

### Состояние фрагментов молекулы полиметинового красителя после её диссоциации

Великодная В.В.<sup>1</sup>, асп.; Лопаткин Ю.М.<sup>1</sup>, проф.;  
Кондратенко П.А.<sup>2</sup>, проф.

<sup>1</sup> Сумский государственный университет, г. Сумы

<sup>2</sup> Национальный авиационный университет, г. Киев

С целью выяснения, в каком состоянии образуются два фрагмента молекулы ПМК после её диссоциации, в работе проведены расчёты энергий электронной системы этих фрагментов в зависимости от количества электронов на них. Результаты расчёта приведены в табл. 1.

Таблица 1 – Энергия электронной системы (ккал/моль) фрагментов в зависимости от зарядового состояния и мультиплетности.

№ п/п	Меньший фрагмент: заряд, мультиплетность и энергия электронной системы	Большой фрагмент: заряд, мультиплетность и энергия электронной системы	Суммарная энергия электронной системы
1	заряд 0, дублет, $E = -968,258$	заряд +1, дублет, $E = -1054,957$	$E = -2023,215$ , триплет
2	заряд +1, триплет $E = -805,487$	заряд 0, синглет $E = -1187,743$	$E = -1993,23$ , триплет
3		заряд 0, триплет $E = -1193,616$	$E = -1999,103$ , синглет
4	заряд +1, синглет $E = -803,885$	заряд 0, синглет $E = -1187,743$	$E = -1991,628$ , синглет
5		заряд 0, триплет $E = -1193,616$	$E = -1997,501$ , триплет

Из табл. 1 следует, что энергетически выгодной должна быть реакция образования двух радикалов из основного триплетного состояния. При этом заряженным должен быть больший фрагмент молекулы. Если фрагменты образовать из синглетного состояния, тогда заряд будет локализован на меньшем фрагменте, и оба фрагмента должны быть в триплетном состоянии.