

Теоретико-групповой анализ электронной и колебательной структуры молекулы

Великодная В.В., *аспирант*; Лопаткин Ю.М., *профессор*;
Кондратенко П.А., *профессор*
Сумский государственный университет, г. Сумы
Национальный авиационный университет, г. Киев

С целью изучения процессов релаксации энергии из возбуждённых электронных состояний многоатомных молекул необходимо исследовать энергетическую структуру и электронно-колебательные взаимодействия в них. В данной работе в качестве модельной молекулы рассмотрен катион красителя диоксазолтриметинцианина.

При исследовании использованы теоретико-групповой анализ и квантово-механические методы расчёта, в частности, метод MNDO/d.

Исследуемая молекула катиона диоксазолтриметинцианина имеет в основном состоянии симметричную структуру, которая описывается группой симметрии C_{2v} . Проанализирована симметрия молекулярных орбиталей (МО) (табл.1) и колебательных мод молекулы.

Таблица 1 – Симметрия МО.

№ МО	Симметрия и тип МО	№ МО	Симметрия и тип МО	№ МО	Симметрия и тип МО
29	A_1 σ -МО	34	B_2 π -МО	39	B_1 σ -МО
30	B_2 π -МО	35	A_2 π -МО	40	A_1 σ -МО
31	A_2 π -МО	36	B_2 π -МО	41	B_1 σ -МО
32	B_2 π -МО	37	A_2 π -МО	42	B_2 π -МО
33	A_2 π -МО	38	A_1 σ -МО	43	A_1 σ -МО

Рассмотрены полносимметричные колебания исследуемой молекулы, которые дают структуру длинноволновой полосы в спектре поглощения. Переход молекулы к другим геометрическим структурам сопровождается значительным понижением симметрии молекул. Это будет способствовать проявлению в спектре электронного поглощения других колебательных частот молекулы, а, следовательно, и изменению формы длинноволновой полосы поглощения. Теоретико-групповой анализ исследуемой молекулы позволил систематизировать колебательные и электронные квантовые переходы, идентифицировать полосы в спектрах поглощения.