

## ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА КОНФОРМАЦИЮ МОЛЕКУЛЫ ДИФЕНИЛА

Шовкопляс О.А.<sup>1</sup>, *ст. преп.*; Лопаткин Ю.М.<sup>1</sup>, *профессор*;

Кондратенко П.А.<sup>2</sup>, *профессор*

<sup>1</sup>Сумский государственный университет

<sup>2</sup>Национальный авиационный университет, г. Киев

В продолжение работы [1] исследована потенциальная поверхность одной из замещённых молекул дифенила при различной величине электрического поля ( $-0,025 \leq E \leq 0,025$  а.е.), направленного вдоль основной оси молекулы, и углах поворота фенильных колец относительно друг друга ( $20^\circ \leq \phi \leq 160^\circ$ ).

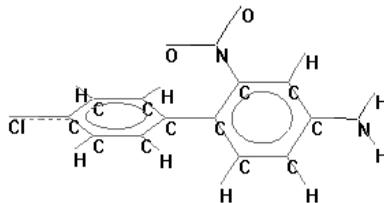
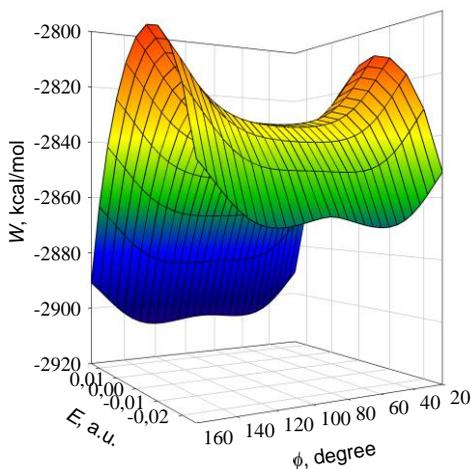


Рисунок 1 – Влияние электрического поля на потенциальную поверхность молекулы при разных углах поворота.

При изменении полярности продольного поля дипольный момент молекулы изменяется более, чем на  $30 D$ .

Поперечное электрическое поле приводит к смещению минимума энергии на величину угла до  $50^\circ$ .

1. А.В. Дмитриев, А.Ю. Голубев, Ю.М. Лопаткин, П.А. Кондратенко, ФЕЕ-2011, 36 (Суми: СумДУ: 2011).