-Q. Yu J. Am. Chem. Soc. 2013 135 9322-9325
- [10] Y. Ye N. D. Ball J. W. Kampf M. S. Sanford J. Am. Chem. Soc. 2010 133 14682-14687
- [11] Q. Dang Y. Liu D. K. Cashion S. R. Kasibhatla T. Jiang F. Taplin J. D. Jacintho H. Li Z. Sun Y. Fan J. DaRe F. Tian W. Li T. Gibson R. Lemus P. D. van Poelje S. C. Potter M. D. Erion J. Med. Chem. 2011 54 153-165
- [12] X. Chen D. J. Kopecky J. Mihalic S. Jeffries X. Min J. Heath J. Deignan S. Lai Z. Fu C. Guimaraes S. Shen S. Li S. Johnstone S. Thibault H. Xu M. Cardozo W. Shen N. Walker F. Kayser Z. Wang J. Med. Chem. 2012 55 3837-3851
- [13] P. Kirsch, Modern Fluoroorganic Chemistry: Synthesis, Reactivity, Applications, Wiley-VCH, Weinheim, 2004
- [14] K. Müller C. Faeh F. Diederich Science 2007 317 1881-1886
- [15] D. C. Powers M. A. L. Geibel J. E. M. N. Klein T. Ritter J. Am. Chem. Soc. 2009 131 17050-17051
- [16] M. G. Campbell D. C. Powers J. Raynaud M. J. Graham P. Xie E. Lee T. Ritter Nat. Chem. 2011 3 949-953
- [17] J. E. Bercaw A. C. Durrell H. B. Gray J. C. Green N. Hazari J. A. Labinger J. R. Winkler Inorg. Chem. 2010 49 1801-1810

- [18] Y. B. Dudkina D. Y. Mikhaylov T. V. Gryaznova A. I. Tufatullin O. N. Kataeva D. A. Vicic Y. H. Budnikova *Organometallics* 2013 32 4785-4792
- [19] B. N. Nguyen L. A. Adrio T. Albrecht A. J. P. White M. A. Newton M. Nachtegaal S. J. A. Figueroa K. K. Hii *Dalton Trans.* 2015 44 16586-16591
- [20] A. Ariaifard C. J. T. Hyland A. J. Canty M. Sharma B. F. Yates *Inorg. Chem.* 2011 50 6449-6457
- [21] R. Giri Y. Lan P. Liu K. N. Houk J.-Q. Yu J. *Am. Chem. Soc.* 2012 134 14118-14126
- [22] A. J. Canty A. Ariaifard M. S. Sanford B. F. Yates *Organometallics* 2013 32 544-555
- [23] M. C. Nielsen E. Lyngvi F. Schoenebeck J. *Am. Chem. Soc.* 2013 135 1978-1985
- [24] D. C. Powers E. Lee A. Ariaifard M. S. Sanford B. F. Yates A. J. Canty T. Ritter J. *Am. Chem. Soc.* 2012 134 12002-12009
- [25] B. E. Haines J. F. Berry J.-Q. Yu D. G. Musaev *ACS Catal.* 2016 6 829-839
- [26] A. R. Dick K. L. Hull M. S. Sanford J. *Am. Chem. Soc.* 2004 126 2300-2301
- [27] J. E. Bercaw A. C. Durrell H. B. Gray J. C. Green N. Hazari J. A. Labinger J. R. Winkler *Inorg. Chem.* 2010 49 1801-1810
- [28] D. C. Powers T. Ritter *Nat. Chem.* 2009 1 302-309
- [29] J. L. Serrano L. García J. Pérez E. Pérez J. M. Galiana J. García M. Martínez G. Sánchez I. da Silva *Dalton Trans.* 2011 40 156-168
- [30] N. Marino C. H. Fazen J. D. Blakemore C. D. Incarvito N. Hazari R. P. Doyle *Inorg. Chem.* 2011 50 2507-2520
- [31] T. V. Grayaznova Yu. B. Dudkina D. R. Islamov O. N. Kataeva O. G. Sinyashin D. A. Vicic Yu. H. Budnikova J. *Organomet. Chem.* 2015 785 68-71
- [32] T. Gryaznova Yu. Dudkina M. Khrizanforov O. Sinyashin O. Kataeva Yu. Budnikova J. *Solid State Electrochem.* 2015 19 2665-2672
- [33] T. Pawlak D. Niedzielska J. Vícha R. Marek L. Pazderski J. *Organomet. Chem.* 2014 759 58-66
- [34] G. J. Chuang W. Wang E. Lee T. Ritter J. *Am. Chem. Soc.* 2011 133 1760-1762
- [35] F. A. Cotton J. Gu C. A. Murillo D. J. Timmons J. *Am. Chem. Soc.* 1998 120 13280-13281
- [36] F. A. Cotton M. Matusz R. Poli X. Feng J. *Am. Chem. Soc.* 1988 110 1144-1154
- [37] J. F. Berry F. A. Cotton S. A. Ibragimov C. A. Murillo X. Wang *Inorg. Chem.* 2005 44 6129-6137
- [38] J. F. Berry E. Bill E. Bothe F. A. Cotton N. S. Dalal S. A. Ibragimov N. Kaur C. Y. Liu C. A. Murillo S. Nellutla J. M. North D. Villagrán J. *Am. Chem. Soc.* 2007 129 1393-1401
- [39] C. L. Yao L. P. He J. D. Korp J. L. Bear *Inorg. Chem.* 1988 27 4389-4395
- [40] M. G. Campbell S.-L. Zheng T. Ritter *Inorg. Chem.* 2013 52 13295-13297
- [41] L. M. Mirica J. R. Khusnutdinova *Coord. Chem. Rev.* 2013 257 299-314
- [42] B. R. Patyal B. L. Scott R. D. Willett *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1990 41 1657-1663
- [43] V. I. Krinichnyi *Appl. Phys. Rev.* 2014 1 021305
- [44] C. M. Cardona W. Li A. E. Kaifer D. Stockdale G. C. Bazan *Adv. Mater.* 2011 23 2367-2371
- [45] A. Dadvand F. Cicoira K. Yu. Chernichenko E. S. Balenkova R. M. Osuna F. Rosei V. G. Nenajdenko D. F. Perepichka *Chem. Commun.* 2008 5354-5356
- [46] Y. Liang Z. Xu J. Xia S. T. Tsai Y. Wu G. Li C. Ray L. Yu *Adv. Mater.* 2010 22 E135-E138
- [47] L. J. Huo J. H. Hou S. Q. Zhang H. Y. Chen Y. Yang *Angew. Chem., Int. Ed.* 2010 49 1500-1503
- [48] C. Hsiang-Yu H. Jianhui Z. Shaoqing L. Yongye Y. Guanwen Y. Yang Y. Luping W. Yue L. Gang *Nat. Photonics* 2009 3 649-653
- [49] Y. Liang D. Feng Y. Wu S.-T. Tsai G. Li C. Ray L. Yu J. *Am. Chem. Soc.* 2009 131 7792-7799
- [50] Y. Liang Y. Wu D. Feng S.-T. Tsai H.-J. Son G. Li L. Yu J. *Am. Chem. Soc.* 2009 131 56-57
- [51] C. T. Campos F. E. Jorge *Mol. Phys.* 2013 111 167-173
- [52] C. L. Barros P. J. P. de Oliveira F. E. Jorge A. Canal Neto M. Campos *Mol. Phys.* 2010 108 1965-1972
- [53] F. E. Jorge A. Canal Neto G. G. Camilett S. F. Machado J. *Chem. Phys.* 2009 130 064108
- [54] J. Tomasi B. Mennucci R. Cammi *Chem. Rev.* 2005 105 2999-3093
- [55] W. Ramsay R. Foster *Nature* 1949 163 178-179
- [56] R. E. Ballard *Chem. Phys. Lett.* 1976 42 97-98
- [57] L. L. Miller G. D. Nordblom E. A. Mayeda J. *Org. Chem.* 1972 37 916-918
- [58] W. C. Neikam G. R. Dimeler M. M. Desmond J. *Electrochem. Soc.* 1964 111 1190-1192
- [59] A. J. Bard and L. R. Faulkner, *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*, Wiley, New York, 2001
- [60] R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules: A Quantum theory*, Oxford University Press, New York, 1990

- [61] L. Estévez N. Otero R. A. Mosquera J. Phys. Chem. A 2009 113 11051-11058
- [62] W. Nakanishi S. Hayashi K. Narahara J. Phys. Chem. A 2008 112 13593-13599
- [63] K. Kholin M. Valitov V. Burilov E. Tselischeva S. Strekalova A. Mustafina Yu. Budnikova M. Kadirov Electrochim. Acta 2015 182 212-216
- [64] S. Šoralova M. Breza M. Grof Polyhedron 2011 30 307-314
- [65] E. Derat G. Maestri Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.. 2013 3 529-541
- [66] K. Arumugam U. Becker Minerals 2014 4 345-387
- [67] P. Jaque A. V. Marenich C. J. Cramer D. G. Truhlar J. Phys. Chem. C 2007 111 5783-5799
- [68] M.-H. Baik; R. A. Friesner J. Phys. Chem. A 2002 106 7407-7412
- [69] K. A. Peterson D. Figgen M. Dolg H. Stoll J. Chem. Phys. 2007 126 124101
- [70] D. Figgen K. A. Peterson H. Stoll J. Chem. Phys. 2008 128 034110
- [71] K. A. Peterson J. Chem. Phys. 2003 119 11099-11112
- [72] K. A. Peterson D. Figgen E. Goll H. Stoll M. Dolg J. Chem. Phys. 2003 119 11113-11123
- [73] A. V. Zaitsevskii C. van Wüllen A. V. Titov Russ. Chem. Rev. 2009 78 1173-1181
- [74] M. Iliaš V. Kellö M. Urban Acta Phys. Slovaca 2010 60 259-391
- [75] S. Wilson, Electron correlation in Molecules, Oxford University Press, Oxford, 1984
- [76] EMSL Basis set Exchange, <https://bse.pnl.gov/bse/portal>
- [77] M. Douglas N. M. Kroll Ann. Phys. 1974 82 89-155
- [78] B. A. Hess Phys. Rev. A 1985 32 756-763
- [79] B. A. Hess Phys. Rev. A 1986 33 3742-3748
- [80] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2009
- [81] T. A. Keith, AIMALL, version 09.04.23, TK Gristmill Software, 2009
- [82] Bruker, APEX2 Software Suite for Crystallographic Programs, Bruker AXS, Inc., Madison, WI, USA, 2009
- [83] Bruker, Area detector control and integration software, Version 5.1, In SMART and SAINT, Bruker Analytical X-ray Instruments Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1996
- [84] M. Sheldrick, SADABS. Program for absorption correction, University of Goettingen, Germany, 1996
- [85] G. M. Sheldrick Acta Crystallogr., Sect. A: Fundam. Crystallogr. 2008 64 112-122
- [86] C. F. Macrae P. R. Edgington P. McCabe E. Pidcock G. P. Shields R. Taylor M. Towler J. van de Streek J. Appl. Crystallogr. 2006 39 453-457