

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.¹

Одна из возможных модификаций триангуленов – образование полости в скелете,² 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).

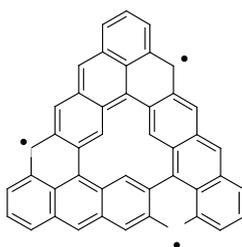


Рисунок 1. Триангулен с полостью, $S=3/2$

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).