

Квантовохимическое моделирование магнитной подрешетки бифункциональных соединений

© Утенышев Андрей Николаевич,⁺ Боженко Константин Викторович,
Алдошин Сергей Михайлович* и Санина Наталья Алексеевна

*Институт проблем химической физики РАН, просп. Акад. Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432.
Московская обл. Россия. Тел.: 8 (496) 522-12-02. Факс: 8 (496) 522-35-07. E-mail: uten@icp.ac.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: бифункциональные материалы, оксалат, дитиооксамид, фотохромные соединения, ферромагнетики, биметаллические сетки, константы обменного взаимодействия, V3LYP/TZV.

Аннотация

На основании квантово-химических расчетов магнитных свойств комплексных анионов различного размера описана методика моделирования магнитной подрешетки бифункциональных соединений. Расчеты геометрической структуры различных комплексов в приближении V3LYP/LANL2DZ и константы обменного взаимодействия (J) в приближении V3LYP/TZV показали, что оптимальными являются комплексные анионы $[L_2M1^{III}LM2^{II}L_2]^{n-}$, (L – лиганд, M1 и M2 – трех- и двухвалентные 3d-металлы переходного ряда, n – заряд аниона), в которых оптимизируются только девять структурных параметров.