

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ КАТИОНОВ ИНДОПОЛИКАРБОЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Г. В. Барышников, Б. Ф. Минаев, В. А. Минаева, А. Т. Подгорная

Черкасский национальный университет им. Б. Хмельницкого, Украина

E-mail: glebchem@rambler.ru

Аннотация

Полиметиновые красители (ПК), обладающие уникальным набором спектрально-люминесцентных свойств, являются перспективными фотосенсибилизаторами для фотоэлектрических преобразователей, а также широко используются в качестве активных сред в квантовой электронике. Особенности спектрально-люминесцентных свойств многих ПК в средах различной полярности подробно изучены и описаны в литературе. Рентгеноструктурному анализу строения некоторых ПК и их кристаллической упаковки также уделяется немало внимания, однако теоретические исследования строения ПК обычно ограничены расчетом их равновесных геометрий с дальнейшим их применением для расчета оптических свойств. Нами проведено комплексное квантово-химическое моделирование ряда катионов симметричных индополикарбоцианиновых красителей – классических представителей класса ПК, и сделаны выводы о их внутримолекулярной стабилизации за счет водород-водородных связывающих взаимодействий.

Поиск равновесной геометрии основного, первого синглетного и первого триплетного состояний исследуемых катионов симметричных индополикарбоцианинов (ИПКЦ) проведен на уровне теории функционала плотности с использованием гибридного обменно-корреляционного функционала B3LYP в базисе атомных орбиталей 6-31G(d) в вакуумном приближении. О нахождении истинного минимума энергии катионов ИПКЦ свидетельствует отсутствие мнимых частот в рассчитанных ИК спектрах поглощения. На основе полученных равновесных геометрий проведен топологический анализ функции распределения электронной плотности $\rho(r)$ на уровне теории Бейдера «Quantum Theory Atoms in Molecules» (QTAIM).

MODELING OF THE INDOPOLYCARBOCYANINES DYES CATIONS STRUCTURE BY THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, V. A. Minaeva, A. T. Podgornaya

B. Khmel'nitsky National University, Cherkasy, Ukraine

E-mail: glebchem@rambler.ru

Abstract

Polymethine dyes (PM) with a unique set of spectral-luminescent properties are promising photosensitizers for photovoltaic cells, as well as they widely used as active media in quantum electronics. Features of spectral-luminescent properties of many PCs in the different polarities solutions are studied in detail and described in the literature. The X-ray structure analysis of some PMs and of their crystal packing also obtained much attention, but theoretical studies of the structure of the PM are usually limited to the calculation of their equilibrium geometries for their further use for calculations of the optical properties. We have performed a comprehensive quantum chemical modeling of a number of symmetrical indopolycarboyanines dyes cations – the classic PM representatives, and draw conclusions about their stabilization by intramolecular hydrogen-hydrogen bonding interactions.

The search of the equilibrium geometry of the ground state, first singlet and triplet excited states of the studied symmetrical indopolycarboyanines dyes cations (IPCC) is performed at the density functional theory level using the hybrid B3LYP exchange-correlation functional in the 6-31G (d) basis set in the vacuum approximation. The absence of imaginary frequencies in the calculated IR absorption spectra indicates a finding of the IPCC cations true energy minimum. On the basis of equilibrium geometries the topological analysis of the electron density distribution function $\rho(\mathbf{r})$ by the Bader's theory «Quantum Theory Atoms in Molecules» (QTAIM) is performed.