

Процесс перегибридизации в молекуле спиропирана

Коваленко О.А.¹, студ.; Лопаткин Ю.М.¹, проф.;
Кондратенко П.А.², проф.

¹ Сумский государственный университет, г. Сумы

² Национальный авиационный университет, г. Киев

Для квантово-механического описания перестройки молекулярных орбиталей при различных взаимодействиях часто пользуются формальным приёмом, так называемой гибридизацией, тип которой определяет геометрию молекулы, вместе с ней и её симметрию, и формы молекулярных орбиталей.

Обнаружено, что при удлинении связи $C_{\text{спиро}}-O$ молекула спиропирана существенно перестраивается: молекула становится более плоской, угол при спироатоме увеличивается, происходит изменение двугранного угла $N-C-C-C$, в длинноволновой области электронного спектра поглощения появляется полоса (табл.1). Полоса сдвигается в длинноволновую область при удлинении связи.

Таблица 1 – Зависимость плоского угла α и двугранного угла β при спироатоме в молекуле спиропирана, положения длинноволновой полосы поглощения λ в электронном спектре и соответствующей силы осциллятора f при увеличении длины l связи $C_{\text{спиро}}-O$.

$l, \text{ \AA}$	1,42	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2,0	2,1	2,2
α , град	109,77	111,26	113,45	115,56	117,72	119,67	121,12	122,42	124,13
β , град	128,04	124,52	122,49	119,7	115,28	109,54	104,31	96,29	76,65
λ , нм	394,88	385,92	390,77	399,79	411,34	423,3	436,92	536,07	608,94
f	0,053	0,041	0,05	0,055	0,064	0,072	0,091	0,023	0,13

Также происходит перераспределение электрического заряда (смещение электронного облака), при этом увеличивается отрицательный заряд на атоме кислорода (с $-0,275e$ на $-0,476e$), ослабляется связь в результате уменьшения перекрытия π -орбиталей.

Таким образом, в работе исследован маршрут преобразования молекулы спиропирана в молекулу мероцианина и связанные с этим процессы перегибридизации $sp^3 \rightarrow sp^2$ и изменения в электронных спектрах поглощения.