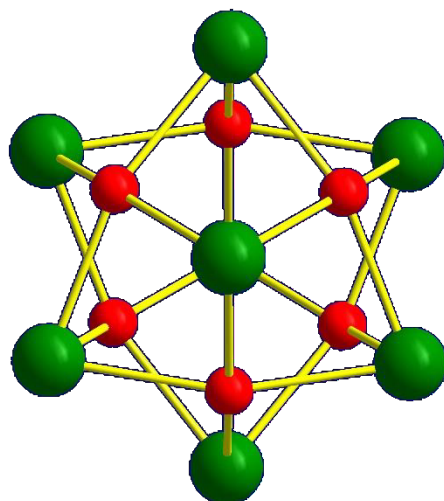




IX Всероссийская конференция по химии полиядерных соединений и кластеров

«Кластер-2022»

Посвящается 85-летию со дня рождения академика РАН
Глеба Арсентьевича Абакумова

Тезисы докладов

4 – 7 октября 2022

Нижний Новгород

ЗАМЕЩЕНИЕ МЕТАЛЛОВ КАК МЕТОД ЦЕЛЕВОЙ МОДИФИКАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ПОЛИАДЕРНЫХ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ

Сызганцева О.А.¹, Сызганцева М.А.¹

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет,
Ленинские Горы, д.1, стр.3, 119992.

E-mail: osyzgantseva@gmail.com

Металлоорганические каркасы (МОК) представляют практический интерес для различных областей науки и промышленности, включая адсорбцию, разделение, мембранные технологии, катализ, фотовольтаику и сенсорику, ввиду практически неограниченных возможностей модификации их свойств за счёт изменения химического состава [1]. Основными структурными единицами МОК являются органические лиганды и металлические узлы, которые зачастую представлены полиядерными кластерами оксидов, сульфидов, галогенидов, нитридов, и, в общем случае любых халько- и пниктогенидов металлов [2]. Замещение металла в этих кластерах является мощным инструментом, позволяющим целенаправленно модулировать электронные свойства таких соединений. В данной работе представлены механизм подбора металла для целевой модификации электронной структуры и свойств МОК, включая зонную структуру, оптические и магнитные свойства, характеристики разделения заряда в возбужденном состоянии, проводимость, времена жизни носителей заряда и рекомбинационные пути [2,3], посредством направленного выстраивания его электронных уровней [1,2], а также экспериментальная апробация этого подхода [2].

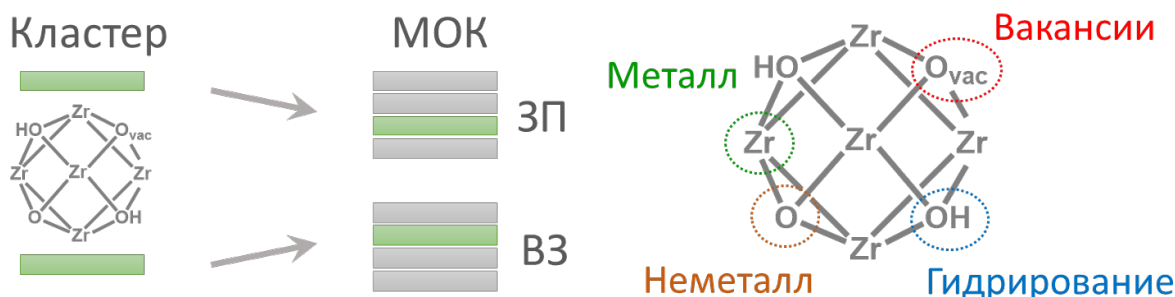


Рисунок 1. Схема подбора компонентов кластера для изменения электронных свойств МОК [1]

Благодарность

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Ссылки

- [1] Syzgantseva, M.A.; Stepanov, N.F.; Syzgantseva O.A. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2020**, *12*, 17611-17619.
- [2] Syzgantseva, M.A.; Ireland, C.P.; Ebrahim, F.M.; Smit, B.; Syzgantseva O.A. *J. Amer. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 6271-6278.
- [3] Syzgantseva, M.A.; Stepanov, N.F.; Syzgantseva O.A. *J. Phys. Chem. C*, **2020**, *124*, 24372-24378.