

Потенциальная 3D-поверхность молекулы спиропирана

Коваленко О.А., *аспірант*; Гусев В., *студент*;
Лопаткин Ю.М., *професор*; Кондратенко П.А., *професор*
Сумский государственный университет, г. Сумы
Национальный авиационный университет, г. Киев

Фотохромизм – процесс обратимого изменения спектра поглощения, индуцированного излучением различных длин волн. Материалы, проявляющие фотохромные свойства, находят широкое применение в молекулярной электронике, в оптических носителях информации и сенсорах. Среди наиболее важных классов органических фотохромных соединений являются спиропираны.

Фотохромные свойства спиропирана обусловлены фотоиндуцированным разрывом связи $C_{\text{спиро}}-O$ и переходом в открытую форму молекулы – мероцианин. Этот процесс является обратимым.

В данной работе был исследован процесс перехода от мероцианина к спиропирану и обосновано присоединение атома О к атому $C_{\text{спиро}}$, то есть возвращение молекулы в исходное состояние. Для этого была построена потенциальная 3D-поверхность молекулы спиропирана.

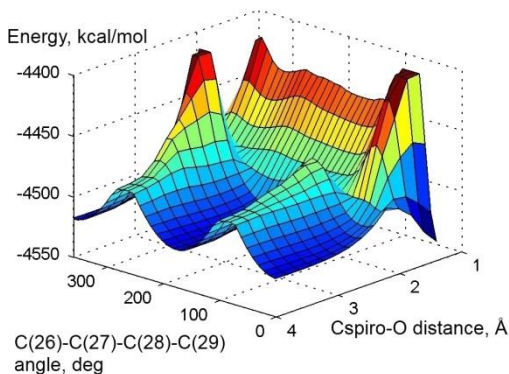


Рис.1. Потенциальная 3D-поверхность молекулы спиропирана.

Из рис.1 видно, что в молекуле возможно образование потенциальных своего рода "энергетических желобов", которые приводят к однозначному результату, а именно, к образованию связи между вполне определёнными атомами.