

АНИЗОТРОПИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ЗАРЯДА В МЕЗОГЕННЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

Абуляисова Л.К., Баранников Р.М.

*Карагандинский государственный университет им. академика
Е.А. Букетова Министерства образования и науки Республики Казахстан,
100000, Караганда, ул. Университетская, 28,
e-mail: abu.lyazzat@gmail.com*

Наиболее важными компонентами для разработки жидкокристаллических материалов являются цианопроизводные различных химических классов. Цианогруппа является сильнополярным заместителем с дипольным моментом $13.4 \cdot 10^{-30}$ Кл·м (при присоединении ее к ароматическому фрагменту). Поэтому распределение электронной плотности заряда в соответствующих молекулах анизотропно. Степень полярности молекулы, как известно, характеризуется ее дипольным моментом как мерой асимметрии в распределении молекулярного заряда.

В таблице приведены вычисленные методами теории возмущений второго порядка и функционала плотности модуль вектора дипольного момента и его проекции на оси декартовой системы координат для молекул 4-н-пентил-4'-цианобифенила (БФ5) и 4-пентокси-4'-цианобифенила (ОБФ5).

Таблица. Компоненты вектора дипольного момента (μ) молекул БФ-5 и ОБФ-5

Метод	μ_x	μ_y	μ_z	μ_{Tot}
MP2/ 6-31G(d,p)	6.131 -6.899*	0.641 -0.366*	0.675 0.096*	6.201 6.910*
MP2/ 6-31++G(d,p)	6.377 -7.133*	0.637 -0.367*	0.671 0.096*	6.444 7.143*
B3LYP/ 6-31G(d)	5.885 -7.042*	0.598 -0.217*	0.630 0.064*	5.949 7.046*
B3LYP/ 6-31G(d, p)	5.888 -7.038*	0.595 -0.218*	0.628 0.064*	5.951 7.042*
B3LYP/ 6-31++G(d,p)	6.211 -7.302*	0.604 -0.242*	0.637 0.069*	6.273 7.307*

* Данные для ОБФ-5

Влияние базиса и метода расчета заметно (теория возмущений приводит к завышенным значениям, а увеличение базисных функций влечет за собой возрастание дипольных моментов), хотя качественных изменений по величине, порядку и направлению момента не наблюдается. Общим для методов является значительный дипольный момент, свидетельствующий об анизотропном зарядовом распределении в молекулах.