

Дипольный момент молекулы красителя при конформационных превращениях

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

В данной работе рассматривались процессы изомеризации и их влияние на излучательные процессы в возбуждённых молекулах триметинового красителя, у которого можно выделить три изомера: транс (I), цис (II) и цис-цис (III). В процессе преобразования изомера I в изомер II изменяется величина дипольного момента молекулы.

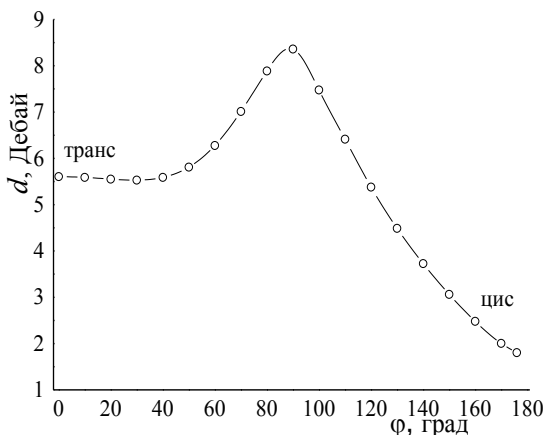


Рисунок 1 – Зависимость величины дипольного момента молекулы(I) от угла поворота фрагментов молекулы вокруг связи С-С в метиновой группе.

Увеличенная величина дипольного момента молекулы, которая определяется распределением заряда в катионе, свидетельствует о возможности увеличения энергии взаимодействия переходного состояния молекулы с растворителем, а, следовательно, об уменьшении высоты потенциального барьера для темного перехода между изомерами.