

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВЯЗИ СТРУКТУРА –  
СВОЙСТВА В ОКСИДАХ ХРОМА**

Боженко К.В.<sup>а</sup>, Гуцев Г.Л.<sup>б</sup>, Алдошин С.М.<sup>а</sup>, Гуцев Л.Г.<sup>в</sup>, Утенышев А.Н.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>*Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Московская область, Россия,  
e-mail: bogenko@icp.ac.ru*

<sup>б</sup>*Department of Physics, Florida A&M University, Tallahassee, Florida 32307, USA*

<sup>в</sup>*Department of Chemistry and Biochemistry, Florida State University, Tallahassee 32306, USA*

Объектом исследования являются новые комплексы оксидов хрома. Целью работы являлось определение критериев устойчивости данных комплексов, условия наличия у них ферромагнитных или антиферромагнитных свойств. С целью ответа на данные вопросы выполнены квантово-химические расчеты геометрических и электронных структур кластеров  $\text{Cr}_2\text{O}_n$  и  $\text{Cr}_2\text{O}_n^-$  в рамках метода DFT с потенциалом GGA в диапазоне  $1 \leq n \leq 14$ . Для каждого значения  $n$  рассчитаны наиболее вероятные структуры кластеров со всеми возможными для них значениями спиновой мультиплетности. Затем среди них выбиралась структура с наименьшей полной энергией, которая и считалась основным состоянием кластера для данного значения  $n$ . Таким образом, было рассчитано более 500 структур кластеров  $\text{Cr}_2\text{O}_n$  и  $\text{Cr}_2\text{O}_n^-$ . Показано, что в основном состоянии кластеров  $\text{Cr}_2\text{O}_2$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_4$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_{14}$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3^-$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_4^-$  и  $\text{Cr}_2\text{O}_{14}^-$  атомы Cr имеют довольно большие магнитные моменты и связаны антиферромагнитно. В остальных кластерах, по крайней мере, один из атомов Cr не имеет спинового магнитного момента. Вычисленные вертикальные энергии отрыва электрона  $\text{Cr}_2\text{O}_n^-$  хорошо согласуются с экспериментальными значениями в диапазоне  $1 \leq n \leq 7$ . Все нейтральные  $\text{Cr}_2\text{O}_n$  обладают электронным сродством большим, чем сродство к электрону атомов галогенов при  $n > 6$  и являются, таким образом, супергалогенами. Установлено, что нейтральные кластеры и их анионы устойчивы к отрыву атома O во всем диапазоне рассмотренных  $n$ , и нестабильны к отрыву молекулы  $\text{O}_2$  при  $n > 7$ . Поляризуемость каждого атома резко уменьшается при изменении  $n$  от одного до четырех, и почти не меняется при  $n > 7$  в обеих сериях.

*Работа выполнена по теме Государственного задания № 0089-2014-0026*