

Сведения о ходе выполнения проекта  
**«Межмолекулярные взаимодействия и механизмы формирования  
упорядоченных молекулярных слоев»**  
поддержанного Российским научным фондом

Соглашение № 14-12-00813

Руководитель д-р физ.-мат. наук Филимонов Сергей Николаевич

**2015 год**

Выполнены первопринципные расчеты адсорбции триазина на поверхностях меди, серебра, рутения, палладия и платины. Показано, что на поверхностях Cu(111) и Ag(111) единственно возможным состоянием хемисорбции является одноцентровая адсорбция молекулы нормально ориентированной по отношению к поверхности. На поверхностях Rh(111) и Pd(111), кроме одноцентральной адсорбции, возможна адсорбция в мостиковое положение в одной из двух различных адсорбционных конфигураций, отличающихся геометрией адсорбированной молекулы и ее ориентацией относительно поверхности. На поверхности Pt(111) возможны пять различных адсорбционных состояний, включая физисорбированное состояние и четыре различных хемисорбированных состояний. Расчеты показывают, что переходы между состояниями адсорбции триазина на Pt(111) сопровождаются существенным изменением электронной конфигурации молекулы и ее свойств. Проведены первопринципные расчеты потенциала межмолекулярного взаимодействия для пар свободных молекул бензола, триазина и их галогенпроизводных. Определены оптимальная взаимная ориентация молекул, равновесное расстояние между ними и энергия межмолекулярной связи. Показано, что замещение атомов водорода атомами галогена приводит к увеличению равновесного расстояния между молекулами. При этом энергия связи молекул друг с другом также увеличивается, что обусловлено большей поляризуемостью атомов галогена по сравнению с атомами водорода и, как следствие, увеличением вклада дисперсионных сил в энергию межмолекулярного взаимодействия. Аналогичное поведение наблюдается в случае физисорбции молекул на поверхности Pt(111). Однако, в случае хемисорбированных молекул вместо притяжения наблюдается отталкивание, что может быть связано с упругим взаимодействием, вызванным деформацией подложки в результате адсорбции молекул. Проведен анализ влияния множественных адсорбционных состояний на десорбцию молекул. Предложена простая аналитическая модель, описывающая десорбцию через промежуточное физисорбированное состояние при наличии двух неэквивалентных состояний хемосорбции. Показано, что перераспределение молекул между хемисорбированными состояниями может приводить к появлению немонотонной зависимости концентрации молекул от времени в одном из состояний на ранних стадиях десорбции, а также к существенному изменению спектров температурно-программируемой десорбции.