

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,  
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

**ФЕЕ :: 2017**

**МАТЕРІАЛИ  
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 17–21 квітня 2017 року)



Суми  
Сумський державний університет  
2017

**Результат взаємодії молекули аміаку з ПМБ**

Малашенко А.Г.<sup>1</sup>, *аспірант*; Коваль С.В.<sup>1</sup>, *студент*;  
Кондратенко П.О.<sup>2</sup>, *професор*; Лопаткін Ю.М.<sup>1</sup>, *професор*

<sup>1</sup> Сумський державний університет, м. Суми

<sup>2</sup> Національний авіаційний університет, м. Київ

Для створення датчиків присутності шкідливих газів необхідно задовольнити певним початковим умовам. Перш за все, датчик повинен досить швидко реагувати на присутність шкідливого газу і швидко релаксувати в початковий стан при видаленні цього газу. Перша вимога легко реалізується для тонких полімерних шарів, які містять поліметинний барвник (ПМБ). Для реалізації другої вимоги, необхідно, щоб взаємодія між молекулами газу, наприклад, аміаку і ПМБ було досить слабкою. Цій вимозі може задовольнити утворення водневих зв'язків між зазначеними молекулами.

Введення аміаку у взаємодію з ПМБ, як правило, призводило до зміщення довгохвильової смуги поглинання. Процедура оптимізації геометричної структури комплексу переводила молекулу аміаку до атому водню, пов'язаного з атомом азоту. Таких положень два. Перше положення пов'язане з групою NH, ближньої до замісника  $R_2 = OCF_3$ ,  $OCCl_3$ ,  $COOH$ ,  $NO_2$ , а друге – з групою NH, ближньої до  $R_1 = H$ . Структура комплексу свідчить на користь того, що комплекс утворився завдяки водневому зв'язку між компонентами. Порівняння результатів дослідження для обраних молекул ПМБ показало, що кращий спектральний ефект можна отримати тільки для другого положення молекули аміаку. Енергія зв'язку  $NH_3$  з ПМБ в другому положенні більше на 0,02 eV, ніж в першому. Це дозволяє оцінити співвідношення концентрацій комплексу II типу і комплексу типу I, яке виявилось рівним 2,4. Отже, в динамічно рівноважному стані 70% комплексів будуть представлені комплексом II типу.

Кореляції між енергією водневого зв'язку і величиною зміщення смуги поглинання не виявилось, оскільки смуга поглинання формується  $\pi$ -електронною системою, а водневий зв'язок –  $\sigma$ -електронною системою.

Такого типу датчик газу буде працювати в діапазоні концентрацій аміаку, що не перевищує концентрацію ПМБ в полімерному шарі.