

МЕТОДИКА ФИТИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ О СВЕРХБЫСТРОЙ ДИНАМИКЕ ФОТОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ВЯЗКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Феськов С.В.

*Волгоградский государственный университет,
400062, Волгоград, Университетский проспект 100,
e-mail: serguei.feskov@volsu.ru*

Интерес к исследованиям фотоиндуцированного межмолекулярного переноса заряда (ФММПЗ) в вязких средах обусловлен распространенностью этой реакции в живой природе, их ролью в таких ключевых для жизни процессах, как фотосинтез и дыхание. Объем экспериментальных данных о спектральной динамике фотосистем растет, однако возможности интерпретации этих данных остаются крайне ограниченными. В большинстве случаев динамика спектров люминесценции и поглощения в неравновесной фотосистеме свидетельствует о происходящих процессах косвенно, и требует дополнительной «расшифровки». Одним из способов расшифровки является фитирование результатов натурального эксперимента и численных расчетов, позволяющее определить неизвестные энергетические и динамические параметры фотосистемы, восстановить полную картину реакции в конкретных случаях.¹⁻³

Основным результатом данного исследования является новая методика фитирования ФММПЗ, позволяющая получить важнейшие энергетические характеристики реакции фотоиндуцированного разделения зарядов (ФРЗ), а именно, энергии реорганизации среды и внутримолекулярных колебательных степеней свободы реагентов, энергию связи состояний реагентов и продуктов, свободную энергию ФРЗ и др. Предлагаемая методика основана на анализе кинетики разделения зарядов на начальной стадии реакции длительностью в несколько пикосекунд, когда реагенты могут считаться неподвижными (статический режим). Применение этого подхода позволяет избавиться от неоднозначности, связанной с определением параметров ФРЗ, и служит отправной точкой для фитирования кинетики последующих стадий неравновесной фотореакции.

Литература

1. Gladkikh V., Burshtein A.I., Angulo G. et al. J. Phys. Chem. A, 2004, 108, 6667.
2. Feskov S.V., Mikhailova V.A., Ivanov A.I. J. Photochem. Photobiol. C, 2016, 29, 48.
3. Feskov S.V., Kichigina A.O., Ivanov A.I. J. Phys. Chem. A, 2011, 115, 1462.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Волгоградской области, проект 19-47-340020.