

Обнаруженный экранирующий эффект позволяет целенаправленно изменять реакционную способность молекул, регулировать активность катализаторов и конструировать углеродные нанореакторы нового типа.

Уникальное сочетание свойств графена приводит к тому, что молекулы, находящиеся по разные стороны от листа графена, не могут непосредственно реагировать между собой, но могут чувствовать влияние друг друга через графеновый слой (толщина листа графена равна одному атому). Идеей учёных из ИОХ РАН было рассмотреть графеновый химический экран и его способность «гасить» или наоборот «усиливать» передачу такого влияния.

Были применены методы молекулярного моделирования, позволяющие теоретически прогнозировать и объяснять реакционную способность молекул. На роль активных частиц были выбраны различные органические многозарядные катионы, которые присутствуют в виде дефектных центров в углеродных материалах. В качестве молекулы субстрата, подвергающейся действию этих катионов, были выбраны карбонильные комплексы палладия, которые используются в химии как предшественники катализаторов. При непосредственном контакте (без листов графена) катион придавал комплексу палладия значительный положительный заряд. Добавление между катионом и комплексом палладия экрана в виде одного листа графена привело заметному уменьшению заряда комплекса («разрядка» на 25% от первоначального значения). Усиление экранирования путем добавления еще одного листа графена привело к дальнейшему уменьшению заряда комплекса еще на 20%, а третий лист графена «разрядил» комплекс еще на 12%.

Таким образом, листы графена эффективно экранируют химические взаимодействия. Одно из применений описанного явления связано с уменьшением воздействия дефектных центров на поверхности углеродных материалов, другой, не менее важной областью применения, является регулирование избирательности и активности металлических катализаторов на углеродной подложке.

Экспериментальная проверка наглядно подтвердила теоретические прогнозы. Исследователи получили углеродные материалы, содержащие дефекты на поверхности. Эти дефекты служат аналогами активных частиц, экранирование действия которых и нужно добиться. Было показано, что наночастицы палладия адсорбируются именно в областях локализации дефектов, что подтверждает высокую активность последних. Однако, как только дефекты были покрыты несколькими слоями графеновых чешуек, распределение частиц металла стало равномерным, то есть, наночастицы перестали чувствовать влияние дефектов вследствие их экранирования графеном.

Полученные данные не только расширяют наше понимание химии графеновых систем, но и, возможно, приведут к получению новых адаптивных каталитических систем, сочетающих в себе свойства и катализатора и нанореактора одновременно.

Источник: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 4608; DOI: 10.1039/C5CP05586E