

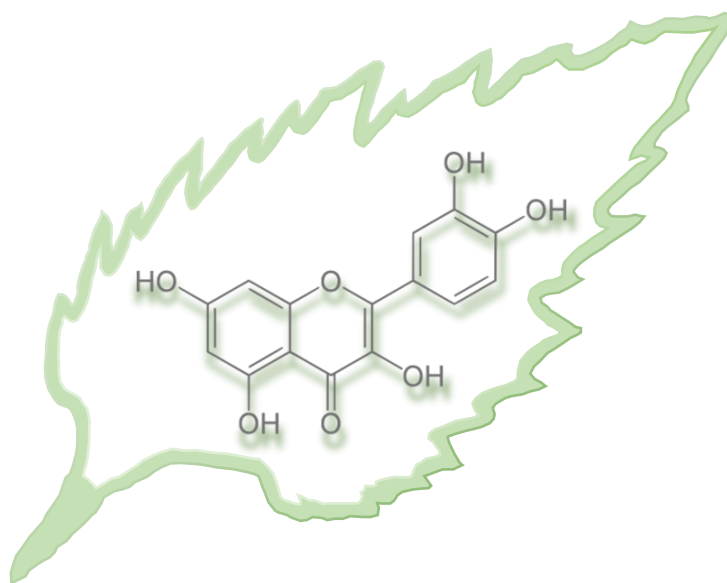
**ИНСТИТУТ ФИЗИОЛОГИИ РАСТЕНИЙ
им. К.А.ТИМИРЯЗЕВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**



МАТЕРИАЛЫ

**XI МЕЖДУНАРОДНОГО СИМПОЗИУМА
ФЕНОЛЬНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ:
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ
АСПЕКТЫ**

Москва, 11 – 15 апреля 2022 года



Москва, 2022 г.

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОЛА

Бочарникова Е.Н., Чайковская О.Н., Базыль О.К.

ФГАОУ ВО Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск
bocharnikova.2010@mail.ru

Изучение фенолов оптическими и квантово-химическими методами актуально, в связи с высокой фармакологической активностью этих соединений. Целью работы является изучение спектрально-люминесцентных свойств фенола, *n*-крезола и бисфенола А методами электронной спектроскопии и квантовой химии. Спектрально-люминесцентные характеристики растворов зарегистрированы на спектрофлуориметре СМ 2203 («SOLAR», Беларусь). Квантово-химические расчеты выполнены при помощи пакета программ, основанного на полуэмпирическом методе ЧПДП/С[1].

Анализ спектров поглощения и флуоресценции производных фенола в неполярном растворителе (гексан) показал, что фенол имеет характерное структурное поглощение в УФ-области спектра. В электронном спектре поглощения фенола выделяют две отчетливо выраженные полосы поглощения с максимумами на 37000 и 47400 см⁻¹. При переходе от неполярного к полярному растворителю или при введении СН₃-группы (*n*-крезол) структурность длинноволновой полосы пропадает. Полосы флуоресценции ВРА, *n*-крезола и фенола по энергии отличаются незначительно.

Согласно квантово-химическим расчетам [2], поглощение фенола и *n*-крезола в области 35000–36000 см⁻¹ вызвано одним электронным переходом S₀→S₁ ππ*-типа, поэтому наблюдаемая структурность электронной полосы – это проявление ее колебательной структуры. Введение в бензольное кольцо группы СН₃ приводит к уменьшению рассчитанной энергии электронных переходов, батохромному сдвигу максимумов полос в длинноволновой и средней областях спектра и увеличению интенсивности длинноволновой полосы поглощения. В электронных полосах поглощения *n*-крезола положение вибронных уровней проявляется в виде двух перегибов в области 36000 и 46000 см⁻¹. Что касается электронных переходов фенола и *n*-крезола в области спектра ~ 50000 см⁻¹, то они локализованы только на атомах углерода ароматического кольца молекул. Следствием неплоского строения исследуемых молекул является смешанный характер орбитальной природы возбужденных состояний. Заметные различия в квантовых выходах флуоресценции исследуемых соединений вызваны разницей в геометрии замещенных молекул относительно геометрии фенола. Неплоская геометрия *n*-крезола и ВРА [3] приводит к росту синглет-триплетной конверсии в этих молекулах по отношению к плоскому фенолу и, как следствие, к уменьшению квантового выхода флуоресценции. Также с помощью квантово-химических расчетов было изучено изменение спектрально-люминесцентных свойств при возбуждении солнечным светом. Показано, что наличие метильных групп в замещенных фенолах в меньшей степени меняют спектры поглощения и флуоресценции, но заметно меняют эффективность синглет-триплетной конверсии и механизм фотолиза.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Минобрнауки России (проект № 0721-2020-0033).

Литература:

1. Артюхов В. Я., Галеева А. И. // Изв. вузов. Физика. – 1986. – Т. 29. – № 11. – С. 96–100.
2. Чайковская О.Н., Базыль О.К., Бочарникова Е.Н. // Изв. вузов. Физика. – 2021. – Т. 64. – № 8. – С. 3–8.
3. Bocharnikova E.N., Tchaikovskaya O.N., Bazyl O.K., et al. // Adv. Quantum Chem. – 2020. – V. 81. – P. 191–217.