

Рентгеноструктурное и квантовохимическое исследование новых люминофоров производных 2-тозил-3-фенилакрилонитрила

© Утенышев Андрей Николаевич, Ткачев Валерий Владимирович, Боженко Константин Викторович*[†] и Алдошин Сергей Михайлович

[†]Институт проблем химической физики РАН. Пр. Ак. Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская область. Россия. Факс: (4965) 22-19-32. E-mail: uten@icp.ac.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: органические люминофоры, производные 2-тозил-3-фенилакрилонитрила, люминесценция, флуоресценция, рентгеноструктурный анализ, критические точки, топологический анализ электронной плотности.

Аннотация

Проведено рентгеноструктурное исследование кристаллов новых органических люминофоров 2-Тозил-3-(2,3-диметоксифенил)акрилонитрила (I), 2-тозил-3-(1,2-диметоксифенил)акрилонитрила (II). Соединения I и II в кристаллическом состоянии обладают интенсивной люминесценцией в видимой части спектра, исчезающей в растворе, что, очевидно обусловлено влиянием кристаллического поля. С целью объяснения этого факта, для соединений I и II был проведен сравнительный кристаллохимический анализ кристаллического и молекулярного строения. Выполнены квантово-химические расчеты в приближении V3LYP/6-311G(d) и проведен топологический анализ распределения электронной плотности, используя теорию QTAIM Бейдера для указанных соединений. Показано, что некоторые межмолекулярные и внутримолекулярные невалентные взаимодействия в некоторой степени обусловлены формированием в межмолекулярном и внутримолекулярном пространствах очень слабых ковалентных взаимодействий.