

Конформационные преобразования молекулы мероцианина

Коваленко О.А.¹, студ.; Лопаткин Ю.М.¹, проф.;
Кондратенко П.А.², проф.

¹ Сумский государственный университет, г. Сумы

² Национальный авиационный университет, г. Киев

Одним из наиболее важных и интересных классов органических фотохромных соединений, материалы на основе которых могут найти и находят широкое применение в развитии технологий хранения и воспроизведения информации, производстве светофильтров с модулируемым пропусканием, изготовлении фотохромных линз и различных компонентов молекулярной электроники [1] являются спиропираны и, в частности, мероцианины (рис. 1).

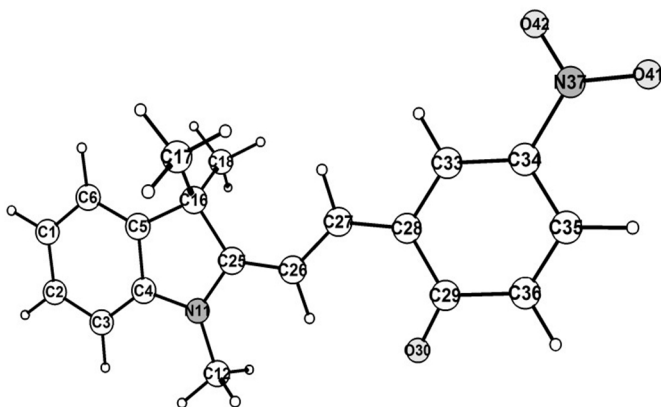


Рисунок 1 –
Общий вид
молекулы ме-
роцианина.

Расчёт и анализ потенциальных барьеров при исследовании изомеров «открытой» формы молекулы мероцианина показали, что открытая форма мероцианина имеет цвиттер-ионное стерически наиболее выгодное транс-цисоидное строение.

Также энергетически выгоден изомер относительно связи C(27)-C(28). Высота потенциального барьера при повороте относительно связи C(26)-C(27) делает существование изомера невозможным.

1. М.Б. Лукьянова, И.В. Ожогин и др., Хим. науки. №10, 1968 (2013).