

PACS numbers: 33.20.Ea + 33.20.Kf + 33.20.Tr

ЕЛЕКТРОННО-КОЛИВАЛЬНА СТРУКТУРА СПЕКТРІВ ПОГЛИНАННЯ РЕЗАЗУРИНУ

П.О. Кондратенко¹, Ю.М. Лопаткін², Т.М. Сакун¹

¹ Національний авіаційний університет,
пр. Космонавта Комарова, 1, 03680, Київ, Україна
E-mail: pkondrat@ukr.net

² Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2, 40007, Суми, Україна
E-mail: yu.lopatkin@gmail.com

В роботі проведені експериментальні і теоретичні дослідження спектральних характеристик молекули резазурину. Порівняння результатів експериментальних і теоретичних досліджень дозволило виявити, що спектр поглинання у видимій області формується квантовими переходами між електронними станами молекули, а також електронно-коливальною взаємодією. В роботі запропоновано метод отримання теоретичних результатів з контролем симетрії молекули. Це дозволило отримати повністю узгоджені теоретичні і експериментальні результати як за положенням так і за величиною коефіцієнта екстинкції і виявити природу всіх квантових переходів і коливальних частот. Показано, що смуги поглинання у видимій області спектра формуються за участю повносиметричних коливань молекули, серед яких найбільшою участю виділяються коливання з частотами в області 478 см^{-1} , 1467 см^{-1} , а також групою коливальних частот в області $1800\text{-}2000\text{ см}^{-1}$, які виявились меншими за знайдені теоретично для основного стану молекули, оскільки при збудженні молекули ступінь розпушування зв'язків, відповідальних за вказані коливання, зростає.

Ключові слова: ЕЛЕКТРОННО-КОЛИВАЛЬНА ВЗАЄМОДІЯ, ЕЛЕКТРОННІ СТАНИ, МОЛЕКУЛА РЕЗАЗУРИНУ, КВАНТОВІ ПЕРЕХОДИ, СИМЕТРІЯ МОЛЕКУЛИ.

(Одержано 16.05.2011, у відредагованій формі – 30.10.2011,
опубліковано online – 05.11.2011)

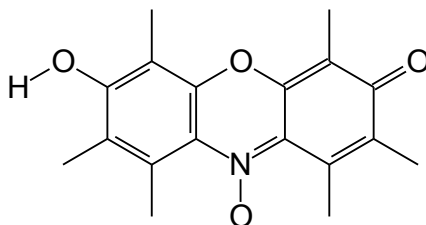
1. ВСТУП

Резазурин є представником класу оксазинових барвників, похідним феноксазину ($\text{C}_{12}\text{O}_4\text{NH}_7$). Ця сполука є перспективною для різних призначень, зокрема, для оптичного запису інформації [1-3], для дослідження процесів релаксації молекул з високозбудженого стану, фотогенерації носіїв заряду в твердих полімерних розчинах, фотохімічних перетворень тощо [4-7].

Аналіз літературних даних показав, що на даний час відомий загальний вигляд спектрів поглинання та флуоресценції резазурину в різних розчинах [1], одно- та двоквантові фотохімічні процеси [2], процеси релаксації молекул з високозбуджених станів [4] тощо. Залишаються невиясненими деталі спектра поглинання і, зокрема, електронно-коливальна взаємодія в молекулах резазурину.

2. МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

В роботі проведені теоретичні і експериментальні дослідження спектроскопічних (ІЧ, видима і УФ області спектру) властивостей розчинів резазурину:



У зв'язку з викладеним важливо отримати детальну інформацію про природу смуг поглинання у видимій, ультрафіолетовій та інфрачервоній областях спектра, а також про електронно-коливальну взаємодію в молекулах резазурину. При цьому вирішити методичні проблеми, від яких залежить надійність отриманих результатів.

Для реєстрації спектрів поглинання використовувався двопроменевий спектрофотометр SPECORD 210. Як розчинник використовувався ацетон, який внаслідок відсутності водневої взаємодії найменше з усіх полярних розчинників впливає на вигляд смуг поглинання [1].

Спектри поглинання відображались в координатах «екстинкція – частота». Такий вигляд спектра дозволяв проводити його розкладання на елементарні смуги в припущенні, що вони описуються кривими Гауса. Для розкладання спектру поглинання на елементарні смуги ми використовували дві різні програми, одна з яких є в оболонці програми Origin 6.0, а друга оригінальна.

Розрахунки електронної та енергетичної структури, відповідальної за спектри поглинання як у видимій так і в інфрачервоній областях, здійснювали з використанням пакета програм HyperChem 7.0. В цьому плані виникають проблеми у зв'язку з тим, що обчислювальна процедура побудована на мінімізації енергії молекули, тобто, обчислювальна програма здійснює варіювання молекулярної структури, починаючи зі структури зі стандартними відстанями між атомами. При цьому виявляється, що програма нечутлива до симетрії молекули. Інакше кажучи, знайденому мінімуму енергії відповідає структура, яка може відхилятися від симетрії молекули C_{2v} . Перевіркою встановлено, що енергія молекули в знайденій програмою структурі молекули і в симетричній структурі відрізняються несуттєво, що і приводить до неочікуваних результатів.

Оскільки молекула залишається плоскою, то в новій структурі з'являється домішка симетрії σ_h до основної симетрії C_{2v} . Ця домішка приводить до замішування хвильових функцій молекулярних орбіталей, які відносяться до різних представлень групи симетрії C_{2v} . Як наслідок, отриманий результат щодо квантових переходів як в ІЧ області, так і у видимій та УФ областях суттєво відрізняються від експериментально отриманих даних.

У зв'язку з цим після проведення процедури оптимізації структури молекули за допомогою пакета HyperChem необхідно вручну симетризувати молекулу, змінивши довжини зв'язків та кути між зв'язками таким

чином, щоб це відновило симетрію молекули і не вплинуло на величину енергії молекули в основному стані.

Іншою важливою деталлю, що стосується розрахунків енергетичної структури молекули, є відхилення теоретично отриманих результатів від експериментальних. Проте виявилось, що між теоретичними і експериментальними даними щодо положень смуг поглинання існує лінійна залежність, що, в свою чергу, дозволяє виправити результати обчислень.

Для опису квантових переходів та електронно-коливальних переходів додатково використовувались елементи теорії груп. Зокрема враховано, що коливання може проявитись в електронно-коливальних переходах лише в тому разі, коли участь коливання не змінює симетрії дипольного моменту квантового переходу. Це можливо лише за умови, коли коливання є повносиметричним.

3. СТРУКТУРА СПЕКТРА ПОГЛИНАННЯ РЕЗАЗУРИНУ

На рис. 1 зображений спектр поглинання резазурину в ацетоні. З рисунка випливає, що спектр поглинання містить інтенсивну довгохвильову смугу при 630 нм (15873 см^{-1}), за якою слідує слабші смуги приблизно при 618 нм (16180 см^{-1}), 588 (17005), 460 (21740), 430 (23255), 380 (26315), 365 нм (27400 см^{-1}) тощо. Такий спектр відповідає аніону резазурину (депротонована форма [1]).

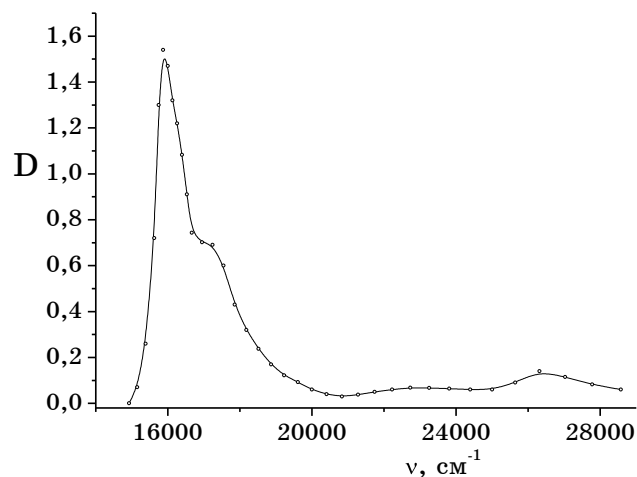


Рис. 1 – Спектр поглинання резазурину в ацетоні

За допомогою квантово-хімічних теоретичних розрахунків (методи AM1 і MNDO/d [8, 9]) проведена ідентифікація квантових переходів зі смугами в спектрі поглинання резазурину.

При проведенні квантово-хімічних розрахунків враховано 28 повністю зайятих електронами молекулярних орбіталей. При розрахунках енергії квантових переходів врахована конфігураційна взаємодія між 12 зайнятими і 12 вільними МО.

Розрахунки показали, що інтенсивна смуга поглинання ($\lambda = 630 \text{ нм}$) зумовлена квантовими переходами між верхньою занятою МО (ВЗМО, в

наших розрахунках №42) і нижньою вільною МО (НВМО, №43). Просторовий вигляд вказаних орбіталей зображено на рис. 2.

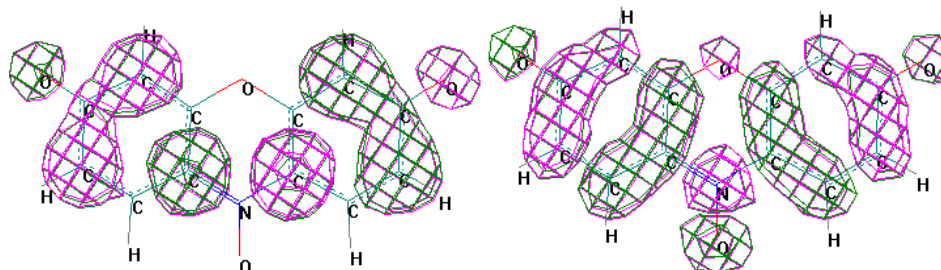
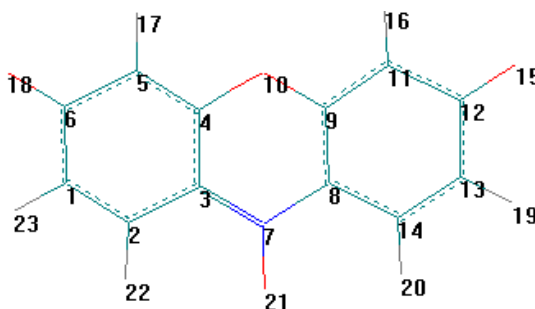


Рис. 2 – Просторовий вигляд π -МО №42 (ВЗМО, зліва) та №43 (НВМО)

За розрахунками інфрачервоних спектрів поглинання провели ідентифікацію коливань, які формують електронно-коливальні смуги поглинання.

Для проведення розрахунку коливальних частот ми пронумерували атоми в молекулі:



Молекула резазурину має симетрію, яка описується групою C_{2v} (x – довга вісь молекули, y – коротка вісь молекули, z – напрям, перпендикулярний до площини молекули).

З таблиці 1 випливає, що в молекулі резазурину існує 22 повноси- метричні коливання, поляризовані вздовж короткої осі молекули. Така ж кількість коливань можуть взяти участь у формуванні спектру комбі- наційного розсіювання, проте ці смуги повністю деполаризовані.

Таблиця 1 – Таблиця характеристик групи симетрії C_{2v} , кількість та поляризація коливань молекули резазурину

C_{2v}	I	$C_2(y)$	$\sigma(xy)$	$\sigma(yz)$	T	R	N	n	
A_1	1	1	1	1	1	0	23	22	y, x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	0	1	10	9	-
B_1	1	-1	1	-1	1	1	23	21	x, xy
B_2	1	-1	-1	1	1	1	13	11	z, zy
T	3	-1	1	1					
R	3	-1	-1	-1					
N	69	-3	23	3					

Знаючи симетрію молекулярних орбіталей (таблиця 2), ми розрахували симетрію добутку молекулярних орбіталей, яка відповідає представленню дипольних моментів, які забезпечують квантові переходи між цими орбіталями (таблиця 3).

Таблиця 2– Симетрія молекулярних орбіталей молекули резазурину

Зайняті МО	Симетрія	Вільні МО	Симетрія
33	A_1	43	B_2
34	A_2	44	A_2
35	B_1	45	A_2
36	B_2	46	B_2
37	A_1	47	B_2
38	B_1	48	A_1
39	A_2	49	A_2
40	B_2	50	B_2
41	B_2	51	A_1
42	A_2	52	B_1

Таблиця 3 – Симетрія дипольних моментів (eg), які можуть забезпечити дозволений квантовий перехід між молекулярними орбіталями

	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52
33	B_2	A_2	A_2	B_2	B_2	A_1	A_2	B_2	A_1	B_1
34	B_1	A_1	A_1	B_1	B_1	A_2	A_1	B_1	A_2	B_2
35	A_2	B_2	B_2	A_2	A_2	B_1	B_2	A_2	B_1	A_1
36	A_1	B_1	B_1	A_1	A_1	B_2	B_1	A_1	B_2	A_2
37	B_2	A_2	A_2	B_2	B_2	A_1	A_2	B_2	A_1	B_1
38	A_2	B_2	B_2	A_2	A_2	B_1	B_2	A_2	B_1	A_1
39	B_1	A_1	A_1	B_1	B_1	A_2	A_1	B_1	B_2	B_2
40	A_1	B_1	B_1	A_1	A_1	B_2	B_1	A_1	B_2	A_2
41	A_1	B_1	B_1	A_1	A_1	B_2	B_1	A_1	B_2	A_2
42	B_1	A_1	A_1	B_1	B_1	A_2	A_1	B_1	A_2	B_2

Порівняння результатів, наведених в таблицях 1 і 3 дозволяє однозначно знайти поляризацію того чи іншого квантового переходу. Аналіз таблиці 1 показує, що існують квантові переходи, заборонені за симетрією (добуток представлень молекулярних орбіталей відповідає представленню A_2).

Саме для таких випадків при проведенні квантово-хімічних розрахунків виявилось, що сила осцилятора в них відмінна від нуля. Щоб розібратися з цим питанням, ми розглянули вигляд молекулярних орбіталей і побачили для певних МО наявність суттєвого відхилення від симетрії C_{2v} . Зокрема, це яскраво видно на МО № 51 і 52 (див. рис. 3).

Такий вигляд орбіталей можливий, якщо відповідні стани знаходяться в резонансі і між ними є взаємодія. Якщо уявити МО №52 і №53 як суму складових лівої і правої частин $\Psi_{52} = a(\psi_l - \psi_n)$, а $\Psi_{53} = a(\psi_l + \psi_n)$, тоді при взаємодії цих станів отримаємо два нові стани:

$$\Psi_I = a(\Psi_{52} + \Psi_{53}) = \psi_l, \quad \Psi_{II} = a(\Psi_{52} - \Psi_{53}) = \psi_n,$$

де a – константа нормування.

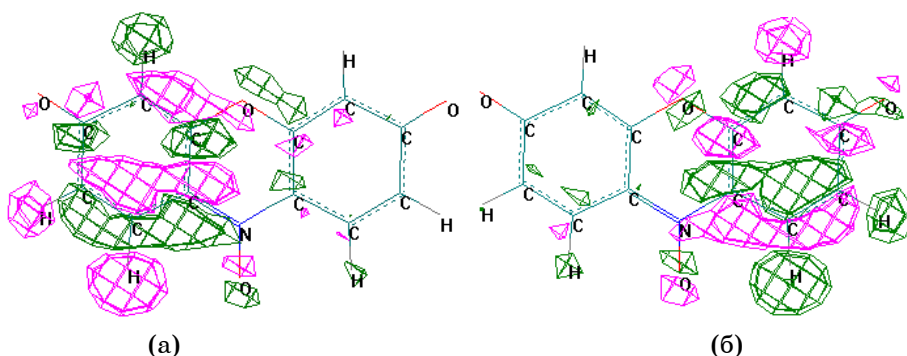
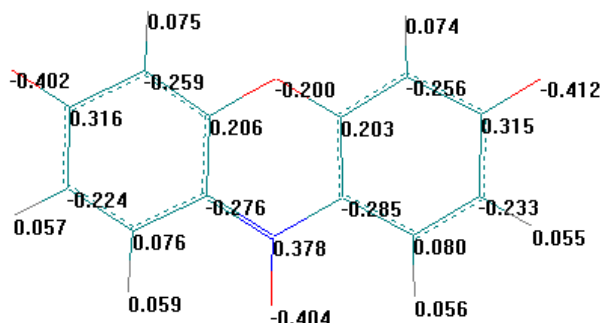


Рис. 3 – Просторовий вигляд МО № 52 (а) та МО № 53 (б)

Слід відзначити, що така взаємодія станів в групі симетрії C_{2v} неможлива, оскільки стани мають різну симетрію. Для того, щоб така взаємодія проявилась, необхідно, щоб оператор взаємодії станів (\hat{p}) мав симетрію B_1 , тобто відповідав напрямку x . Тоді

$$\langle \Psi_{51} | \hat{p} | \Psi_{52} \rangle = A_1 B_1 B_1 = A_1$$

Для того, щоб існував оператор збурення такої симетрії, необхідно, щоб на симетрію молекули C_{2v} наклалася нижча симетрія σ_h . Це можливо лише в тому випадку, коли молекула дещо деформована в напрямку x . Щоб переконатись в цьому, достатньо глянути на розподіл зарядів на атомах в молекулі:



З розподілу зарядів видно, що заряди лівої частини молекули не тотожні зарядам правої частини. Отже, існує нескомпенсований дипольний момент вздовж осі x .

Тепер маємо незаперечний доказ пониження симетрії молекули, яке допустила розрахункова програма.

Необхідно виправити ситуацію і сконструювати строго симетричну молекулу. Отже, шляхом усереднення відстаней і кутів для лівої та правої частини молекули ми зробили всі відстані і кути в молекулі такими, щоб симетрія була строго C_{2v} . Перевірка показала, що енергія системи після такої процедури не збільшилась. Як наслідок, розподіл зарядів на атомах став симетричним. Тепер молекулярні орбіталі №№ 52 та 53 (наш тест-об'єкт) набули вигляду, показаного на рисунку 4.

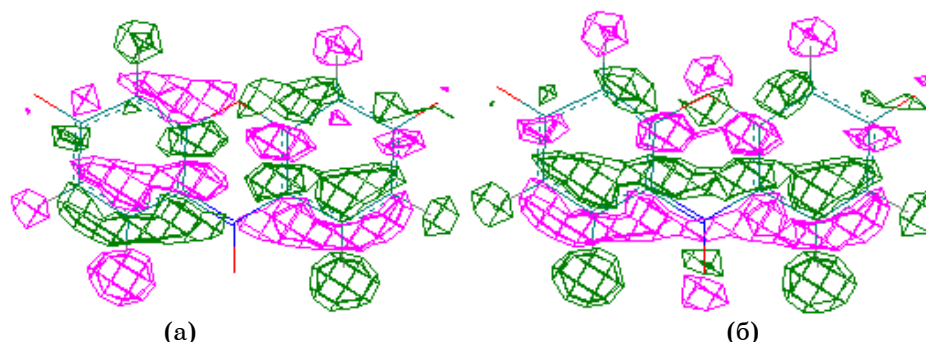


Рис. 4 – Просторовий вигляд МО № 52 (а) та МО № 53 (б) після підвищення ступеня симетрії молекули

Тепер можна проводити розрахунки спектрів поглинання в ІЧ, видимій та УФ областях спектру. В таблиці 4 наведені результати для видимої та УФ областей. Як видно з таблиці 4, забороненим за симетрією квантовим переходам відповідає сила осцилятора, рівна нулеві.

Розрахуємо коливальні спектри молекули резазурину з симетризованою структурою.

Таблиця 4 – Квантові переходи в симетризованій молекулі резазурину

№	Кв. перехід	Розрахунок + виправлення		Поляризація	Сила осцилятора
		λ, нм,	ν, см ⁻¹		
I	II	III	IV	V	VI
1	42 → 43	632.8,	15804	X	0.6940
2	35 → 43	476.9,	20968	-	0.0000
3	42 → 44	439.3,	22763	Y	0.0677
4	42 → 46, 41 → 44	414.5,	24124	X	0.0343
5	41 → 43,	373.0,	26813	Y	0.0967
6	42 → 48	358.7,	27880	-	0.0000
7	42 → 44, 42 → 45	347.9,	28746	Y	0.0478
8	41 → 48, 40 → 48	309.6,	32297	Z	0.0014
9	40 → 43	314.2,	31826	Y	0.3907
10	42 → 46, 41 → 45	313.2,	31931	X	0.2938
11	42 → 47, 40 → 44	302.9,	33016	X	0.3635
12	41 → 44, 39 → 43	275.4,	36317	X	0.5066
13	39 → 44, 36 → 43	242.8,	41193	Y	0.0177
14	41 → 44, 40 → 44	238.1,	41992	X	0,0670
15	?	236.6,	42260	?	0.1649
16	42 → 49	236.0,	42377	Y	0,1092
17	38 → 44, 37 → 46	232.9,	42935	Z	0.0058
18	38 → 46, 37 → 44	232.4,	43035	-	0,0005
19	40 → 51, 41 → 51	228.6,	43735	Z	0.0186
20	41 → 46	228.6,	43753	Y	0.2111
21	42 → 51	224.2,	44601	-	0.0000

I	II	III	IV	V	VI
22	42 → 50	225.2,	44413	X	0.0371
23	35 → 48	221.0,	45245	X	0.0600
24	40 → 46	216.9,	46094	Y	0,1756
25	40 → 45, 41 → 45	214.4,	46652	X	0.0003
26	42 → 52	214.0,	46732	Z	0,0045
27	36 → 43	211.6,	47269	Y	0.0112
28	37 → 43	210.8,	47434	Z	0.0043

Порівняння експериментально (рис. 5) та теоретично отриманих (рис. 6) спектрів поглинання у видимій та УФ областях показало, що довгохвильова смуга та її структура в спектрі поглинання резазурину може бути сформована накладанням всіх симетричних коливань. Друга смуга, подана в таблиці 4 як 477 нм, теж формується цими коливаннями. Проте, розширення смуги та низька сила осцилятора не дозволяють побачити структуру в цій області спектра.

Процедура розкладання спектра поглинання на елементарні компоненти, що мають форму функцій Гауса, яка проведена з використанням двох різних програм, не дозволяє отримати положення коливальних повторень з великою точністю. Положення першої смуги поглинання (електронний перехід) визначено з точністю $\pm 22 \text{ см}^{-1}$, першого коливального повторення $\pm 47 \text{ см}^{-1}$, другого – $\pm 137 \text{ см}^{-1}$, третього – більше 1000 см^{-1} .

Скоріше за все у формуванні коливальних повторень довгохвильової смуги поглинання беруть участь всі повносиметричні коливання молекули, проте з різним вкладом. Коливання, яке дає максимальний вклад, і формує смугу коливального повторення. При віднесенні коливальних частот до формування смуг поглинання у видимій області спектра необхідно врахувати, що ми фактично реєструємо коливальний спектр збудженої молекули, який повинен відрізнятися від коливального спектра незбудженої молекули за рахунок зміни порядку зв'язку між атомами.

Таблиця 5 – Коливальний спектр молекули з виправленою структурою (лише повносиметричні коливання)

№ коливання	Частота	Інтенсивність	Група атомів і тип коливань
I	II	III	IV
5	203,69	1,747	2,1,6,5-11,12,13,14 – маятник
10	392,36	0,309	Розтяг вздовж осі x
14	477,78	6,619	18-6,1,5 і 15-12,11,13 – маятник
16	588,49	0,221	10-7,21-y
23	706,73	2,005	1,13-x, 10-y
25	838,14	1,141	5,4,9,11-y
29	865,6	0,008	2,10,14-y
35	1074,76	1,912	1-5(назустріч), 11-13 (назустріч)
38	1202,92	0,053	22-23 (назустріч),19-20 (назустріч)
39	1278,28	3,219	17,16-x
41	1351,59	1,404	3,4-9,8 (назустріч), 22,23,19,20 – маятник
43	1396,93	0,309	3,4,8,9-10-y
45	1466,96	10,918	6-12, 3,4-8,9 –маятник

I	II	III	IV
48	1601,72	2,32	3-8-x, 1,2-13,14 – маятник
50	1682,94	42,899	3,84,9-y
52	1771,43	86,756	4-9, 1-2, 4-5, 9-11, 13-14-x
54	1813,16	306,465	7-y, 4-9, 1,5-2,4, 9,14-11,13-x
55	1900,18	131,851	7-21-y, 4-9-x
57	1992,7	100,356	6-18, 12-15 – коливання зв'язків
59	3167,71	17,687	2-12, 14-20 – коливання зв'язків
61	3200,26	9,252	1 23, 13-19 – коливання зв'язків

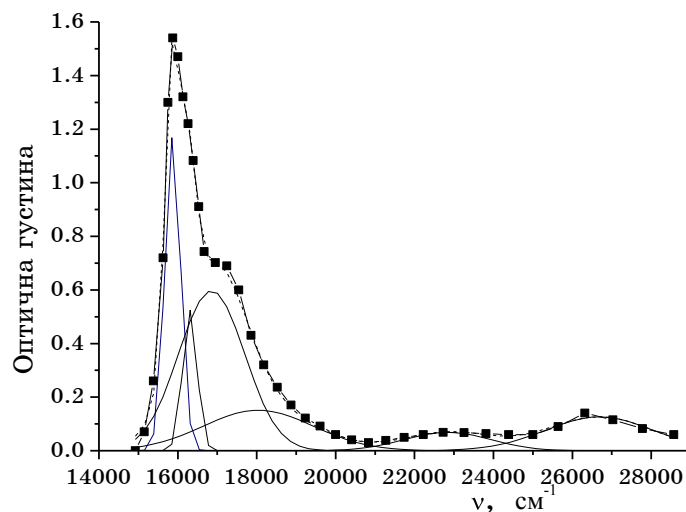


Рис. 5 – Спектр поглинання резазурину в ацетоні та розкладання його на компоненти

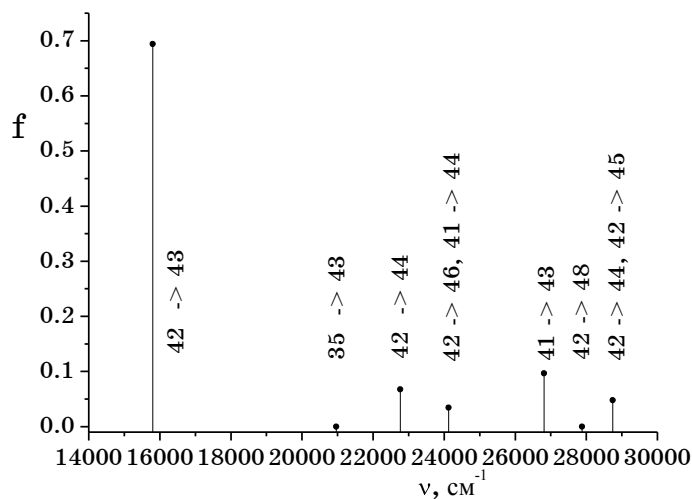


Рис. 6 – Розрахований (MNDO/d) і виправлений за частотами спектр поглинання резазурину

Найбільш ймовірно, що коливальне повторення з частотою близько 400 см^{-1} формується переважно коливанням $477,78\text{ см}^{-1}$, яке має інтенсивність 6,619 (таблиця 5), коливальне повторення в області 1300 см^{-1} формується переважно коливанням $1466,96\text{ см}^{-1}$ з інтенсивністю 10,918. Нарешті, коливальне повторення в області 2500 см^{-1} може бути сформоване коливаннями, які в незбудженій молекулі мають частоти в області $1800\text{-}2000\text{ см}^{-1}$. Отже, у всіх випадках частота коливального повторення менша, ніж знайдена теоретично частота для незбудженої молекули. Оскільки відомі фрагменти молекули, коливання яких дає ту чи іншу частоту (таблиця 5), можна показати, що дійсно у всіх випадках зростає розпушування зв'язків, відповідальних за названі частоти. Отже, зменшення частот активних коливань у збудженій молекулі закономірне.

4. ВИСНОВКИ

Експериментальні і теоретичні дослідження спектральних характеристик молекули резазурину показали, що:

1. Метод проведення квантово-хімічних розрахунків з використанням пакету програм HyperChem не забезпечує збереження симетрії молекули, у зв'язку з чим після оптимізації геометрії молекули шляхом мінімізації енергії молекули в основному стані необхідно здійснити процедуру симетризації молекули. Після цього необхідно провести контрольні розрахунки енергії молекули, енергії електронних квантових переходів і їх віднесення до певних станів молекули, коливальних спектрів молекули та їх віднесення до певних зв'язків молекули.

2. Результати теоретичних розрахунків щодо енергії квантових переходів необхідно порівняти з експериментальними даними, знайти кореляцію між ними і виправити результати розрахунків на підставі цієї кореляції.

3. Розрахунки енергетичної структури молекули резазурину з використанням розробленої методичної процедури повністю узгоджуються з експериментальними даними у видимій та УФ областях спектра як за положенням так і за величиною коефіцієнта екстинкції.

4. Смуги поглинання у видимій області спектра формуються за участю повносиметричних коливань молекули, серед яких найбільшою участю виділяються коливання з частотами в області 478 см^{-1} , 1467 см^{-1} , а також групою коливальних частот в області $1800\text{-}2000\text{ см}^{-1}$. Частоти, які формують спектр поглинання, менші за знайдені теоретично для основного стану молекули, оскільки при збудженні молекули ступінь розпушування зв'язків, відповідальних за вказані коливання, зростає.

ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ РЕЗАЗУРИНА

П.А. Кондратенко¹, Ю.М. Лопаткин², Т.Н. Сакун¹

¹ Национальный авиационный университет,
пр. Космонавта Комарова, 1, 03680, Киев, Украина
E-mail: pkondrat@ukr.net

² Сумский государственный университет,
ул. Римского-Корсакова, 2, 40007, Сумы, Украина
E-mail: yu.lopatkin@gmail.com

В работе проведены экспериментальные и теоретические исследования спектральных характеристик молекулы резазурина. Сравнение результатов экспериментальных и теоретических исследований позволило показать, что спектр поглощения в видимой области формируется квантовыми переходами между электронными состояниями молекулы, а также электронно-колебательным взаимодействием. В работе предложен метод получения теоретических результатов с контролем симметрии молекулы. Это позволило получить полностью согласованные теоретические и экспериментальные результаты как по положению так и по величине коэффициента экстинкции и выяснить природу всех квантовых переходов и колебательных частот. Показано, что полосы поглощения в видимой области спектра формируются при участии полносимметричных колебаний молекулы, среди которых наибольшим участием выделяются колебания с частотами в области 478 см^{-1} , 1467 см^{-1} , а также группой колебательных частот в области $1800\text{-}2000\text{ см}^{-1}$, которые оказались меньшими найденных теоретически для основного состояния молекулы, поскольку при возбуждении молекулы степень разрыхления связей, ответственных за указанные колебания, возрастает.

Ключевые слова: ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ, МОЛЕКУЛА РЕЗАЗУРИНА, КВАНТОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, СИММЕТРИЯ МОЛЕКУЛЫ.

ELECTRON-VIBRATION STRUCTURE OF ABSORPTION SPECTRA OF RESAZURINE

P.O. Kondratenko¹, Yu.M. Lopatkin², T.N. Sakun¹

¹ National Aviation University,
1, Cosmonaut Komarov Prosp., 03680, Kyiv, Ukraine
E-mail: pkondrat@ukr.net

² Sumy State University,
2, Rimsky-Korsakov Str., 40007, Sumy, Ukraine
E-mail: yu.lopatkin@gmail.com

In the work the experimental and theoretical investigation of the spectral characteristics of a resazurin molecule are carried out. Comparison of results of experimental and theoretical researches has allowed showing, that the spectrum of absorption in the visible region is formed by quantum transitions between electronic states of the molecule, and also by the electron-vibration interaction. In the work the method of reception of theoretical results with the control of molecule symmetry is offered. It has allowed to receive the completely coordinated theoretical and experimental results both by position and by size of the extinction factor and to find out the nature of all quantum transitions and oscillatory frequencies. It is shown, that strips of absorption in the visible region of the spectrum are formed at participation of the totally symmetrical vibrations of the molecule among which the greatest participation stand out vibrations with frequencies in the region of 478 cm^{-1} , 1467 cm^{-1} , and also by group of oscillatory frequencies in the region of $1800\text{-}2000\text{ cm}^{-1}$ which were less than found theoretically for the basic state of the molecule because the degree of loosening of the bonds that responsible for specified vibrations, increases at excitation of the molecule.

Keywords: ELECTRON-VIBRATIONAL INTERACTION, ELECTRON STATES, MOLECULE OF RESAZURIN, QUANTUM TRANSITIONS, SYMMETRY OF THE MOLECULE.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. П.О. Кондратенко, Ю.М. Лопаткін, Т.М. Сакун, *ФХТТ* **7**, 695 (2006) (P.O. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, T.N. Sakun, *Physics and Chemistry of Solid State* **7**, 695 (2006)).
2. П.О. Кондратенко, Ю.М. Лопаткін, *ФХТТ* **5**, 474 (2004) (P.O. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, *Physics and Chemistry of Solid State* **5**, 474 (2004)).
3. P.O. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, N.P. Kondratenko, *Materials Science-Poland* **20** No4, 93 (2002).
4. П.О. Кондратенко, Ю.М. Лопаткін, Т.М. Сакун, *Фізика і хімія твердого тіла* **8**, 100 (2007) (P.O. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, *Physics and Chemistry of Solid State* **8**, 100 (2007)).
5. P.A. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, T.N. Sakun, *Functional Materials* **15**, 392 (2008).
6. П.О. Кондратенко, Ю.М. Лопаткін, Т.М. Сакун, *Наукоємні технології* **2**, 105 (2009).
7. П.А. Кондратенко, С.Ю. Лопаткин, Ю.М. Лопаткин, Т.Н. Сакун, *Вісник СумДУ. Серія: Фізика. Математика. Механіка.* **1**, 145 (2007).
8. W. Thiel, A. Voityuk, *Int. J. Quant. Chem.* **44**, 807 (1992).
9. M.J.S. Dewar, E.G. Zoebisch, E.F. Healy, J.J.P. Stewart, *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 3902 (1985).