

# 1,3,4-Oksadiazolio chromoforų struktūros ir elektroninio spektro modeliavimas

## Simulation of Structure and Electronic Spectra of 1,3,4-Oxadiazole Chromophores

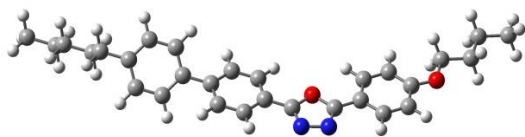
Ignas Gaižiūnas<sup>1</sup>, Juozas Šulskus<sup>1</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Savanorių pr. 231, 02300 Vilnius

[ignas.gaiziunas@gmail.com](mailto:ignas.gaiziunas@gmail.com)

Oksadiazolio chromoforomis (1 pav.) modifikuotų PPI dendrimerų ir PEI polimerų sugerties ir fluorescencijos spektrų eksperimentinių matavimų metu buvo pastebėtas fluorescencijos spektro poslinkis plėvelėse ir lyginant spektru chloroformo tirpale [1]. Chloroformo (CHCl<sub>3</sub>) tirpale sugerties maksimumo spektras yra 300-320 nm srityje ir fluorescencijos spektras - 370-390 nm srityje. Plonų plėvelių fluorescencijos spektro maksimumas yra pasislinkęs į 390-450 nm sritį. Taip pat eksperimentiškai užfiksuotas papildomas oksadiazoliu modifikuotų PEI polimerų plėvelių fluorescencijos maksimumas 550 nm bangos ilgių srityje [2].



1 pav. Modeliuojamas oksadiazolio monomeras

Darbo tikslas yra naudojantis kvantinės chemijos tankio funkcionalo ir nuo laiko priklausančio tankio funkcionalo (TDDFT) metodais paaiškinti 1,3,4-oksadiazolio chromoforos grupėmis modifikuotų dendrimerų bei polimerų chloroformo tirpalų ir plėvelių eksperimentinį sugerties ir fluorescencijos spektrą.

Darbe naudojantis tankio funkcionalo teorija yra modeliuojama oksadiazolio monomerų, dimerų ir didesnių kompleksų struktūra ir elektroniniai spektrai. Darbo metu buvo nustatytas tinkamiausias tankio funkcionalas skaitmeniškai modeliuoti oksadiazolį yra PBE1PBE. Atlikus skaičiavimus paaiškinti eksperimentiniai oksadiazolio monomerais modifikuotų PPI dendrimerų ir PEI polimerų chloroformo tirpalo sugerties ir fluorescencijos spektrai. Darbo metu apskaičiuoti oksadiazolio monomero geometrijos pokyčiai vykstant pirmosios sužadintos būsenos reklaksacijai. Nustatyta labiausiai tikėtina monomerų tarpusavio orientacija oksadiazolio dimere. Skaičiuojant

šio dimero spektrus buvo gauti draustiniai šuoliai, kurie gali būti laikomi krūvio pernašos šuoliais. Nustatyta, kad sugerties spektrai tiek tirpaluose, tiek plėvelėse iš esmės yra atskirų monomerų sugerties spektras. Fluorescencijos spektras 390-450 nm srityje taip pat gali būti aiškinamas spinduliavimu iš monomerų relaksavusios sužadintos būsenos. Kvantinės chemijos metodais gavome, kad monomerų sąveika dimeruose fluorescencijos spektrą keičia labai mažai. Darbo metu nustatyta, kad naudojantis tik kvantinės chemijos TDDFT metodais nepavyksta nustatyti fluorescencijos spektro maksimumo atsiradimo 550 nm srityje modifikuotų PEI polimerų plėvelėse. Šio maksimumo atsiradimas gali būti aiškinamas didesnių agregatų fluorescencija ir tolimesniam aprašymui turėtų būti naudojama eksitoninė teorija.

Kompiuteriniai skaičiavimai buvo atliekami naudojant VU atviros prieigos centro "HPC Saulėtekis" superkompiuterį.

*Reikšminiai žodžiai: chromoforai, oksadiazolis, elektroniniai spektrai, modeliavimas.*

### Literatūra

- [1] S. Hernández-Ainsa, J. Barberá, M. Marcos, J. L. Serrano, *Macromolecules* **45**, 1006, (2012).
- [2] V. Gulbinas, (Fizinių ir technologijos mokslų centras, Vilnius), private commun.