

## САМООРГАНИЗАЦИЯ ДИАРИЛЭТЕНОВ – МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

**Е.А. Карпузова, М.Ф. Бобров, Г.В. Попова**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
г. Москва, Россия  
e-mail: karpouzova@rambler.ru*

Диарилэтены (ДАЭ) - одни из самых востребованных фотохромов последнего десятилетия. К их уникальным свойствам можно отнести изменение окрашивания под действием ионизирующего излучения с обратимостью цвета при УФ облучении. На основе этого явления реализуется разработка материала для мультифункционального детекторного устройства, способного регистрировать  $\gamma$ -излучение при экологическом мониторинге как жидких, так и газообразных сред. ДАЭ были использованы как сенсорные элементы, закрепленные в наноразмерных порах, активированных водородом матриц карбида кремния, с последующим покрытием фотоактивной кремнийорганической пленкой, чувствительной к ионам тяжелых металлов. Предварительно было проведено компьютерное моделирование самоорганизации ДАЭ в ограниченном объеме, как при самопроизвольном, так и при индуцированном процессе - в данном случае при наличии внешнего водородного связывания. Соотносящихся публикаций нами обнаружено не было.

Неэмпирический расчет B3LYP/6-31G(d,p) с последующим квантово-топологическим анализом выявил в молекуле ДАЭ образование цикла за счет нековалентного взаимодействия фтор - водород. Рассчитаны критические точки связи нековалентных взаимодействий в ансамбле из 2-х молекул ДАЭ. Рассмотрены наиболее энергетически выгодные варианты организации ансамблей из 2-х и 4-х молекул ДАЭ. Проведена оценка возможности молекулярных кластеров ДАЭ к водородному связыванию с активированными водородом матрицами карбида кремния.

В качестве матриц использовали таблетки SiC диаметром до 8 мм, толщиной до 3 мм, которые обладают устойчивостью к  $\gamma$ -облучению. Исследования поверхности композита при помощи атомно-силовой микроскопии показали, что образцы обладали в среднем размерами пор до 10 нм. Методом пропитки получали слабоокрашенные таблетки SiC, модифицированные ДАЭ. Приводятся данные РСА, АСМ образцов до и после введения хромофоров (содержание до 12%), а также данные электронных спектров до и после облучения. Предлагается вероятная корреляция теоретических и практических результатов.

Исследования проводятся при финансовой поддержке Проектов: МНТЦ (№ 3891), Программы Рособразования «Развитие Научного потенциала Высшей Школы», (№ 325), и Программы Роснауки «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (Госконтракт № 02.740.11.0142).