**Расчёт дипольных моментов и поляризуемостей ряда хромофоров
для моделирования сольватохромизма в органических растворителях**

***Бурибаев Р.А.1, Иоффе И.Н.1****Студент, 4 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: buribaevr@mail.ru*

Сольватохромизм – явление сдвига полос поглощения и/или испускания системы в конденсированных средах в зависимости от их диэлектрических свойств. Непосредственное расчетное описание сольватохромных эффектов может быть основано на включении в рассмотрение растворителя. Для органических растворителей, не вступающих в специфические взаимодействия с растворенными молекулами, стандартным подходом является использование континуальных моделей поляризуемой диэлектрической среды, таких как PCM. Однако использование подобных моделей в сочетании с невариационными квантово-химическими методами сопряжено с известными трудностями, проистекающими из невозможности самосогласованного описания молекулы вместе с откликом среды. Эта проблема особенно значима для электроновозбужденных состояний, вклад которых в сольватохромные эффекты часто является преобладающим.

Модельные оценки величин сольватохромных эффектов могут также быть получены с помощью подхода самосогласованного реакционного поля Онзагера, где растворитель также рассматривается как поляризуемая диэлектрическая среда. Однако в отличие от численного расчета поляризации среды молекулярным зарядовым распределением нетривиальной формы, аппроксимация молекулы сферической полостью с заключенной в ней системой мультиполей позволяет получить несложные аналитические оценки, требующие знания лишь значимых мультипольных моментов (а также, возможно, поляризуемости) тех электронных состояний, которые определяют спектральный переход. Расчет этих величин сравнительно прост, и это достоинство может отчасти компенсировать недостатки, порождаемые упрощенной аппроксимацией формы молекулы.

В настоящей работе осуществлен расчет дипольных и квадрупольных моментов, а также поляризуемостей для основного и первого возбужденного синглетного состояния ряда модельных органических хромофоров. Для расчета была использована многоконфигурационнаая квазивырожденная теория возмущений XMCQDPT2. Исследовано влияние выбора активного пространства на рассчитываемые характеристики возбужденных состояний. Для проверки степени применимости модели Онзагера эти расчетные оценки сопоставлены с полученными нашими коллегами экспериментальными спектрами в различных растворителях.