

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

2014 год

Проведены первопринципные расчеты адсорбции одиночных молекул триамина и его галоген-производных на поверхность Pt(111). Определена равновесная структура молекул в различных состояниях адсорбции, рассчитаны энергии адсорбции и энергии активации переходов между различными адсорбционными состояниями. Обнаружено существование четырех стабильных состояний адсорбции пиразина на Pt(111), одно из которых представляет собой физадсорбированное состояние, три других – хемосорбированные состояния, различающиеся геометрией адсорбированной молекулы и ее ориентацией относительно поверхности. Существование множественных состояний адсорбции характерно для плотных молекулярных слоев, однако для одиночной адсорбированной молекулы подобное поведение обнаружено впервые. С использованием рассчитанных значений энергий адсорбции и энергий активации переходов триамина между различными состояниями проведен численный анализ кинетики формирования слоя невзаимодействующих молекул $C_3N_3H_3$ на поверхности Pt(111). С использованием компьютерного моделирования методом Монте-Карло исследовано влияние анизотропии формы молекул на энтропию молекулярного слоя.