

Тематическое направление: Молекулярная нанотехнология силикатов. Часть I.

## **ВОЗМОЖНОСТЬ ПОЗИЦИОННОГО МЕХАНОСИНТЕЗА СИЛИКАТОВ В МАШИННОЙ ФАЗЕ.**

© Тарасов Денис Станиславович<sup>1\*+</sup> и Акберова Наталья Ивановна<sup>2</sup>  
Кафедра биохимии. Казанский государственный университет. Ул. Кремлевская 18. г. Казань 420008.  
Республика Татарстан, Россия. <sup>1</sup>E-mail: [dtarasov@compera.com](mailto:dtarasov@compera.com); <sup>2</sup>E-mail: [nakberova@mail.ru](mailto:nakberova@mail.ru)

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** силикаты, механосинтез, нанотехнология, позиционное управление, квантово-химический расчет.

### **Резюме**

Фундаментальной задачей молекулярной нанотехнологии является создание средств для производства структур с любым расположением атомов, допускаемым законами физики. Позиционно-управляемый механосинтез был предложен в качестве возможного способа достижения этой цели, однако, спектр структур, которые возможно синтезировать таким методом в настоящее время не определен. Механосинтез твердых углеводородов (алмаз, графит, нанотрубки) был проанализирован теоретически в работах ряда авторов. Исследование возможностей молекулярной нанотехнологии других твердых ковалентных кристаллических структур представляется желательным как с целью анализа потенциальных возможностей позиционного механосинтеза, так и с точки зрения поиска оптимальных путей к реализации молекулярно-производственных систем.

В настоящей работе произведено предварительное изучение возможности позиционно-управляемого механосинтеза силикатов с трехмерной пространственной организацией. Предложена структура молекулярных инструментов для переноса мономера ( $H_2SiO_3$ ) на молекулы силикатов. Структура молекулярного инструмента и возможность его функционирования в качестве компонента механо-синтетических систем проанализирована с помощью квантово-химических расчетов с использованием как полуэмпирического метода PM3, так и более точного метода теории функционала плотности (DFT) с использованием гибридного функционала B3LYP.