

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНКУРЕНЦИИ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ И ФОТОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Артюхов В.Я., Базыль О.К., Майер Г.В.

*Томский государственный университет, 634050, Томск, проспект Ленина 36,
e-mail: victor.art@rambler.ru*

А.Н. Теренин объединил в фотонике органических соединений взаимосвязанные фотофизические и фотохимические процессы¹. Нами была поставлена задача разработки квантово-химической модели изучения конкуренции фотофизических и фотохимических процессов при диссоциации одиночных химических связей в возбужденной молекуле. Для изучения реакции фоторазрыва связей был разработан подход, основные положения которого формулируются следующим образом².

1. Разрыв химической связи может происходить только с участием σ -электронов, т.е. преимущественно в состояниях $\sigma\sigma^*$ -, $\sigma\pi^*$ -, $\pi\sigma^*$ -типа.

2. Вероятность разрыва данной связи в данном возбужденном состоянии определяется степенью локализации энергии электронного возбуждения на этой связи, а также снижением прочности разрываемой связи в фотодиссоциативном состоянии. Прочность (энергия) связи полагалась пропорциональной электронной плотности (заселенности) на связи.

3. Фотодиссоциативному состоянию соответствует потенциальная кривая отталкивания, основному состоянию - потенциал Морзе.

4. В отсутствие возможности прямого возбуждения фотодиссоциативного состояния должна существовать возможность заселения его посредством внутримолекулярных фотофизических процессов или путем многоступенчатого поглощения.

В сообщении представлены возможности предложенного квантово-химического подхода для исследования фотохимических свойств молекул.

Результаты квантово-химических расчетов и основанный на них подход к исследованию фоторазрыва химических связей в конкретных многоатомных соединениях позволили определить орбитальную природу, энергию и вероятность заселения фотодиссоциативного состояния, механизм первичной стадии фотореакции, роль протондонорной среды.

Литература

1. Теренин А.Н. Фотоника молекул красителей. – Ленинград: Наука, 1967. - 616 с.
2. Артюхов В.Я. Базыль О.К., Майер Г.В. Химия высоких энергий, 2006, 40, № 3, 195.

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № 4.6027.2017/8.9.