Тематический раздел: Физико-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Неорганическая нанохимия. *Регистрационный код публикации:* 10-21-9-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 6 октября 2010 г. УДК 541.117.

Кластеры Ni_4. Спектры в твердом ксеноне и квантово-химические расчеты.

© **Серебренников Леонид Владимирович**,* **Головкин Анатолий Владимирович**, **Давлятшин Дмитрий Ильфритович** и **Серебренникова Александра Леонидовна**[1+]
Кафедра физической химии. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Ул. Ленинские горы, 1, стр. 3. г. Москва, 119991. Россия.
Тел.: (495) 939-30-69. E-mail: [1)] *multikss@mail.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *никель, кластеры, матричная изоляция, спектры, квантовая химия.*

Аннотация

Изучены матричные ИК спектры системы Ni_n и проведены квантово-химические расчеты кластеров Ni_4. Показано, что Ni_4 является структурно нежесткой системой относительно перемещения четвертого атома никеля в окрестностях жесткого треугольника Ni_3. Рассчитаны электронные переходы двух основных изомеров Ni_4 и показано, что наблюдаемый в ИК спектре переход согласуется с расчетом.