

Энергетическая структура молекулы спиропирана

Коваленко О.А., *аспирант*; Лопаткин Ю.М., *профессор*;
Кондратенко П.А., *профессор*
Сумский государственный университет, г. Сумы
Национальный авиационный университет, г. Киев

Предполагается, что компьютеры будущего будут использовать элементную базу на молекулярном уровне. Поэтому, в последние годы большое внимание уделяется фотохромным материалам, которые подвергаются светоиндуцированной трансформации между двумя формами, имеющими различные спектры поглощения. Среди наиболее важных классов органических фотохромных соединений являются спиропираны и их аналоги [1].

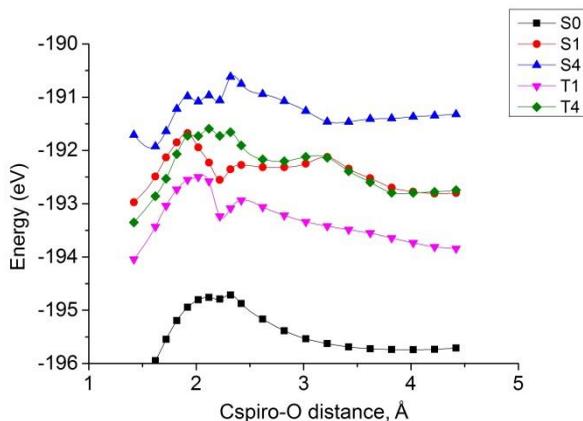


Рисунок 1 –
Энергетическая
структура
спиропирана.

В данной работе выполнен расчет энергетической структуры основного S_0 и низших возбужденных состояний молекулы спиропирана (рис.1). Анализ энергетической структуры позволяет предположить механизм фотохимических реакций в молекуле спиропирана, согласно которому реакция протекает не в основном, а с задействованием низколежащих возбужденных состояний.

1. Yoichi Kodama, Takakazu Nakabayashi, et al., *J. Phys. Chem.* **104**, 11478 (2000).