

## ЭЛЕКТРОННЫЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИОФЕНА

Д. Т. Кожич, С. М. Арабей

Белорусский государственный аграрный технический университет,  
Минск

E-mail: chemistry@batu.edu.by

Тиофены, как пятичленные гетероароматические соединения, с заместителями в положениях 2 и 5 привлекают внимание как светоизлучающие и жидкокристаллические материалы [1]. Материалы на их основе обладают дырочной проводимостью и находят применение в качестве компонент фотовольтаических ячеек солнечных органических фотоэлементов. Олиго- и политиофены, обладая сопряженными системами, часто используются как активные компоненты в устройствах молекулярной электроники [2, 3]. Особый интерес проявляется к несимметричным 2,5-диарилзамещенным тиофена допорно-акцепторного типа [4]. Вместе с тем, особенности спектральных свойств данного класса соединений изучены недостаточно детально из-за отсутствия простых и эффективных методик их синтеза.

В работе будут представлены исследования по разработке нового подхода к синтезу олиготиофеновых структур, исключая некоторые недостатки применяемых ранее реакций кросс-сочетания. Основным достоинством нового реализованного подхода к синтезу является замена реагентов-катализаторов на основе тяжелых металлов, приводящих к возникновению токсичных отходов, на дешевые и доступные реагенты (дифениламин, нитрит натрия и др.), удовлетворяющие принципам «зеленой» химии. Кроме того, введенные в тиофеновое кольцо функциональные заместители в дальнейшем могут быть подвержены дополнительным целенаправленным превращениям.

На рис. 1 изображены структуры производных тиофена, синтезированные разработанным методом, содержащие донорные (4-метоксифенил, трифениламин) и/или акцепторные (4-бромфенил, цианакриловая кислота) заместители. В работе будут проанализированы их электронные и ИК спектры поглощения (на рис. 1 и 2, как пример, соответствующие спектры для дифенилтиофена). Для интерпретации спектральных данных привлечены результаты оптимизации равновесных структур синтезированных молекул с использованием компьютерной программы HyperChem 8.0, на базе которых реализованы полуэмпирические расчеты их электронных и колебательных спектров.

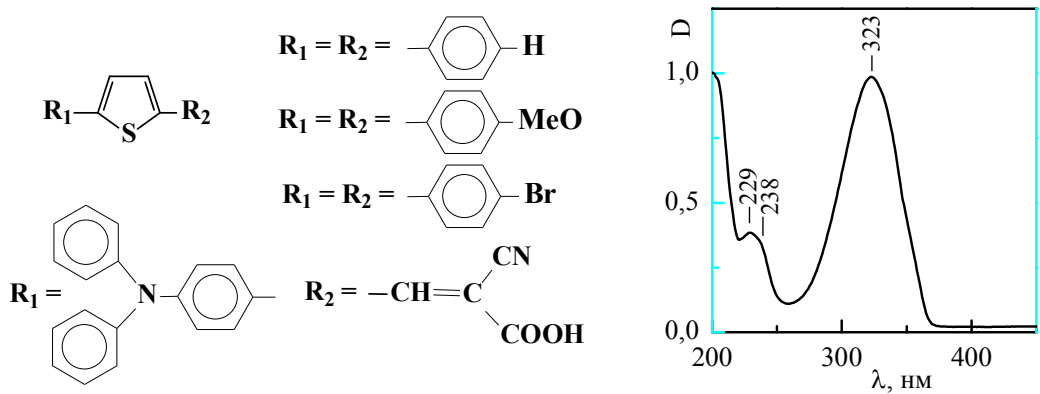


Рис. 1. Структуры донорно-акцепторных производных тиофена (слева) и спектр поглощения 2,5-дифенилтиофена в *n*-гексане при 300 К (справа)

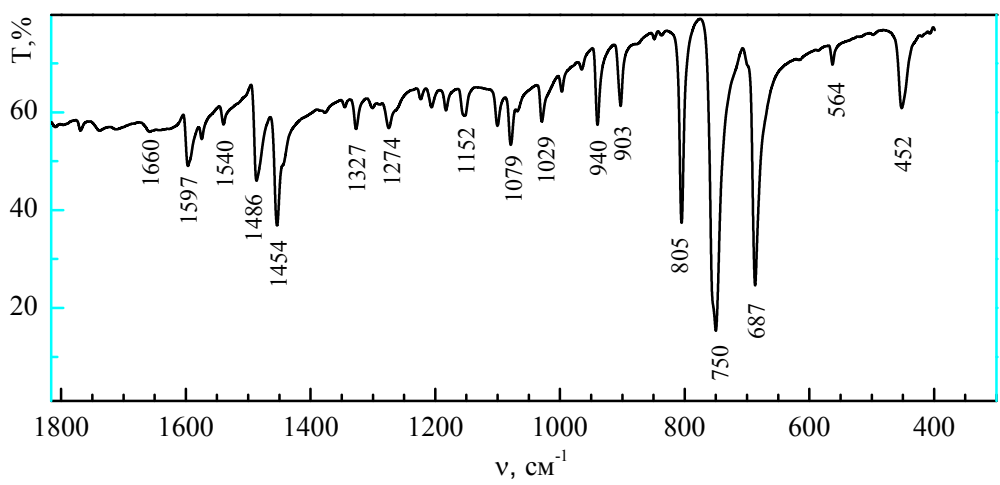


Рис. 2. ИК спектр 2,5-дифенилтиофена в КВг для области 300-1800  $\text{cm}^{-1}$

Анализ экспериментальных и расчетных данных показал, что в области 350–930  $\text{cm}^{-1}$  ИК спектров проявляются неплоские деформационные колебания атомов углерода и водорода фенильных и тиофенового колец, а область 940–1700  $\text{cm}^{-1}$  является областью проявления плоских валентных СС-колебаний. Интервал 3000–3080  $\text{cm}^{-1}$  соответствует плоским валентным СН-колебаниям производных тиофена.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Функциональные и композиционные материалы, наноматериалы» (задание 2.4.12 подпрограммы 2 «Наноматериалы и нанотехнологии»).

1. Mori A., Sekiguchi A., Masui K. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2003. V. 125, No. 7. P. 1700–1701.
2. Handbook of Oligo- and Polythiophenes / D. Fichou (ed.), Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 1999.
3. Electronic Materials: the Oligomer Approach / K. Mullen and G. Wegner (eds), Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 1998.
4. Yamamoto T., Arai M., Kokubo H., Sasaki S. // Macromolecules. 2003. V. 36, No. 21. P. 7986–7993.