

Диссоциативное состояние полиметиновых красителей

Великодная В.В.¹, *асп.*; Лопаткин Ю.М.¹, *проф.*;
Кондратенко П.А.², *проф.*

¹ Сумский государственный университет, г. Сумы

² Национальный авиационный университет, г. Киев

Выделяющиеся фотостойкостью полиметиновые красители (ПМК) при возбуждении их квантами света с достаточно высокой энергией начинают проявлять нестабильность. В связи с этим возникла задача исследования процессов релаксации ПМК (рис.1) как части соответствующей фундаментальной проблемы.

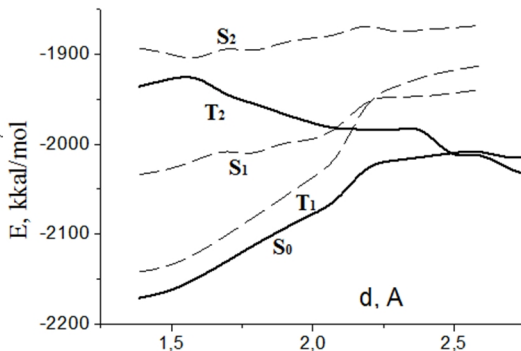
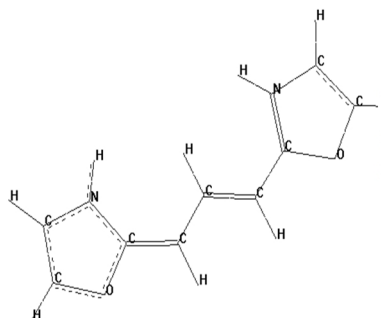


Рисунок 1 - Молекула ПМК. Рисунок 2 - Потенциальные поверхности.

На основании проведённых исследований процессов релаксации возбуждения в молекуле полиметинового красителя показано, что:

- в высоковозбуждённом триплетном состоянии существует диссоциативная поверхность (рис.2, кривая T_2), которая соответствует $\sigma \rightarrow \sigma^*$ -возбуждению молекулы; релаксация возбуждения в пределах данной поверхности приводит к диссоциации молекулы за счёт удлинения С–С-связи молекулы у центрального атома углерода;

- при увеличении длины диссоциирующей связи d до $2,16 \text{ \AA}$ наблюдается фазовый переход электронной системы в молекуле, в результате чего энергия синглетного состояния значительно увеличивается, в то время как энергия триплетного состояния практически остаётся без изменений, что вызвано заселением σ^* -МО электроном в основном состоянии.