

**ЕЛЕКТРОННО-КОЛИВАЛЬНА ВЗАЄМОДІЯ В МОЛЕКУЛАХ РЕЗАЗУРИНУ**

В роботі проведені дослідження спектру поглинання резазурину у видимій, ультрафіолетовій та інфрачервоній областях.

Вибір резазурину (представник класу оксазинових барвників, похідний феноксазину –  $C_2O_4NH_7$ ) зумовлений його перспективністю використання для запису оптичної інформації, для дослідження процесів релаксації молекул з високозбуджених станів, фотохімічних перетворень тощо.

Реєструвалися спектри поглинання двопроменевим спектрофотометром SPEKORD 210. За розчинник взято ацетон. Оскільки в ньому відсутня воднева взаємодія, то його вплив на вигляд смуг поглинання найменший з усіх можливих полярних розчинників.

Зображалися спектри поглинання в координатах “екстинція - частота”. Такий спектр можна розкласти на елементарні смуги і припустити, що вони описуються кривими Гауса. Для цього були використані програми з оболонки Origin 6.0 та оригінальні.

Спектр поглинання резазурину в ацетоні містить інтенсивну довгохвильову смугу при 630 нм ( $15875\text{ см}^{-1}$ ), за якою йдуть слабші смуги при 618 нм ( $16180\text{ см}^{-1}$ ), 588 нм ( $17005\text{ см}^{-1}$ ), 460 ( $21740$ ), 430 ( $23255$ ), 380 ( $26315$ ), 365 ( $27400$ ) тощо. Такий спектр відповідає аніону резазурину.

За допомогою квантово-хімічних теоретичних розрахунків (методу AM1 та MNDO/d) проведена ідентифікація квантових переходів зі смугами в спектрі поглинання резазурину. Так інтенсивна смуга ( $\lambda=630\text{ нм}$ ) зумовлена квантовими переходами між верхньою занятою МО та нижньою вільною.

За розрахунками інфрачервоних спектрів поглинання проведена ідентифікація коливань, які формують електронно-коливальні смуги поглинання.

Порівняння експериментально та теоретично отриманих спектрів поглинання у видимій та УФ областях показало, що структура довгохвильової смуги в спектрі поглинання сформована накладанням всіх симетричних коливань. Друга смуга (477 нм) теж формується цими коливаннями. Найвірогідніше у формуванні коливальних повторень довгохвильової смуги поглинання беруть участь всі повносиметричні коливання молекули, проте з різними вкладом. Коливання, яке дає максимальний вклад і формує смугу коливального повторення. До таких коливань належать коливання з частотами в області  $478\text{ см}^{-1}$ ,  $1467\text{ см}^{-1}$ , група коливальних частот в області  $1800 - 2000\text{ см}^{-1}$ . Частоти, які формують спектр поглинання менші за знайдені теоретично для основного стану молекули, оскільки при збудженні молекули ступінь розпушування зв'язків, які відповідають за відповідні коливання, зростає.

*Науковий керівник – П.О.Кондратенко, д.ф.-м.н., проф.*