

Benzoksazino junginio potencinės energijos paviršiai šviesa indukuoto sužadinimo metu

Potential energy surfaces of benzoxazine compound during photoexcitation

Stepas Toliautas¹, Juozas Šulskus¹, Leonas Valkūnas^{1,2}

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

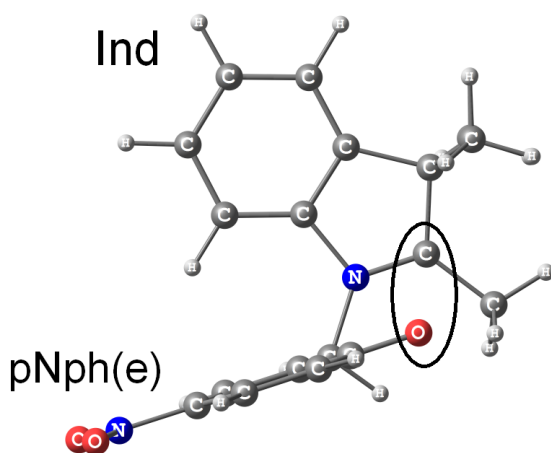
²Fizinių ir technologijos mokslų centro Fizikos institutas, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

stepas.toliautas@ff.stud.vu.lt

Fotochrominiai junginiai yra šviesai jautrūs molekuliniai dariniai, kurių sugerties savybės keičiasi sužadinimo metu. Dėl galimo taikymo molekulinio dydžio elektronikoje bei didelio tankio duomenų laikmenoms [1] tokie junginiai sulaukia nemažo dėmesio. Vienas pavyzdys yra indolo[2,1-b][1,3]benzoksazino molekulė [2]. Šios molekulės spektriniai matavimai rodo, kad junginys pasižymi sudėtinga sužadinimo eigos dinamika [3], kuriai paaiškinti reikalingi nuodugnesni teoriniai tyrimai.

Pranešime aptariami indolo-benzoksazino junginio struktūros bei jo fotocheminių savybių skaičiavimų rezultatai, gauti naudojant įvairius kvantinės chemijos metodus. Modeliavimui naudoti skaičiavimų paketai *Gaussian03* ir *Games-US*; skaičiavimai atlikti naudojant Fizikos fakulteto Teorinės fizikos katedros ir Saulėtekio slėnio (VU) superkompiuterius.

Junginio geometrinės struktūros parametrai optimizuoti tankio funkcionalo metodu (DFT) naudojant hibridinį B3LYP funkcionalą ir du bazinių funkcijų rinkinius (6-31G(d,p) ir 6-311G(2d,p)). Skaičiavimų metu gautos keturios pagrindinės elektroninės būsenos struktūros, atitinkančios skirtingus potencinės energijos minimumus, bei šias struktūras jungiančių trajektorijų balno taškai. Indolo-benzoksazino junginį galima sąlyginai skaidyti į dvi grupes: indolo (Ind) ir nitrofenolio (pNph) (1 pav.) Šių grupių susijungimo vietoje susidaro oksazino žiedas; pagrindinį energijos minimumą atitinka struktūra su uždaru oksazino žiedu, o šalutinėse padėtyse šis žiedas atviras.



1 pav. Indolo-benzoksazino junginio struktūra viename iš potencinės energijos minimumų (pažymėta nutraukta jungtis oksazino žiede).

Spektrinių sužadinimo eigos matavimų [3] rezultatuose stebimi atskirų junginio molekulinė grupių pėdsakai; jų egzistavimas gali būti aiškinamas oksazino žiedo skilimu reakcijos metu. Siekiant išnagrinėti šį reiškinį, gautuose potencinės energijos paviršiaus taškuose (minimumuose ir balno taškuose) skaičiuoti elektrono energijos spektrai ir palyginti su atskirų molekulinė grupių – 3H-indolo bei 4-nitrofenolio anijono – skaičiavimų metu gautais rezultatais. Nestacionaraus tankio funkcionalo (TD-DFT) metodu gautos sužadinimų energijos vertės neblogai atitinka eksperimentus, tačiau nesuteikia pakankamai informacijos apie vykstančių procesų dinamiką. Todėl energijos būsenų išsidėstymui bei banginės funkcijos charakteriui įvairiose struktūros padėtyse plačiau tirti panaudoti kiti skaičiavimų metodai: pusempiris ZINDO, neempiriai GUGA-CIS ir multikonfigūracinės trikdžių teorijos (MCQDPT2); naudotas 6-31G(d,p) bazinių funkcijų rinkinys.

Reikšminiai žodžiai: fotochrominiai junginiai, elektrono energijos spektras, sužadintos energijos būsenos, kvantinės mechanikos skaičiavimai.

Literatūra

- [1] M. Irie, Chem. Rev., **100**, 1683 (2000).
- [2] V. Amankavičienė, W. Holzer, S. J. Asadauskas, and A. Šačkus, *Theses from International Conference on Organic Synthesis*, 58 (2006).
- [3] M. Barkauskas, V. Martynaitis, M. Vengris, Lith. J. Phys., **48**, 231 (2008).