

ПРЕДСКАЗАНИЕ И ОБЪЯСНЕНИЕ НОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ЯВЛЕНИЙ

Артем Р. Оганов

Сколковский Институт Науки и Технологий, Большой бульвар 30с1, Москва 121205, Россия, e-mail: a.oganov@skoltech.ru

Создание мощных методов предсказания кристаллической структуры привело к возможности предсказывать также стехиометрию стабильных соединений, включая как кристаллы, так и молекулы и нанокластеры. В докладе будет рассказано о нескольких наиболее важных результатах последних лет:

1. Открытие аномальных соединений, таких, как Na_3Cl , NaCl_7 , и рекордные высокотемпературные сверхпроводники – H_3S , YH_6 , CaH_6 , ThH_{10} , LaH_{10} .
2. Открытие неожиданных явлений под давлением – таких, как появление прозрачной неметаллической модификации натрия и значительная реакционная способность гелия под давлением.
3. Объяснение этих и других явлений на основе недавно разработанных шкал электроотрицательности и химической жесткости элементов. В частности, оказалось возможным предсказывать, не прибегая к сложным расчетам или экспериментам, какие элементы будут образовывать стабильные соединения друг с другом – а какие нет. Будет рассказано о том, как поднятие электроотрицательности было расширено на случай высоких давлений, и как это помогло объяснить многочисленные аномалии химии высоких давлений.
4. Предсказание стабильных молекул – в частности, бора, серы и фосфора (в сравнении с кристаллическими аллотропами этих элементов), а также органических молекул в системе C-H-N-O. Введение понятия «магических молекул» (по аналогии с «магическими атомными ядрами» и «магическими наночастицами»), особая стабильность которых связана с заполненной электронной и/или атомной оболочкой, позволяет не только предсказать наиболее вероятные молекулы, но и объяснить часто встречающуюся симметричность стабильных молекул.