البحث الثانى (بحث رقم 5 فى قائمة الأبحاثمحل تقييم اللجنة الموقرة)

Title	Titanium(III) Member of the Family of Trigonal Building Blocks withScorpionate and Cyanide Ligands.
	متراكب التيتانيوم الثلاثى للسيانيد والمركبات العقربية المانحة
Authors	Andrew Brown, **Mohamed Saber**, Willem Van den Heuvel, Kelsey Schulte, Alessandro Soncini,and Kim R. Dunbar
Journal Information	*Inorg. Chem. 2017, 56, 1031−1035*
ISSN	0020-1669
Impact factor	**Q1 - 4.825** (2019)

الملخص العربى

تم تحضيرثلاثة متراكبات لعنصر التيتانيوم ثلاثى التكافؤ [Et4N][Tp*TiCl3] (**1**) ([Et4N] = tetraethylamonium;Tp* = 3,5-dimethyltrispyrazolylhydroborate), اصافة الى اول متراكب ثلاثى التماثل [Tp*TiCl2pz*]pz* (**2**; pz* = 3,5-dimethylpyrazole) يحتوى على سيانيد التيتانيوم [Et4N][Tp*Ti(CN)3] (**3**) . تم توصيف المتراكبات باستخدام القياسات الطيفية (IR, UV)وقياسات حيود اشعة اكس للبللورة الواحدة single crystal Xray measurements والتي توضح وجود بيئة تناسقية ثلاثية التماثل في كافة المتراكبات المحضرة. القياسات المغناطيسية والحسابات الكمومية بينت ان المتراكبات لها رقم مغزلى =1\2 يصاحبه عزم مغناطيسى مستقل عن الحرارة TIP باستخدام النقطة الواحدة حسابات اجراء تم اخاص المغناطيسية للخواص على فهم اكبر للحصول . بيانات قياسات البللورة. التوزيع الالكترونى للتيتانيوم ثلاثى التكافؤ هو d1 وهو ما يؤدى الى خمس حالات مغزلية ثنائية التضاعف تحت تاثير المجال المعطى. تم الحصول على هذه النتائج بناءا على حسابات (CASSCF) يليها حسابات (CASPT2) المغناطيسى للثابت المحسوبة القيم هي ; g values. [Tp TiCl3] : g|| = 1.96, g⊥= 1.71, [Tp Ti(CN)3] : g|| = 1.97, g ⊥= 1.77 وهو ما يتماشى مع القيم المقاسة عمليا ومع حقيقة ان المجال المعطى للسيانيد اقوى. يمثل هذا المركب كوحدة بنائية إضافة جيدة قد تؤدى الى تكوين متراكبات اكبر ذات تباين مغناطيسى اعلى اعتمادا على نوع العنصر المضاف الى طرف ذرة النيتروجين