

## Моделирование спектральных свойств мономеров и димеров цианиновых красителей<sup>1</sup>

*Владимирова Ксения Геннадьевна<sup>2</sup>, Фрейдзон А.Я., Багатурьянц А.А.*

*студент*

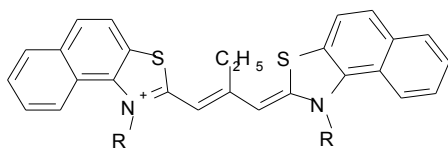
*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: kgvladi@gmail.com*

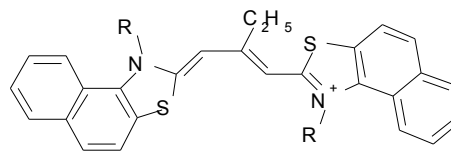
Полиметиновые (цианиновые) красители широко применяются, прежде всего, для регистрации информации, выступая в качестве спектральных сенсibilizаторов галогенсеребряных и необычных светочувствительных материалов. В последнее время были найдены новые перспективные применения полиметиновых красителей для создания светодиодов и устройств преобразования частоты лазерного излучения.

Большой интерес к подобным соединениям вызван тем, что молекулы красителей проявляют способность к самоассоциации, образуя различные агрегированные формы, начиная с димеров, как простейших агрегатов, и заканчивая сложными полимолекулярными образованиями типа *H*- и *J*-агрегатов. При этом в спектре наблюдается сдвиг максимума поглощения относительно  $\lambda_{\max}$  спектра мономера в сторону более коротких длин волн в случае формирования *H*-агрегата, и в длинноволновую область в случае образования *J*-агрегатов. Целью нашего исследования стало построение моделей димеров цианиновых красителей со спектральными свойствами, характерными для *H*- и *J*-агрегатов.

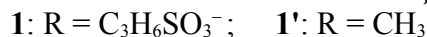
Сравнение спектров поглощения 3,3'-дисульфопропил-4,5,4',5'-дibenзо-9-этилтиокарбоцианина (**1**) в разных растворителях позволило заключить, что в зависимости от растворителя, возможно существование различных форм этого красителя в растворе. Экспериментальные данные были интерпретированы на основе расчетов методом функционала плотности (DFT) геометрической и электронной структуры возможных конформаций мономера исследуемого красителя. Было показано, что переход одной конформации мономера в другую при смене растворителя (как наблюдается в эксперименте) объясняется незначительным различием в энергии *цис-транс* и *транс-транс*-конформаций



*транс-изомер*



*цис-транс-изомер*



мономера (1,5 ккал/моль), которая компенсируется разницей энергий сольватации молекул красителя в различных растворителях.

На примере димеров красителя **1** и родственного красителя 3,3'-диметил-4,5,4',5'-дibenзо-9-этилтиокарбоцианина (**1'**) было проведено моделирование структур, в спектрах поглощения которых наблюдаются гипсохромные и bathохромные сдвиги по отношению к основному переходу *цис-транс*- конформации мономера **1'**, что характерно для спектров поглощения *H*- и *J*-агрегатов.

<sup>1</sup> Тезисы доклада основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 05-03-32911).

<sup>2</sup> Автор выражает благодарность Захаровой Г.В. и А.К. Чибисову за предоставленные экспериментальные данные.