

**МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ДИМЕРЕ
п-Н-БУТИЛОКСИБЕНЗИЛИДЕН-п`-ТОЛУИДИНА:
ТЕРМИНАЛЬНАЯ КОНФИГУРАЦИЯ**

Т.Г. Волкова, И.О. Стерликова, Н.А. Магдалинова, А.А. Сулова

Ивановский государственный университет

Межмолекулярные взаимодействия влияют не только на механизм протекания химических реакций, но и определяют существование конденсированных фаз и их свойства. Особое место занимают анизотропно-молекулярные системы, например нематические жидкие кристаллы (НЖК), для которых характерна специфическая локализация межмолекулярных взаимодействий.

Объектом данного исследования является п-н-бутилоксибензилиден-п`-толуидин, относящийся к классу НЖК.

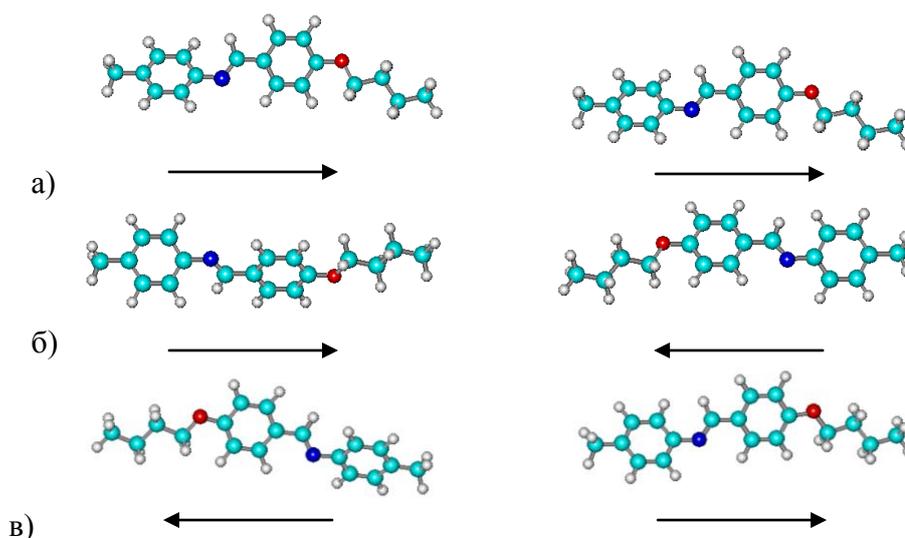


Рис. Модели димеров в терминальной конфигурации (стрелками указано направление дипольных моментов).

Оптимизация геометрии исследуемых молекулярных систем и декомпозиция энергии взаимодействия в димерах по методу Моракумы проводилась с использованием метода HF/6-31 ++G** (GAMESS).

Определены составляющие, вносящие основной вклад в энергию взаимодействия двух молекул п-н-бутилоксибензилиден-п`-толуидина в рассматриваемых моделях.

Работа выполнена в рамках Программы «Развитие научного потенциала высшей школы», проект РНП.2.2.1.1.2820.