

Квантовохимические расчеты параметров спин-гамильтониана бидерного комплекса марганца (II) с нитронил- нитроксильными дирадикалами

Кадиленко Е. М.

Институт химической кинетики и горения СО РАН
Новосибирский государственный университет

Дизайн новых молекулярных магнетиков является очень важной задачей в связи с перспективой их применения в микроэлектронике и спинтронике. В последнее время в области молекулярного магнетизма стали использоваться расчетные методы квантовой химии. С одной стороны, исходя из расчетных параметров спин-гамильтониана, можно корректно выбрать модель и объяснить экспериментальные данные. В свою очередь, на основе анализа зависимости расчетных параметров от химической структуры гипотетических соединений, можно предложить наиболее перспективные блоки молекулярных магнетиков.

Основная задача данной работы - изучение электронной структуры и расчет параметров спин-гамильтониана, описывающего магнитные свойства бидерного комплекса $[\text{Mn}_2(\text{CF}_3\text{CO}_2)_2(\text{hfac})_2(\text{DR})_2]$ с нитронил-нитроксильными дирадикалами (Рис. 1, DR).

В рамках поставленной задачи были проведены расчеты g- и D-тензоров парамагнитных центров, рассчитаны параметры обменных взаимодействий между парамагнитными центрами комплекса, а также оценены межмолекулярные обменные взаимодействия. Для расчета использованы как неограниченный по спину метод нарушенной симметрии в варианте теории функционала плотности, так и многоконфигурационные расчеты (CASSCF/NEVPT2). Проведено моделирование температурной зависимости магнитной восприимчивости поликристаллических образцов, удовлетворительно согласующееся с экспериментом.

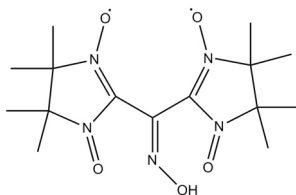


Рис 1. Химическая структура дирадикала (DR).