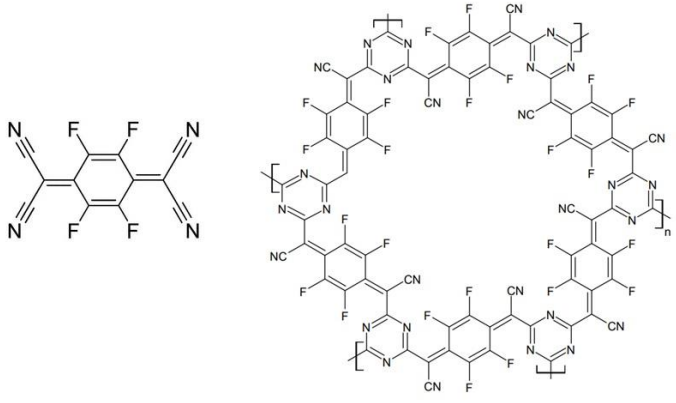
ИЗУЧЕНИЕ НОВЫХ ДВУМЕРНЫХ НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЫ F4-TCNQ

Коровина А.В.[(1,2)]*, Квашнин Д.Г.*[(1,2)]
[(1)] Московский физико-технический институт
141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9
[(2)] Институт биохимической физики
119334, г. Москва, ул. Косыгина, д.4

Многообразие форм и составов полупроводниковых органических молекул в сочетании с быстроразвивающимися технологиями синтеза двумерных материалов приводит к возможности использования отдельных органических молекул в качестве строительных блоков для создания новых двумерных материалов на их основе.

Каркасы на основе триазина имеют такие преимущества, как возможность настройки размера пор и однородность их распределения в материале. Благодаря разнообразию молекул, имеющих от двух и более циановых групп, возможно получение огромного количества трехмерных и двумерных материалов. Однако модифицированная фторами молекула F4-TCNQ еще не была рассмотрена в качестве основы для двумерного слоя.

В данной работе с помощью теории функционала электронной плотности (DFT) исследованы возможные пути получения мономолекулярного (двумерного) слоя, состоящего из молекул F4-TCNQ (см. рисунок). С помощью DFT и метода молекулярной динамики была оценена температурная стабильность полученных слоев, рассчитаны электронные и механические свойства. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности использования молекул F4-TCNQ для получения новых стабильных двумерных материалов.



Молекула F4-TCNQ (слева) и слой, полученный на ее основе (справа)

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (№ 21-73-10238).