

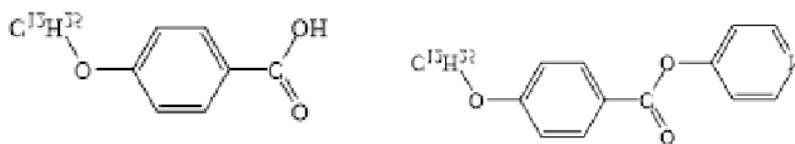
## СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ МЕЗОМОРФНЫХ СИСТЕМ «4-Н-ДОДЕЦИЛОКСИБЕНЗОЙНАЯ КИСЛОТА: 4-ПИРИДИЛ 4'-Н-ДОДЕЦИЛОКСИБЕНЗОАТ»

Сырбу С.А.<sup>а</sup>, Федоров М.С.<sup>а</sup>, Гиричева Н.И.<sup>а</sup>, Бубнова К.Е.<sup>б</sup>

<sup>а</sup>Ивановский государственный университет, 153025, Иваново, Ермака, 39  
e-mail: fms1989@mail.ru

<sup>б</sup>Ивановский государственный химико-технологический университет,  
153000, Иваново, Шереметевский пр., 7

Методами поляризационной термомикроскопии и дилатометрии были исследованы мезоморфные и объемные свойства систем на основе 4-н-додецилоксибензойной кислоты (А) и 4-пиридил 4'-н-додецилоксибензоата (В). Также были зарегистрированы ИК спектры индивидуальных соединений А, В и ИК спектры систем при молярном соотношении компонентов 2А:1В и 1А:1В.



4-н-додецилоксибензойная кислота (А) 4-пиридил 4'-н-додецилоксибензоат (В)

Была выполнена серия квантово-химических расчетов (DFT(B97D)/6-311++G\*\*), результаты которых были использованы при интерпретации колебательных спектров. Проведено моделирование Н-комплексов типов А•••А, А•••В, А•••А•••В и А•••В•••А, которые могут быть образованы в системе А-В при различных молярных соотношениях компонентов. Для них рассчитаны оптимальные геометрические параметры и частоты колебаний. Показано, что ИК спектр соединения А соответствует наличию циклических димеров А•••А<sub>cycl</sub>, в то время как в системе 1А:1В образуются комплексы А•••В. Анализ ИК спектров системы 2А:1В в кристаллическом состоянии показал, что ожидаемые комплексы А•••А•••В, А•••В•••А и А•••А-ор•••В стехиометрического состава не образуются. Система 2А:1В состоит из стержнеобразных супермолекул А•••В и А•••А-<sub>cycl</sub> в соотношении 2:1. Выводы, сделанные на основании анализа ИК спектров и расчета энергий возможных структурных единиц, подтверждаются измерениями плотности системы А-В при различных соотношениях компонентов А и В. Анализ полученных данных показывает, что Н-комплексы типа А•••В образуются в исследуемых системах при эквимольном соотношении компонентов, в остальных случаях наблюдается сосуществование двух типов комплексов А•••А<sub>cycl</sub> и А•••В в различных соотношениях. Исходя из вышесказанного, проведенные исследования открывают перспективы управления процессом получения сокристаллов заданного состава.

Работа выполнена при Министерстве науки и высшего образования 4.7121.2017/8.9