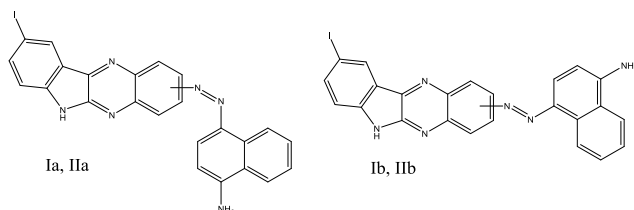


ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 6Н-ИНДОЛО[2,3-В]ХИНОКСАЛИНА

Кудрявцев Т.А., Мельниченко В.Э., Кудрявцева Т.Н.

Курский государственный университет
305000, г. Курск, ул. Радищева, д. 33

6Н-Индоло[2,3-*b*]хиноксалин можно рассматривать как встроенный донорно-акцепторный хромофор, сливающий богатый электронами индолин и электронодефицитный хиноксалин. Так, например, соединения, представленные на рисунке, могут обладать полупроводимостью за счет большого количества p, π -сопряжений и π, π -сопряжений.



(Ia) (Z)-4-((9-иодо-6Н-индоло[2,3-*b*]хиноксалин-2-ил)дiazенил)нафтален-1-амин (Ib) (E)-4-((9-иодо-6Н-индоло[2,3-*b*]хиноксалин-2-ил)дiazенил)нафтален-1-амин (IIa) (Z)-4-((9-иодо-6Н-индоло[2,3-*b*]хиноксалин-3-ил)дiazенил)нафтален-1-амин (IIb) (E)-4-((9-иодо-6Н-индоло[2,3-*b*]хиноксалин-3-ил)дiazенил)нафтален-1-амин

Для определения способности соединений к проводимости был произведен расчет в программе Gaussian 09w полуэмпирическим методом расчета PM3 значений энергий для HOMO, LUMO. Результаты расчетов представлены в таблице:

Результаты расчетов молекулярных
орбитальных поверхностей HOMO и LUMO

Соединение	HOMO эВ	LUMO эВ	HOMO-LUMO эВ
(Ia)	-7,04	-1,36	5,68
(Ib)	-8,36	-1,29	7,07
(IIa)	-8,30	-1,43	6,87
(IIb)	-8,38	-1,30	7,08

Из представленных в таблице результатов можно сделать вывод о том, что рассмотренные соединения при температуре 298,18 К, вероятно, являются диэлектриками. Изучение сегнетоэлектрических свойств для описанных соединений является задачей для дальнейших исследований.