

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ МЕЗОМОРФНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Абулясова Л.К., Нуртаева А.К.

*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*

Мезоморфные соединения характеризуются набором физико-химических параметров, таких как температуры фазовых переходов, вязкость, упругость, диэлектрические и оптические свойства.

При определении оптической активности и других оптических свойств веществ важную роль играет поляризуемость. Она же в существенной мере определяет диэлектрические свойства веществ, величины дипольных моментов, индуцируемых на связях внутримолекулярными электрическими полями, создаваемыми совокупностью зарядов молекулы. Во многих случаях влияние заместителей на физико-химические свойства молекул также обусловлены прежде всего поляризуемостью.

Компоненты тензора поляризуемости (α_{xx} , α_{yy} , α_{zz} , α_{xy} , α_{yz} , α_{xz}) и средняя поляризуемость некоторых жидкокристаллических молекул, рассчитанные квантово-химическим методом B3LYP/6-31G(d,p), приведены в таблице.

Таблица. Сравнение поляризуемостей α молекул

Соединение	α , В ³						α_{cp} , В ³
	xx	xy	yy	xz	yz	zz	
4-н-пентил-4'- цианобифенил	352.141	14.755	160.292	20.979	-18.555	115.953	215.188
4-пентокси-4'- цианобифенил	393.769	-12.121	177.927	0.007	0.008	92.446	217.345
4-пропил-4'- метоксистильтбен	276.023	15.154	110.104	6.389	-3.444	96.764	160.998
4-пропил-4'- этоксистильтбен	277.341	-14.658	116.474	-9.135	-4.823	89.956	161.841
4-пропил-4'- цианазобензол	331.478	-7.090	155.431	0.115	0.038	56.645	181.138
4-этокси-4'- цианазобензол	335.589	17.724	121.648	1.329	-0.904	104.478	187.764

Наиболее высокие значения поляризуемости наблюдаются для молекул с полярной циангруппой. Увеличение числа конъюгированных фрагментов в рассмотренных молекулах повышает среднюю поляризуемость (экзальтация поляризуемости) и влияет на молекулярную анизотропию поляризуемости.