

Benzoksazino junginio potencinės energijos paviršiai šviesa indukuoto sužadavimo 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

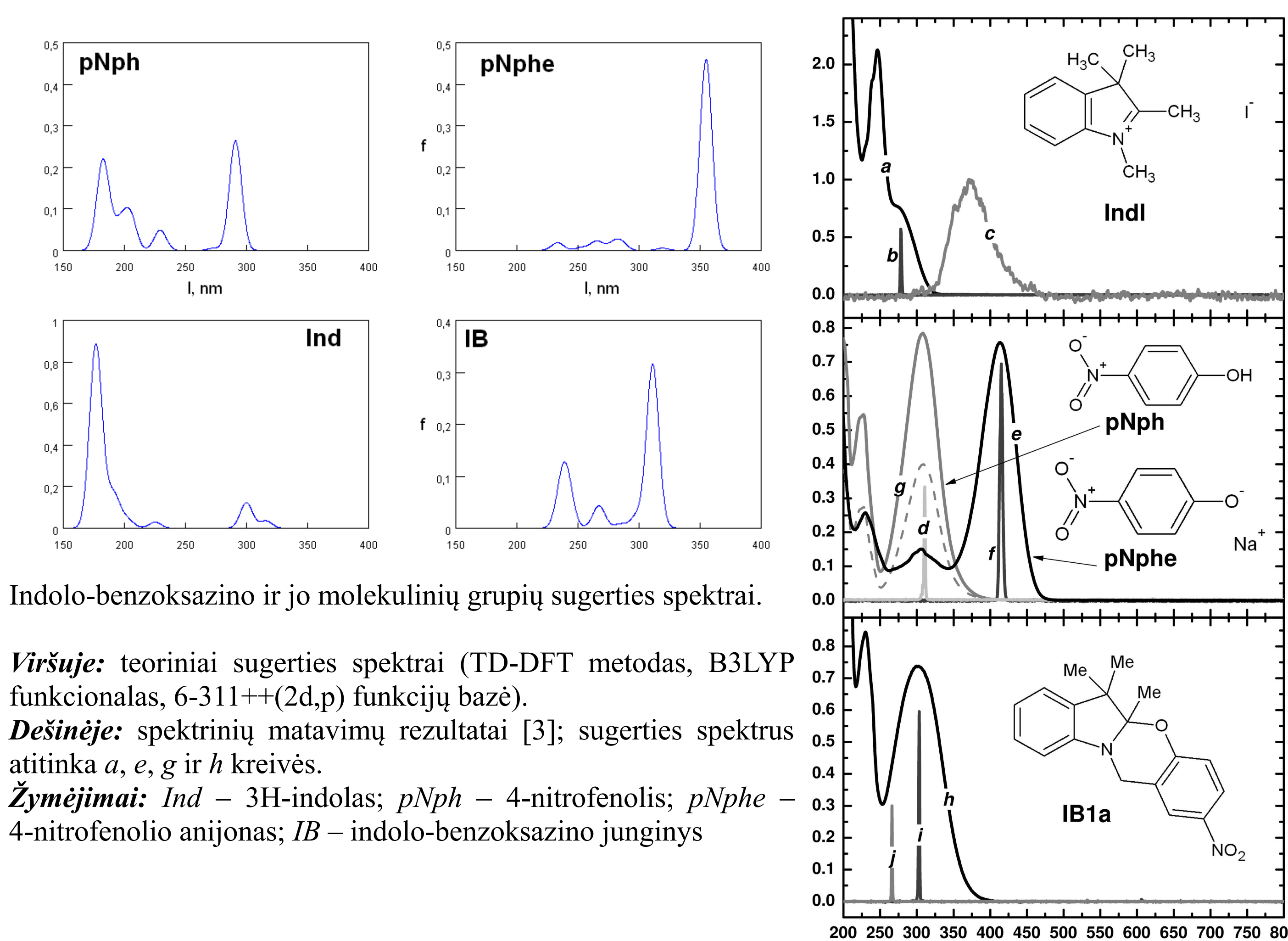
²Fizinių ir technologijos mokslų centro Fizikos institutas, Savanorių pr. 231, LT-02300 Vilnius

Apžvalga

Fotochrominiai junginiai yra šviesai jautrūs molekuliniai dariniai, kurių sugerties savybės keičiasi sužadavimo 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 sužadavimo 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 *Gamess-US*; skaičiavimai atlikti naudojant Fizikos fakulteto Teorinės fizikos katedros ir Saulėtekio slėnio (VU) superkompiuterius.

Sugerties spektrai



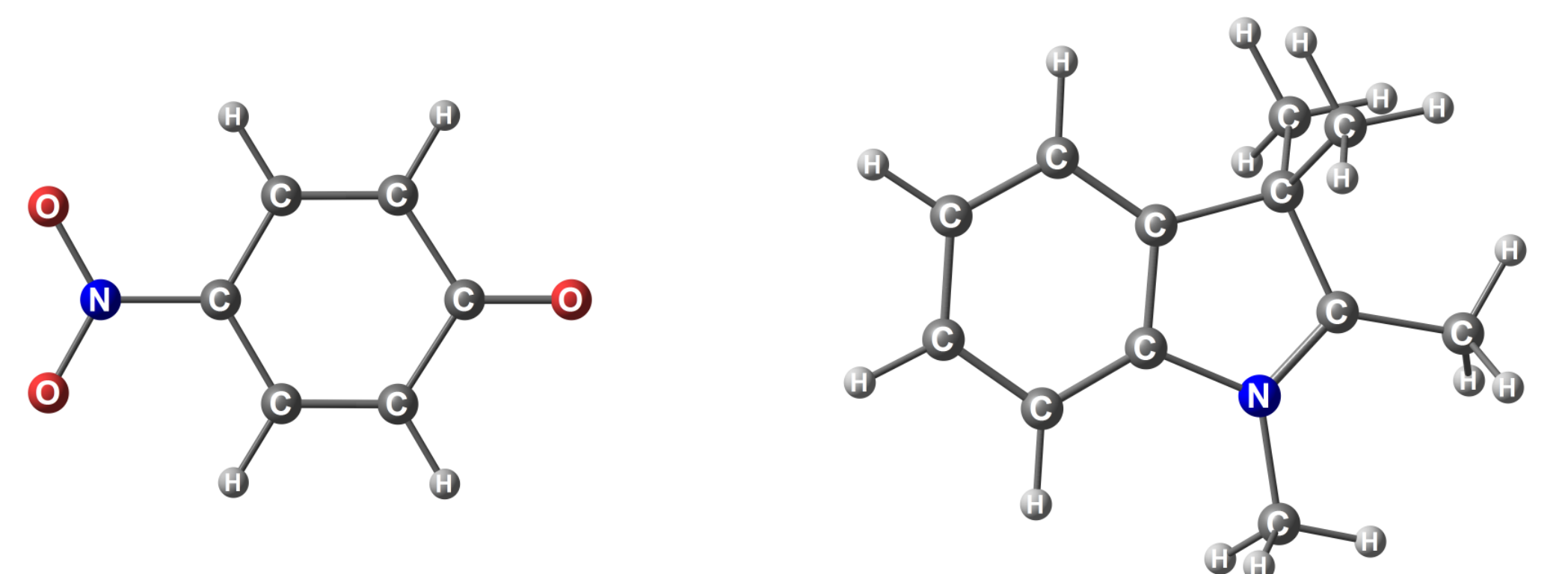
Indolo-benzoksazino ir jo molekulinė grupių sugerties spektrai.

Viršuje: teoriniai sugerties spektrai (TD-DFT metodas, B3LYP funkcionalas, 6-311++(2d,p) funkcijų bazė).

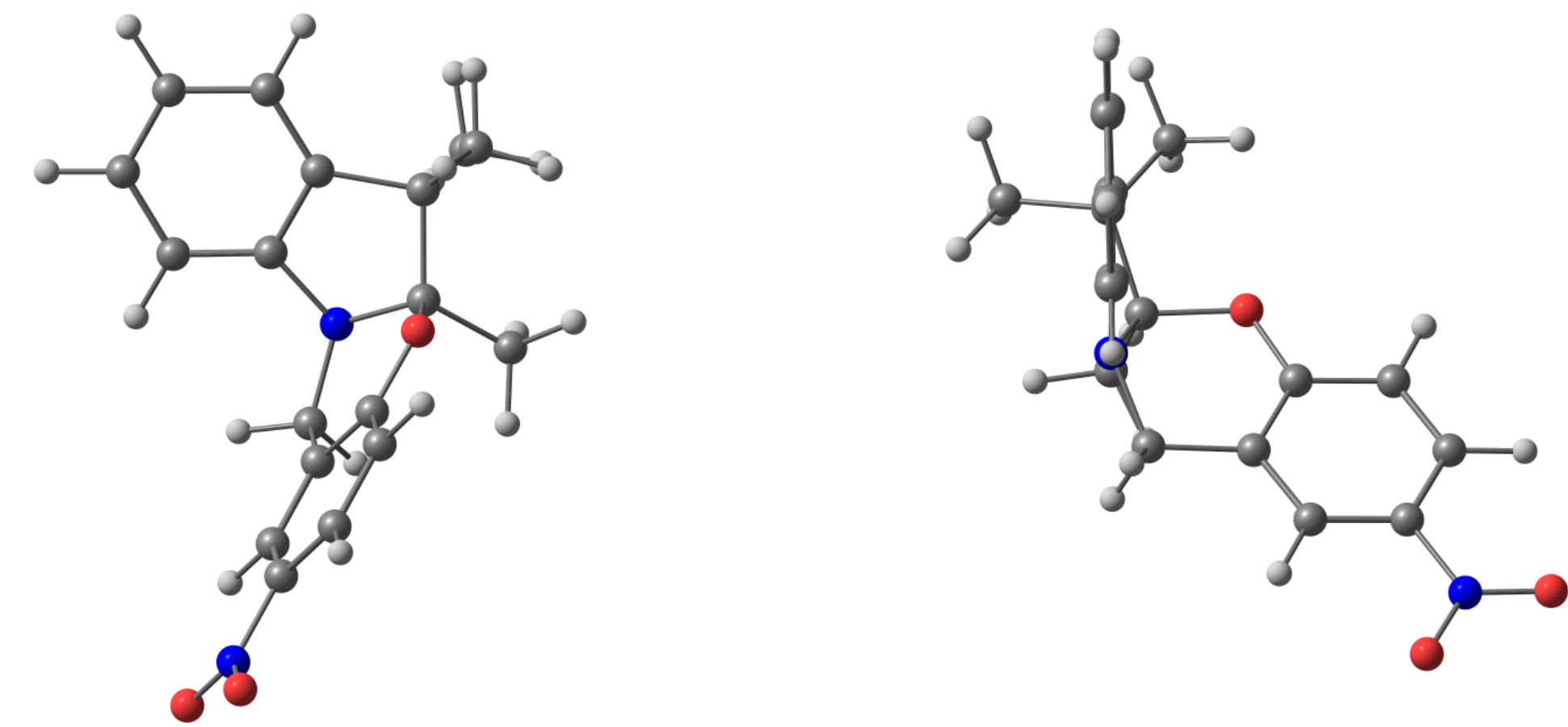
Dešinėje: spektrinių matavimų rezultatai [3]; sugerties spektrus atitinka a, e, g ir h kreivės.

Žymėjimai: *Ind* – 3H-indolas; *pNph* – 4-nitrofenolis; *pNphe* – 4-nitrofenolio anijonas; *IB* – indolo-benzoksazino junginys

Junginių molekulinė struktūra

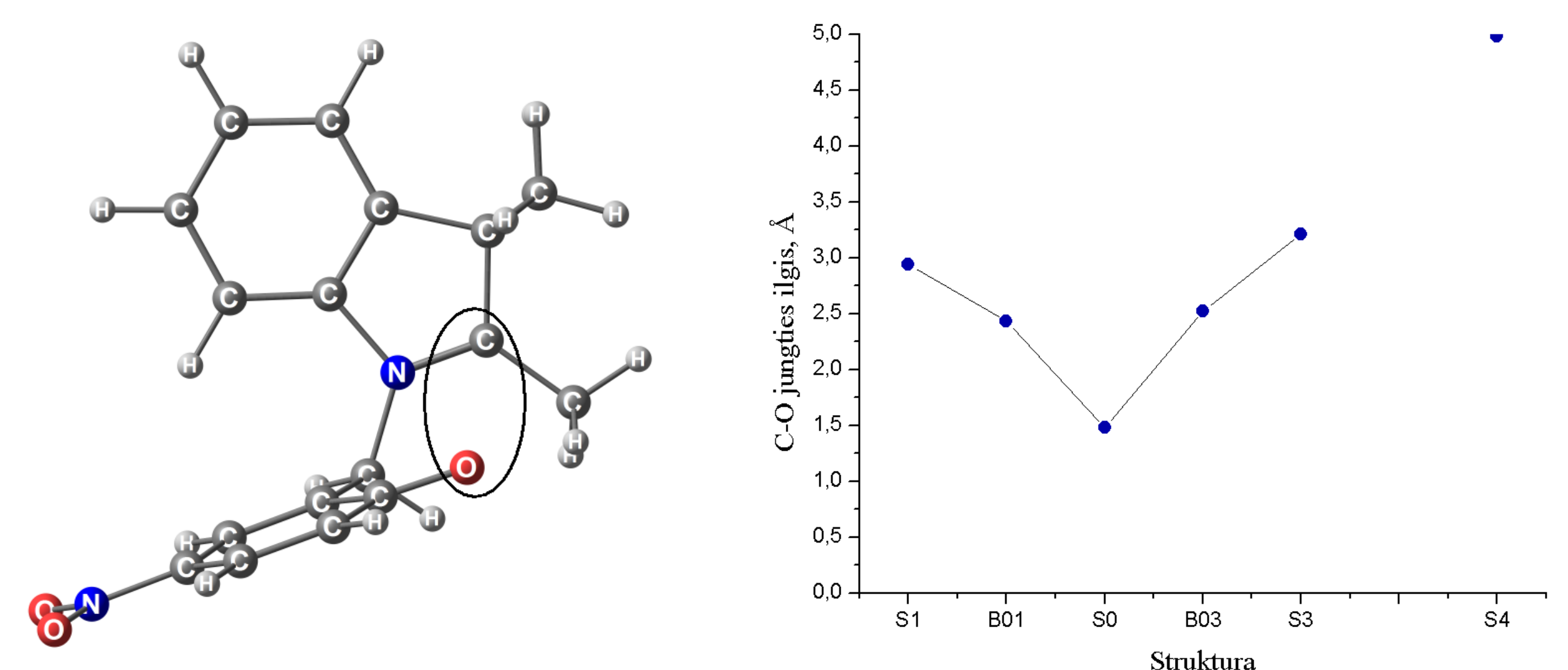


4-nitrofenolio anijonas (*pNphe*, kairėje) ir 3H-indolas (*Ind*)



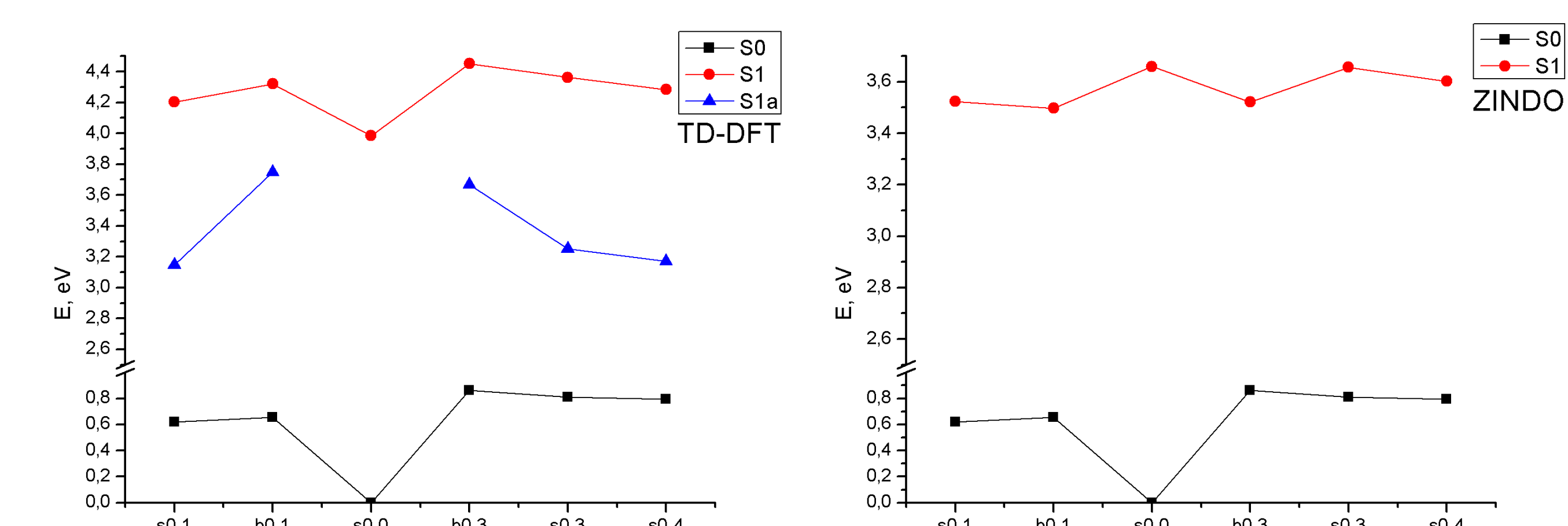
Indolo[2,1-b][1,3]benzoksazino (*IB*) molekulė

IB junginio struktūros ir spektro kitimas atsiveriant oksazino žiedui



Kairėje: indolo-benzoksazino junginio struktūra viename iš potencinės energijos minimumų (*S1*; pažymėta nutraukta C-O jungtis oksazino žiede). **Dešinėje:** C-O jungties ilgis įvairiuose potencinės energijos paviršiaus taškuose

Pagrindinės būsenos ir sužadintos būsenos energijos kitimas



Indolo-benzoksazino junginio pagrindinės (S_0 , juoda spalva) ir žemiausios aktyvios sužadintos (S_1 , raudona bei mėlyna spalvos) elektroninių būsenų energijos vertės įvairiuose potencinės energijos paviršiaus taškuose, gautos iš TD-DFT (kairėje) ir ZINDO (dešinėje) skaičiavimų. **Žymėjimai:** $s0-0$ – pagrindinė (žemiausios energijos) padėtis; $s0-1$, $s0-3$, $s0-4$ – lokalūs S_0 energijos minimumai; $b0-1$, $b0-3$ – balno taškai

Apaičioje: indolo-benzoksazino junginio žemiausios aktyvios sužadintos elektroninės būsenos energijos vertės, gautos įvairiais skaičiavimų metodais – TD-DFT (įskaitant tirpiklio – acetonitrilo – poveikį ir be jo), ZINDO ir GUGA-CIS

	<i>s0-1</i>	<i>b0-1</i>	<i>s0-0</i>	<i>b0-3</i>	<i>s0-3</i>	<i>s0-4</i>
DFT	4,2	4,32	3,99	4,45	3,97	3,94
DFT (tirp.)	2,84	3,68	3,59	-	3,49	3,52
ZINDO	3,52	3,5	3,66	3,52	3,66	3,6
GUGA-CIS	7,04	7,19	7,49	7,45	7,76	7,75

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).

Reikšminiai žodžiai:

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

Adresas susirašinėjimui:

stepas.toliautas@ff.stud.vu.lt