



# Elektroniese eienskappe van die Mn(asas)<sub>3</sub>-kompleks: 'n Sikliese voltammetrie- en berekeningschemiestudie

## Authors:

Roxanne Freitag<sup>1</sup>  
Jeanet Conradie<sup>1</sup>

## Affiliations:

<sup>1</sup>Department of Chemistry,  
University of the Free State,  
South Africa

## Correspondence to:

Roxanne Freitag

## Email:

roxannefreitag@yahoo.com

## Postal address:

PO Box 339, Bloemfontein  
9300, South Africa

## How to cite this abstract:

Freitag, R. & Conradie, J., 2013, 'Elektroniese eienskappe van die Mn(asas)<sub>3</sub>-kompleks: 'n Sikliese voltammetrie- en berekeningschemiestudie', *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* 32(1), Art. #410, 2 pages. <http://dx.doi.org/10.4102/satnt.v32i1.410>

## Note:

This abstract was presented at the 'Studentesimposium in die Natuurwetenskappe 2011', presented under the protection of the *Suid-Afrikaanse Akademie vir Wetenskap en Kuns*. The symposium was held at the University of South Africa on 27–28 October 2011.

## Copyright:

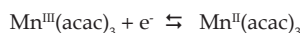
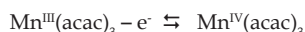
© 2013. The Authors.  
Licensee: AOSIS  
OpenJournals. This work is licensed under the Creative Commons Attribution License.

## Read online:



Scan this QR code with your smart phone or mobile device to read online.

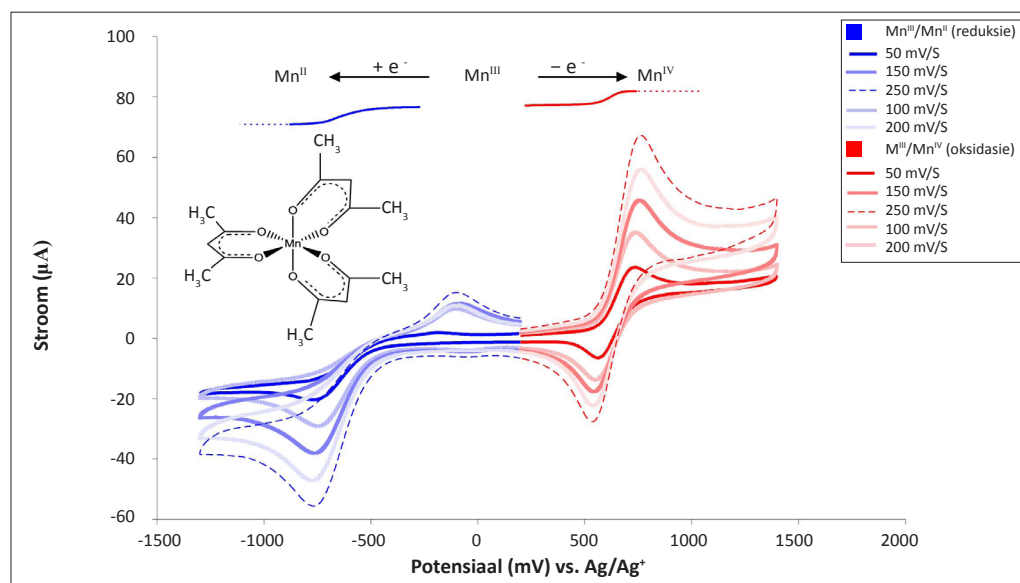
**Electronic properties of Mn(acac)<sub>3</sub> complex: A cyclic voltammetry and computational chemistry study.** Tris(acetylacetonato) Manganese(III) is a catalyst in alkyd paint. In this study, the electronic properties of Mn(acac)<sub>3</sub> are determined by means of electrochemistry and computational chemistry. The optimised geometrical and electronic structure of Mn(acac)<sub>3</sub> is calculated by means of computational chemistry, and electrochemistry is applied to measure the following reactions:



Tris(asetielasetonato)mangaan(III) (Mn[asas]<sub>3</sub>) is 'n katalis wat by die droging van alkydverwe gebruik word. (Van Gorkum *et al.* 2004; Oyman *et al.* 2005) Ten einde 'n katalis ten volle te benut, is dit noodsaaklik om kennis te dra van die elektroniese eienskappe waaroor dit beskik. Hierdie studie is dus daarop gemik om die elektroniese eienskappe van Mn(asas)<sub>3</sub> met behulp van elektrochemie en berekeningschemie (Amsterdamse digtheidsfunksie met OLYP-funksionale) te ondersoek.

Elektrochemiese studies word gebruik om die oksidasievermoë van 'n kompleks te bepaal. Die twee redokskoppelings (M<sup>III</sup>/M<sup>IV</sup> [rooi] en Mn<sup>III</sup>/Mn<sup>II</sup> [blou]) wat tydens sikliese voltammetrie plaasvind, word in Figuur 1 geïllustreer. Die liniêre aftastingsvoltammogramme bo in Figuur 1 toon dat daar tydens die oksidasie (rooi) en reduksie (blou) van Mn<sup>III</sup>(asas)<sub>3</sub> 'n een-tot-een-elektronproses plaasvind.

In die natuur kom alle chemiese samestellings in die laagste moontlike energietoestand voor – daarom kan berekeningschemie gebruik word om die geoptimeerde struktuur, molekulêre orbitale en spintoestande van die Mn(asas)<sub>3</sub>-kompleks te bepaal. Kristalstrukture wat voorheen opgelos is, het getoon dat Mn(asas)<sub>3</sub> die enigste kompleks in die reeks van Cr<sup>III</sup>, Mn<sup>III</sup>, Fe<sup>III</sup> en Co<sup>III</sup> is waarin daar 'n Jahn-Teller-effek voorkom (Geremia & Demitri 2005). Hierdie waarneming word bevestig deur die resultate van die geoptimeerde struktuur, waarby tetragonale strekking in die Mn(asas)<sub>3</sub>-kompleks waargeneem is. Mangaan<sup>III</sup> is 'n d<sup>4</sup>-spesie met 4 elektrone in die d-orbitale, en het dus teoreties drie moontlike spintoestande, naamlik S = 0, 1 of 2. Berekeningschemiese resultate wat ook in vorige publikasies (Diaz-Acosta *et al.* 2003) ondersteun word, toon dat die spintoestand S = 2 van Mn(asas)<sub>3</sub> met 0.327 eV meer stabiel is as die S = 0 of 1. Die hoë



**FIGUUR 1:** Struktuur, liniêre aftastingsvoltammogramme en sikliese voltammogramme van Tris(asetielasetonato)mangaan(III) teen 'n skandeerspoed van 50–250mV/s.



spintoestand van  $\text{Mn}(\text{acac})_3$  met 'n ongepaarde elektron in die hoogste gevulde molekulêre orbitaal met  $d_{22}$ -karakter lei tot die waargenome Jahn-Teller-effek.

## Literatuurverwysings

Van Gorkum, R., Bouwman, E. & Reedijk, J., 2004, 'Fast Autoxidation of Ethyl Linoleate Catalyzed by  $[\text{Mn}(\text{acac})_3]$  and Bipyridine: A Possible Drying Catalyst for Alkyd Paints', *Journal of Inorganic Chemistry* 43(8), 2456–2458. <http://dx.doi.org/10.1021/ic0354217>

Oyman, Z.O., Ming, W., Van der Linde, R., Van Gorkum, R. & Bouwman, E., 2005, 'Effect of  $[\text{Mn}(\text{acac})_3]$  and its combination with 2,2'-bipyridine on the autoxidation and oligomerisation of ethyl linoleate', *Polymer* 46(6), 1731–1738. <http://dx.doi.org/10.1016/j.polymer.2004.12.045>

Geremia S. & Demitri N., 2005, 'Crystallographic Study of Manganese(III) Acetylacetonate: An Advanced Undergraduate Project with Unexpected Challenges', *Journal of Chemistry Education* 82(3), 460–465. <http://dx.doi.org/10.1021/ed082p460>

Diaz-Acosta I., Baker J., Hinton J.F. & Pulay P., 2003, 'Calculated and experimental geometries and infrared spectra of metal tris-acetylacetonates: Vibrational spectroscopy as a probe of molecular structure for ionic complexes: Part II', *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 59(2), 363–377. [http://dx.doi.org/10.1016/S1386-1425\(02\)00166-X](http://dx.doi.org/10.1016/S1386-1425(02)00166-X)