

МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ТРИАЗИНОВЫХ КАРКАСОВ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЫ F4-TCNQ

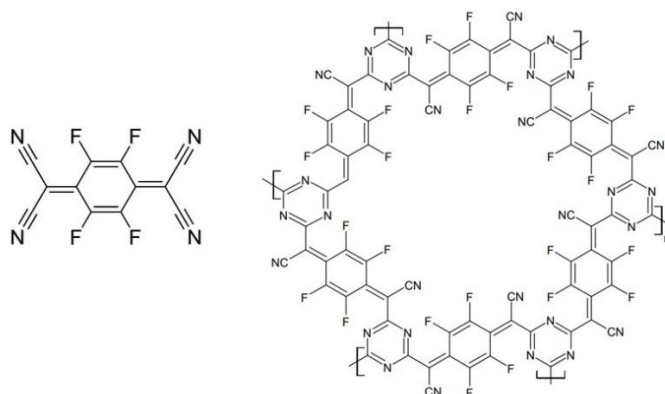
Коровина А.В., Квашин Д.Г.

Институт биохимической физики РАН
119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4

Теоретические исследования в области низкоразмерных наноматериалов, в настоящее время, являются мощным инструментом для получения фундаментальных знаний о структуре и свойствах как новых, ранее не синтезированных, так и получаемых экспериментально, материалов. Кроме того, данная область является приоритетной как в мировой, так и в отечественной науке.

Данная работа посвящена теоретическому исследованию низкоразмерных наноматериалов органической природы для их дальнейшего применения в области физических и химических сенсоров.

В результате теоретических исследований с помощью современных вычислительных методов впервые была предсказана возможность образования мономолекулярных двумерных слоев, состоящих из молекул F4-TNCQ (тетрофторотетрациано-хинондиметан) и имеющих разную атомную структуру (см. рисунок). Слои представляют собой триазиновые каркасы, которые известны своей способностью разделять нефтехимические газы (например, такие как этилен и ацетилен). Модификация фтором также делает материалы водоотталкивающими. При помощи нескольких правильно подобранных каркасов возможно создать систему фильтрующих пленок и осуществить полное разделение нефтехимических газов, полученных при переработке нефти. Такая система каркасов также позволяет легко адаптироваться к составу примесей в нефтехимических газах при помощи простой смены одной или нескольких фильтрующих пленок.



Молекула F4-TCNQ и слой, полученный на её основе

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (25-73-10250)