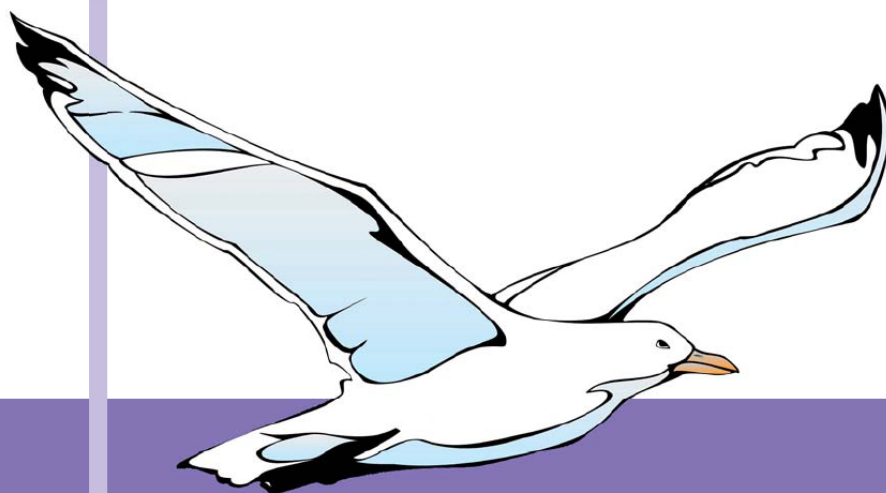


ТУАПСЕ 2017

Современная химическая физика

XXIX Симпозиум



сборник
тезисов

17 - 28 сентября 2017 года
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

Наноструктурированные гетерослоистые соединения дисульфида молибдена с аминопроизводными нафталина

Голубь А.С.¹, Лененко Н.Д.¹, Головешкин А.С.¹, Ушаков И.Е.¹,
Корлюков А.А.¹, Зайковский В.И.^{2,3}, Бушмаринов¹

1. ИНЭОС РАН, г. Москва

2. ИК СО РАН, г. Новосибирск

3. НГУ, г. Новосибирск

Наноструктурированные гетерослоистые соединения на основе дисульфида молибдена образуются в результате совместной упаковки отрицательно заряженных монослоев MoS_2 и гостевых слоев органических катионов. Поскольку данные системы проявляют уникальные заряд-транспортные и каталитические свойства, несомненный интерес представляет как дизайн новых соединений этого типа, так и изучение зависимости их строения от условий, в которых происходит сборка частиц. В данной работе приводятся данные о строении новых соединений MoS_2 , в которых гостевыми катионами являются протонированные формы 1,8-бисдиметиламинафталина (BDMAN), 1-аминонафталина (AN) и 1-аминометилнафталина (AMN). На основе дифракционных данных и квантовохимических расчетов было показано, что во всех изученных соединениях структура сульфидных слоев отвечает метастабильной в обычных условиях проводящей модификации MoS_2 , имеющей искаженно-октаэдрический полиэдр молибдена и гофрированную поверхность слоя, как и в ранее изученных нами соединениях с другими органическими катионами [1]. Определено положение катионов AN, AMN и BDMAN в межслоевом пространстве MoS_2 . Для AN и AMN было выявлено, что, в зависимости от условий сборки, образуются слоистые кристаллы трех типов: с параллельным, наклонным однослойным и двухслойным расположением органических катионов относительно сульфидных слоев. В случае BDMAN образуется только одно соединение с наклонным однослойным расположением органических катионов. Полученные структурные модели были использованы для расчета методами квантовой химии энергии когезии слоев, что позволило оценить факторы, определяющие стабилизацию указанных выше типов структур [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 16-29-06184).

- [1] A.S. Goloveshkin, I.S. Bushmarinov, A.A. Korlyukov, M.I. Buzin, V.I. Zaikovskii, N.D. Lenenko, A.S. Golub, *Langmuir*, **2015**, 31, 8953–8960.
- [2] I.S. Bushmarinov, A.S. Goloveshkin, N.D. Lenenko, V.I. Zaikovskii, A.A. Korlyukov, A.S. Golub, I.L. Eremenko, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2016**, 7 (24), 5162–5167.