## КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПЛАСТИН ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА

## Т. И. Городко

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь, fiz.gorodko@bsu.by Научный руководитель — А. В. Кухто, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник

В статье рассказывается про то, как можно исследовать нанопластины дисульфида молибдена с помощью программного пакета Gaussian09. Были проведены расчеты оптимизации молекул, UV-VIS электронные переходы и было произведено сравнение с экспериментальными спектрами поглощения нанопластин функционализированного дисульфида молибдена.

*Ключевые слова:* дисульфид молибдена; Gaussian09; нанопластины дисульфида молибдена; оптимизация молекул; UV-VIS электронные переходы; спектр поглощения; теория функционала плотности.

Двумерные материалы (2D-материалы), кристаллы, состоящие из одного или нескольких слоёв, в которых межатомные взаимодействия в плоскости слоя гораздо сильнее, чем межплоскостные. [1, 2, 3, 4] Для проявления особых свойств 2D-материалов необходимо, чтобы их толщина была меньше латеральных размеров на два или более порядка. При латеральных размерах менее 100 нм двумерные материалы начинают проявлять свойства квантовых точек.

Функционализация многослойного и монослойного дисульфида молибдена на основе тиола выполняется для настройки его электрических и оптических характеристик. [5]

С помощью Gaussian09 в данной работе были проведены такие расчеты как: оптимизация геометрии молекулы, UV-VIS электронные переходы. Для простоты расчетов в первом приближении в качестве монослоя дисульфида молибдена использовалось кольцо из атомов молибдена и серы. Использовалась модель теория функционала плотности. [7]

Функциональная молекула может соединяться с молекулой кольца из атомов молибдена и серы как через атом серы, так и через атом молибдена. Ввиду этого в данной работе рассматривалось оба случая соединения функциональной молекулы и дисульфида молибдена.

Выбор теоретической модели зависит от размера системы и уровня аппроксимации. [6, 7] В модели теории функционала плотности твёрдое тело рассматривается как система, состоящая из большого числа одинаково взаимодействующих между собой электронов, удерживаемых вместе решёткой из атомных ядер. В качестве базиса в работе использовался базис 3-21G, так как он определен для атомов данной молекулы. Функционал используется для описания энергии системы электронов и определения их движения в молекуле. Здесь использовался функционал B3LYP. [7]

На рисунке 1 показана оптимизированная молекула, где функциональная молекулы присоединена к атому молибдена из кольца.

На рисунке 2 показана оптимизированная молекула, где функциональная молекула присоединена к атому серы из кольца.



*Рис. 1.* Оптимизированная молекула, где функциональная молекула присоединена к атому молибдена

*Рис.* 2. Оптимизированная молекула, где функциональная молекула присоединена к атому серы

Так, для HOMO-1 (HOMO – высшая занятая молекулярная орбиталь) (Рисунок 4a, Рисунок 3b) молекулярной орбитали вся электронная плотность сосредоточена в кольце молибден-сера, когда для LUMO+1 (LUMO – низшая незанятая молекулярная орбиталь) (Рисунок 4с, Рисунок 3d) электронная плотность уже растянулась дальше, ближе к хвосту функциональной молекулы.



*Рис. 3.* Распределение электронной плотности в молекуле, где функциональная молекула присоединена к молибдену

*Рис.* 4. Распределение электронной плотности в молекуле, где функциональная молекула присоединена к сере

На рисунке 5а показаны спектры поглощения теоретической молекулы (штрихованная линия), где функциональная молекула присоединена к атому молибдена из кольца и спектр экспериментальной молекулы (сплошная линия) нанопластин дисульфида молибдена функционализированного органической молекулой. Спектры похожи по форме, однако теоретический спектр смещен в более длинноволновую область.

На рисунке 5б показаны спектры поглощения теоретической молекулы (штрихованная линия), где функциональная молекула присоединена к атому серы из кольца и спектр экспериментальной молекулы (сплошная линия) нанопластин дисульфида молибдена функционализированного органической молекулой. Максимумы поглощения теоретического спектра и экспериментального спектра совпадают.



Рис. 5. Спектры поглощения экспериментальной молекулы нанопластин дисульфида молибдена функционализированного органической молекулой (сплошной линией) и (а) теоретической молекулы (штрихованная линия), где функциональная молекула присоединена к атому молибдена из кольца, (б) теоретической молекулы (штрихованная линия), где функциональная молекула присоединена к атому серы из кольца

В заключение следует отметить, что при переходе молекулы на более высокие энергетические уровни, электронная плотность смещается в сторону функциональной молекулы как для случая, где функциональная молекула соединена с атомом молибдена, так и для случая, где функциональная молекула присоединена к атому серы. Основной заряд в данных молекулах в основном концентрируется в области кольца. Также показано, что теоретические спектры поглощения совпадают с экспериментальными спектрами поглощения с хорошей точностью, что доказывает правильность выбранной модели.

## Библиографические ссылки

1. R.G. Dickinson, L. Pauling, The crystal structure of molybdenite, J. Am. Chem. Soc.45 (1923) 1466–1471.

2. *M.V. Bollinger, K.W. Jacobsen, J.K. Nørskov,* Atomic and electronic structure of MoS2 nanoparticles, Phys. Rev. B 67 (2003) 085410–085417.

3. *Q. Peng, S. De,* Outstanding mechanical properties of monolayer MoS2 and its application in elastic energy storage, Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 9427–19437.

4. *D. Gao [et al.]* Ferromagnetism in freestanding MoS2 nanosheets, Nanoscale Res. Lett. 8 (2013) 129–1128

5. *Chhowalla, M.* et al. The chemistry of two-dimensional layered transition metaldichalcogenide nanosheets. Nat. Chem. 5, 263–275 (2013)

6. *Бутырская Е. В.* – Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView – Москва СОЛОН-ПРЕСС, 2011.

7. Tomberg A. – Gaussian 09W Tutorial – 2010.