

Название доклада

1,4-Диазепинопорфиразины как модель для изучения связи структура-свойство в тетрапиррольных макроциклах

Автор – к.х.н. Тараканов П.А.

Аннотация доклада

Тетрапиррольные макроциклы и их металлокомплексы сочетают в себе элементы строения нескольких классов соединений (ароматических гетероциклов, полисопряженных красителей, металлокомплексных соединений с широким рядом элементов таблицы Менделеева). Это обстоятельство приводит к проявлению у них многочисленных свойств (фотофизика, фотохимия, электрохимия, электрохромизм, катализ, молекулярный магнетизм...) сконцентрированных в одной молекуле и высокому потенциалу их прикладного применения. Реализация прикладного потенциала молекул зависит от достоверности модели, описывающей связь, структура-свойство. 6*H*-1,4-Диазепинопорфиразины известны с 1999 года и отличаются от классического порфиразина способностью к формированию сильных межмолекулярных взаимодействий с образованием устойчивых высокосимметричных димеров с сильным экситонным взаимодействием аналогично сэндвичевым комплексам РЗЭ. Отсутствие иона РЗЭ позволило получить дополнительные экспериментально-теоретические данные, описывающие экситонное взаимодействие в комплексах данного типа. Более того, способность к управлению межмолекулярными взаимодействиями путем введения различных заместителей в 6*H*-1,4-дiazепиновый гетероцикл позволила получить серию низкосимметричных порфиразинов А₃В типа и обнаружить отклонение от правила Вавилова-Каша во всем классе тетрапиррольных макроциклов с пониженной симметрией. Последнее обстоятельство указывает на несостоятельность приближения Борна-Оппенгеймера в описании механизмов диссипации возбужденного состояния тетрапиррольных макроциклов.