

Тараканов Павел Александрович, Козлов А.В., Симаков А.О., Горячев Н.С., Конев Д.В., Гончарова О.А., Слесаренко Н.А., Тараканова Е.Н., Нефедов С.Е., Стужин П.А., Пушкарев В.Е.

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

Аннотация доклада

Тетрапиррольные макроциклы и их металлокомплексы сочетают в себе элементы строения сразу нескольких классов соединений таких как ароматические гетероциклы, полисопряженные красители, координационные соединения с широким рядом элементов таблицы Менделеева. Это обстоятельство приводит к тому, что в рамках одной молекулярной структуры можно сочетать несколько полезных физико-химических свойств: фотофизика, молекулярный магнетизм, фотохимия, электрохимия, электрохромизм, катализ. Такое сосредоточение свойств в одной молекуле определяет их высокий потенциал прикладного применения. Реализация потенциала прикладного применения этих молекул зависит от достоверности модели, описывающей связь, структура-свойство. Таким образом углубление понимания связи структура-свойство в тетрапиррольных макроциклах является актуальной фундаментальной - поисковой задачей.

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 редкоземельных элементов. Отсутствие иона редкоземельного элемента 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-дiazepиновый гетероцикл позволила получить серию низкосимметричных порфиразинов A₃B 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 достоверном описании механизмов диссипации возбужденного состояния тетрапиррольных макроциклов.