

МЕХАНИЗМ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ЗАТВОРА НА ОСНОВЕ СПИРОПИРАНА

Дмитриев А.В., *аспирант*; Кондратенко П.А.* , *профессор*;
Лопаткин Ю.М., *профессор*;

* Национальный авиационный университет, г.Киев

В данной работе подтверждается, что фотохимические свойства спиропиранов во многом обусловлены тем, что уже в основном состоянии разрываемая при фотовозбуждении связь $C_{\text{спиро}}-O$ ослаблена. Кроме того, с использованием полуэмпирических методов проведены расчёты потенциальной поверхности спиропирана при конформационных преобразованиях молекулы.

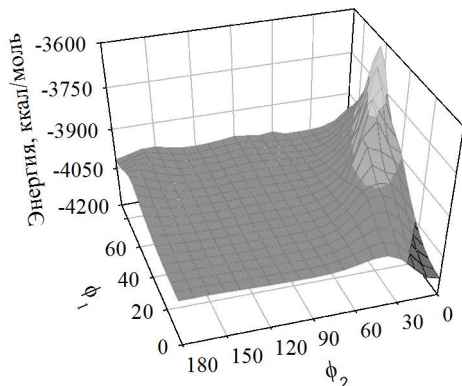


Рисунок 1 – Потенциальная поверхность молекулы спиропирана при конформационных преобразованиях

Прослежена траектория процесса перехода между двумя стабильными состояниями. Получены значения энергии переходов между состояниями и соответствующих длин волн, активирующих эти переходы. Свойство спиропиранов совершать под действием фотонов обратимые переходы между двумя стабильными состояниями может оказаться полезным также для молетроники, где они могут выступать в роли переключателей. На основании полученных результатов предлагается фактически механизм переключения молекулярного затвора на основе молекулы спиропирана.