

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

Боженко К.В.^а, Гуцев Г.Л.^б, Алдошин С.М.^а, Гуцев Л.Г.^в, Утенышев А.Н.^а

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

^б*Department of Physics, Florida A&M University, Tallahassee, Florida 32307, USA*

^в*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 Cr_2O_n и Cr_2O_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 Cr_2O_n и Cr_2O_n^- . Показано, что в основном состоянии кластеров Cr_2O_2 , Cr_2O_3 , Cr_2O_4 , Cr_2O_{14} , Cr_2O_3^- , Cr_2O_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 Cr_2O_n^- хорошо согласуются с экспериментальными значениями в диапазоне $1 \leq n \leq 7$. Все нейтральные Cr_2O_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 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