

Структура адсорбционных слоев производных олиготиофенов: эффекты заместителей¹

Гуськова О.А.
аспирантка

Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия
guskova_olga@mail.ru

Представлены результаты компьютерного моделирования методом молекулярной динамики адсорбционных слоев, состоящих из производных α - тетратиофена (4Т). Структурная организация систем, а также конформационные свойства молекул исследованы в зависимости от температуры и длины алкильных цепей, присоединенных к β - углеродным атомам концевых тиофеновых колец.

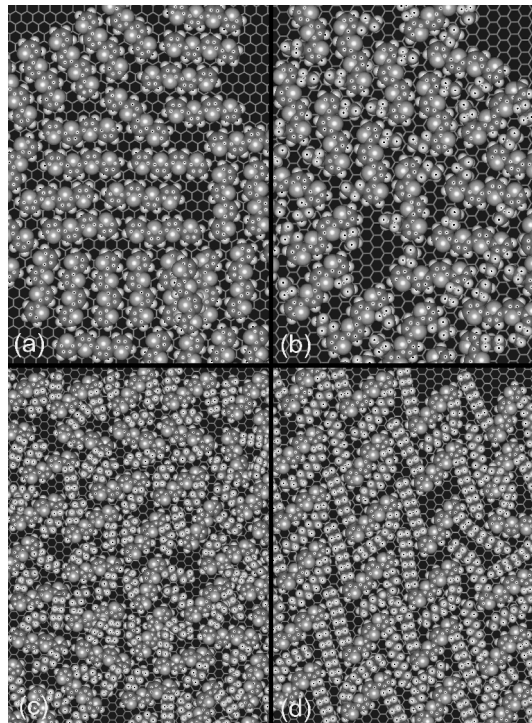


Рис. 1. Мгновенные фотографии исследуемых систем, иллюстрирующие типичные структуры молекул, адсорбированных на поверхности графита: (а) 4Т, (б) 4Т3С, (в) 4Т6С, (д) 4Т12С

Численный эксперимент позволил также выявить эффект длины заместителя на структурированность возникающих самоорганизующихся слоев. Было показано, что существует некая предельная длина бокового заместителя, при которой наблюдается наилучшее упорядочение. С дальнейшим ростом длины заместителя степень ориентации тиофеновых сегментов уменьшается.

Литература

1. Mena-Osteritz E., Meyer A., Langeveld-Voss B.M.v., Janssen R.A.E., Meijer E.W., Bäuerle P. (2000) Two-Dimensional Crystals of Poly(3-Alkyl- thiophene)s: Direct Visualization of Polymer Folds in Submolecular Resolution // *Angew. Chem. Int. Ed.* V. 39. № 15. P. 2679-2684.

¹ Тезисы доклада основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта SFB 569 - B13, Ulm, Germany, а также при поддержке Фонда содействия отечественной науке.