

ТРЕУГОЛЬНЫЕ МОЛЕКУЛЫ  $C_{45}H_{21}$ ,  $C_{24}E_{21}H_{21}$   
AND  $E_{24}C_{21}H_{21}$  (E = Si, Ge): ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДОМ DFT

Гапуренко О.А., Стариков А.Г., Миняев Р.М., Минкин В.И.

*Институт физической и органической химии, Южный федеральный университет,  
344090, Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194/2,  
e-mail: gapur@ipoc.sfedu.ru*

В настоящее время наночастицы являются одними из актуальнейших объектов исследований. Графеновые нанохлопья различаются по типу своего края и открытой или закрытой оболочкой. Системы с открытой оболочкой представляют собой наибольший интерес из-за своего потенциального применения в спинтронике.

Среди полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) с зигзагообразным краем треугольные графеновые нанохлопья занимают особое место, будучи высокоспиновыми альтернантными некекулевскими структурами. Наименьшие соединения этой серии ПАУ – феналенил и триангулен, имеющие дублетное и триплетное основные состояния, соответственно. На сегодняшний день углеродные триангулены хорошо изучены, но их более тяжелые аналоги рассмотрены мало. Триангулены, состоящие из различных комбинаций атомов элементов 4 группы недавно были изучены.<sup>1</sup>

Одна из возможных модификаций триангуленов – образование полости в скелете,<sup>2</sup> ведущее к изменению спина системы (Рисунок 1). В настоящей работе мы представляем результаты квантово-химических расчетов методом DFT структуры и свойств серии полых триангуленов, состоящих из атомов элементов 4 группы (C, Si, Ge).

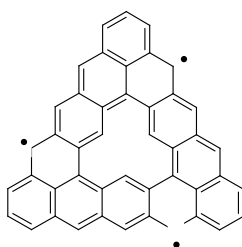


Рисунок 1. Триангулен с полостью,  $S=3/2$

Литература

1. Gapurenko O.A., Starikov A.G., Minyaev R.M., Minkin V.I., J. Comput. Chem. 2015, 36, 2193.
2. Morita Y., Suzuki S., Sato K., Takui T., Nat. Chem., 2011, 3, 197.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки России (договор № 14.Y26.31.0016).*