

ЕЛЕКТРОННО-КОЛИВАЛЬНА ВЗАЄМОДІЯ В МОЛЕКУЛАХ РЕЗАЗУРИНУ

Сакун Т.М.*, *аспірант*; Кондратенко П.О.*, *професор*;
Лопаткін Ю.М., *професор*

* Національний авіаційний університет, м. Київ

Резазурин є перспективною сполукою широкого призначення, зокрема як робоча речовина лазера на барвниках, сенсibilізатор світлочутливості фотографічних матеріалів, матеріал для оптичного запису інформації.

Крім того, він є перспективною модельною речовиною для дослідження процесів релаксації молекул з високозбудженого стану, фотогенерації носіїв заряду в твердих полімерних розчинах, фотохімічних перетвореннях при використанні світла з видимої та УФ областей тощо.

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 резазурина.

На підставі результатів, отриманих при проведенні експериментальних і теоретичних досліджень спектрів поглинання резазурина у видимій, УФ та інфрачервоній областях, показано, що спектр поглинання в області 670-470 нм формується одним електронним переходом між верхньою зайнятою та нижньою вільною молекулярними орбіталями, а також коливальними повтореннями за участю повносиметричних коливань молекули резазурина.

Комплекс експериментальних та квантово-хімічних досліджень дозволив повністю ідентифікувати спектр поглинання резазурина у видимій та УФ областях. При цьому розраховані сили осцилятора, величини яких узгоджуються з експериментальними даними, та поляризація дипольних моментів квантових переходів.

Показано, що спектр поглинання резазурина в ІЧ області містить 22 повносиметричні коливальні частоти, частина яких має змогу вступати в електронно-коливальну взаємодію при формуванні спектрів поглинання у видимій та УФ областях.