

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
4,4'-ДИМЕТИЛ-6,6'-ДИХЛОРОТИОИНДИГО***Полозов М.А.^(1,2), Собин С.Э.⁽²⁾, Жеребцов Д.А.⁽¹⁾, Пахомов С.П.⁽²⁾,**Полозова В.В.^(1,2), Ходжамуратов Р.К.⁽²⁾*⁽¹⁾ Южно-Уральский государственный университет

454080, Челябинск, пр. Ленина, д. 76

⁽²⁾ «Балаковоатомтехэнерго» – балаковский филиал АО «Атомтехэнерго»

413866, Саратовская область, Балаковский район,

Балаковская АЭС, стройбаза № 145, а/я 623

Структуры низкотемпературного красной полиморфной формы (пространственная группа P-1) и высокотемпературного черной полиморфной формы (пространственная группа P21/c) 4,4'-диметил-6,6'-дихлортиоиндиго (Pigment Red 181) (рис. 1) были получены из монокристаллов, полученных сублимацией. Структурный мотив происходит от укладки плоских молекул, расположенных в результате π - π -взаимодействия и нековалентных взаимодействий в слоях.

Температура плавления красной полиформной формы **1** составляет около 390 °С. При температуре около 350 °С кристаллы черной полиморфной формы **2** начинают сублимироваться, теряя в весе около 45 мас.% до температуры 415 °С. Теоретическая потеря массы из-за удаления HCl составила 18,54 мас.%. После интервала относительно низкой потери массы 415-500 °С при дальнейшем нагревании до 1000 °С (в атмосфере аргона) он продолжил терять вес. Теоретическая потеря массы из-за удаления H₂O составила 9,16 мас.% (рис. 2).

Электропроводность красного полиморфа подчиняется скачкообразному механизму транспорта электронов между молекулами. Край оптического поглощения красного полиморфа соответствует запрещенной зоне 2,08 эВ.

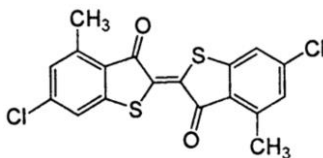
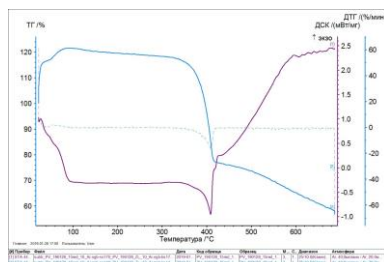


Рис. 1. Структурная формула 4,4'-диметил-6,6'-дихлортиоиндиго

Рис. 2. Термогравиметрический анализ красного полиморфа **2** и черного полиморфа **1**