МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СЛОИ ТЕТРАФТОРБЕНЗОДИ (1,2,5-ТИАДИАЗОЛО)СУБПОРФИРАЗИНАТОБОР(III) ХЛОРИДА НА ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ВОДА-ВОЗДУХ

Никитин К. С.

Ивановский государственный химико-технологический университет, [www.isuct.ru](http://www.isuct.ru), nikitin\_kost@mail.ru

Научный руководитель: д.ф.-м.н., в.н.с. Майорова Л. А. (ИГХТУ)

Новые порфиразиноиды с сокращенным макроциклом будут, как ожидается, обладать повышенными электроноакцепторными свойствами и проводимостью, что важно для их применения в органической электронике, например, в безфуллереновых фотовольтаических ячейках. Кроме того, они имеют дополнительные периферические центры координации, которые могут быть использованы для получения новых соединений [1].

(б)

(а)

Задача данной работы – получение наноструктурированных плавающих монослоев тетрафторбензоди(1,2,5-тиадиазоло)субпорфи-разинатобор(III)хлорида (BClSubPc(SN2)2BzF4). Синтез соединения выполнен М. Хамдуш под руководством Стужина П. А. Плавающие слои формировали на установке “NT-MDT” (Зеле-ноград, Россия) из раствора данного соединения в CH2Cl2 при скорости сжатия слоя v=2.3 см2∙мин-1 и исходных степенях покрытия поверхности (*cface*) 10% и 20%. Структура слоев анализировалась в рамках модели нанострук-турированного монослоя с помощью количественного метода анализа изотерм сжатия [2]. Модельные значения величин площадей проекций молекул субпорфиразина (Aproj*(face)*= 1 нм2 и A*proj(edge)*= 0.5 нм2) и их плотнейших упаковок (A*pac(face)*=1.2 нм2 и A*pac(edge)*= 0.6 нм2) были рассчитаны в пакете программ HyperChemProfessional (метод расчётов АМ1).

Рис.1.Модель молекулы (а) и *π-A(1,2)* и *πA-π (1’,2’)* изотермы BClSubPc(SN2)2BzF4, полученные при С=2.4∙10-4 моль/л, v=2.3 cм2/мин и различных исходных степенях покрытия поверхности c*face*= 10 (1,1’) и 20 (2,2’)% (б).

Показано, что при исходной степени покрытия поверхности с*face*=10% (рассчитана при расположении молекул вдоль поверхности воды) структурными элементами монослоя являются двумерные М-наноагрегаты с face-on, а при *сface*=20% - с edge-on (под углом к поверхности) расположением молекул в них. Основные характеристики face-on монослоя: среднее число молекул в агрегате n=13; площадь, приходящаяся на одну молекулу в агрегате Аmol(face)=1.24 нм2, интервал существования по давлению π от 0.1 мН/м до 1.7 мН/м, содержание воды в М-агрегатах (в расчете на одну молекулу) win-M=19.2%, площадь агрегата Saggr=15.6 нм2, диаметр агрегата Daggr=4.5 нм, степень покрытия поверхности агрегатами и расстояние между наноагрегатами в начале стабильного монослоевого состояния ci-aggr=35% и di=3.1 нм, соответственно. Основные характеристики edge-on монослоя: n=44; Аmol(edge)=0.65 нм2, интервал существования по давлению π от 0.2 мН/м до 1.4 мН/м, win-M=22.6%, Saggr=28.7 нм2, Daggr=6.1 нм, ci-aggr=46% и di=2.8 нм.

1. Hamdoush M., Ivanova S. S., Pakhomov G. L., Stuzhin P. A. Macroheterocycles. 2016. V. 9(3). P. 230.
2. Valkova L., Zyablov S., Erokhim V., Koifman O. J. Porphyrins and Phthalocyanines. 2010. V. 14. P. 513.

*Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ 16-03-01048-а и Государственного задания Министерства образования и науки РФ.*