**Энергетические ландшафты и конформационная чувствительность спиралеобразных олигомеров**

***Сторожева К.Д.1,2, Маркина А.А.2, Аветисов В.А.2***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*2 Институт химической физики имени Н. Н. Семёнова РАН, Москва, Россия*

*E-mail: ksusto1903@gmail.com*

За последнее десятилетие органические полимеры значительно продвинули науку о материалах благодаря π-стэкинг-взаимодействиям. Они находят широкое применение в наноэлектронике, однако уступают неорганическим аналогам по стабильности и эффективности. Это мотивирует проводить теоретические исследования для поиска новых структур, свойств и более детального изучения подобных систем. Особый интерес представляют спиральные олигомеры, проявляющие бистабильное поведение [1, 3]. Пружины могут выступать в качестве логических элементов [2] или молекулярных машин [5]. Их способность образовывать 𝛑-стэкинг-взаимодействия позволяет создавать подобные сложные функциональные системы.

Теоретическое исследование 𝛑-стэкинг взаимодействий позволяет описывать поведение сложных молекулярных систем, управлять стабилизацией материалов, контролировать электронные и оптические свойства устройств, увеличивать избирательность взаимодействий между молекулами [2]. В данной работе с помощью метода DFT был произведен расчет 𝛑-стэкинг взаимодействий, были исследованы энергетические ландшафты фрагментов спиралеобразных олигомеров. Основные расчеты направлены на изучение механизмов изменения жесткости пружин, в частности влияние окружающей среды на систему. Учет растворителя произведен с помощью модели сольватации IEFPCM.

В результате построены энергетические ландшафты фрагментов пружин, на основе которых определены оптимальные конфигурации системы и влияние различных растворителей на её структуру и стабильность с точки зрения квантовой химии. Установлено, что диэлектрическая проницаемость среды оказывает значительное влияние на изменение энергетического ландшафта, что позволяет регулировать жёсткость пружин. Представлена методология отбора растворителей для спиралеобразных олигомеров, а также выявлены факторы, определяющие их стабильность и механические свойства. Полученные данные могут быть использованы для целенаправленного дизайна новых функциональных материалов с регулируемыми характеристиками.

**Литература**

1. Astakhov A. M. [et al.]. Spontaneous Vibrations and Stochastic Resonance of Short Oligomeric Springs // Nanomaterials, 2024, 14(1), 41
2. Huber R. G. [et al.]. Heteroaromatic π-Stacking Energy Landscapes // J. Chem. Inf. Model. 2014, 54, 5, 1371–1379
3. Peschot, A.; Qian, C.; Liu, T.-J.K. Nanoelectromechanical Switches for Low-Power Digital Computing. // Micromachines 2015, 6, 1046-1065
4. Sahu H. [et al.]. Structure and optoelectronic properties of helical pyridine–furan, pyridine–pyrrole and pyridine–thiophene oligomers. // Phys. Chem. Chem. Phys., 2015, 17, 20647-20657
5. Zhang L., Marcos V., Leigh D.A. Molecular machines with bio-inspired mechanisms. // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 2018, 115 (38) 9397-9404.