

Исследование фотохромизма спиропиранов

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

Фотохромизм – процесс обратимого изменения спектра поглощения вещества под действием видимого света или ультрафиолетового излучения. Одним из наиболее перспективных и исследуемых классов органических соединений, проявляющих фотохромные свойства, являются спиропираны. Фотохромные свойства спиропиранов обусловлены фотоинициируемым разрывом связи $C_{\text{спиро}}-O$, что приводит к открытой мероцианиновой форме.

Целью данной работы было исследование зависимости энергии связи электронов в молекуле от длины диссоциируемой связи.

Рассматривалась молекула спиропирана индолинового ряда, а также мероцианин – продукт его фотохимического преобразования. В ходе исследования сканирование молекулы, фиксация связи, геометрическая оптимизация и расчёты производились с использованием комплексов полуэмпирических программ *MOPAC* и *HyperChem 8*.

Зависимость энергии электронной системы E от длины $C-O$ -связи d представлена на рис. 1, из которой следует, что фотоиндуцированная форма молекулы является неустойчивой.

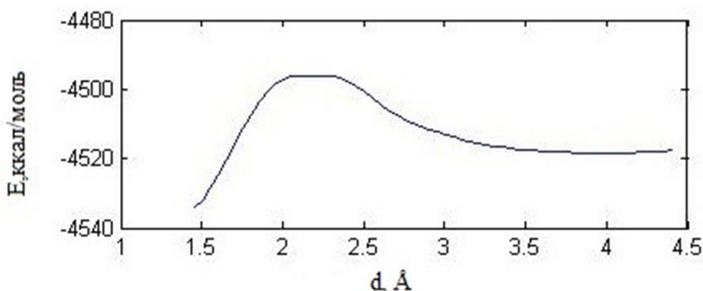


Рисунок 1 – Маршрут фотохромизма молекулы мероцианина.