Зависящие от спина релятивистские эффекты и строение кластера Au_3

***<u>А.А. Русаков</u>*[а], *Е.А. Рыкова*[б], *А.В. Зайцевский*[в]**

[а]*Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: rusakov@phys148-2.chem.msu.ru

[б]*Центр фотохимии РАН, Москва, Россия*

[в]*ИВЭТП, РНЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия*

Интерес к малым кластерам золота обусловлен перспективами их применения как компонент нанокатализаторов. Вместе с тем надежные экспериментальные и теоретические данные о структуре и спектрах отсутствуют даже в случае кластера Au_3.

Для золота и его соединений невозможно игнорирование релятивистских эффектов, как скалярных, так и зависящих от спина. Их учет осуществлен в рамках модели 19-электронного согласованного по форме релятивистского эффективного потенциала остова. Для оценки вклада спин-орбитального взаимодействия в энергию основного состояния использована двухкомпонентная версия релятивистской теории фукнционала плотности [1]. При выборе обменно-корреляционного функционала внимание было сосредоточено на таковых, полученных из первых принципов и не содержащих подгоночных параметров.

Расчет фрагментов поверхности потенциальной энергии Au_3 позволил заключить, что устойчивой ядерной конфигурацией для основного состояния является конфигурация правильного треугольника, что противоречит данным теоретических исследований в скалярном приближении (даже с последующим учетом спин-орбитальных взаимодействий по теории возмущений), предсказывающим ян-теллеровское искажение указанной конфигурации. Однако при исключении из псевдопотенциала зависящей от спина составляющей отчетливо наблюдался эффект Яна – Теллера. Объяснение этого явления основано на представлениях о релятивистской симметрии электронных состояний. Из сопоставления данных расчетов с учетом спин-орбитального взаимодействия и без оного получена оценка непосредственного вклада данного эффекта в энергию взаимодействия атомов. В пользу конфигурации правильного треугольника свидетельствуют данные об энергии атомизации: для наиболее надежного неэмпирического функционала TPSS [2] результат отлично согласуется с даныыми эксперимента.

Энергии основного состояния изомеров кластера Au_3 оценены в рамках скалярного метода связанных кластеров для более адекватного, в сравнении с теорией функционала плотности, описания электронной корреляции, и уточнены путем включения рассчитанной ранее спин-орбитальной поправки. Обсуждена возможность использования расчетов возбужденных состояний в сочетании со спектроскопическими данными для идентификации более стабильного изомера.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект 06-03-32346).

1. E.J. Bylaska, W.A. de Jong, K. Kowalski *et al.*, "NWChem, A Computational Chemistry Package for Parallel Computers, Version 5.0", 2006.
2. J. Tao, J.P. Perdew, V.N. Staroverov, and G.E. Scuseria, *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **91**, 146401.