

УДК 535.37

DOI: 10.17223/00213411/63/8/95

О.Н. ЧАЙКОВСКАЯ, О.В. ВУСОВИЧ, А.В. МАЛИКОВ

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ 4-ГИДРОКСИ-3-МЕТОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ *

С помощью методов электронной спектроскопии и квантовой химии проведено сравнение электронных спектров ванилиновой кислоты в различных растворителях. В основном состоянии выделено четыре протолитические формы ванилиновой кислоты: анионная, дианионная, катионная и нейтральная. В воде ванилин и изованилин в основном состоянии обладают одинаковыми спектральными характеристиками: спектры поглощения совпадают по положению и интенсивности. Ванилиновая кислота имеет сдвиг полос поглощения и флуоресценции по сравнению с ванилином и изованилином в сторону коротких длин волн. Значения минимума электростатического потенциала указывают на то, что у ванилиновой кислоты самый глубокий минимум наблюдается в области атома карбонильного кислорода. Исследования спектров флуоресценции показали, что излучательные свойства ионных форм ванилиновой кислоты отличаются. Данные квантово-химических расчетов указывают на то, что электронные переходы в молекуле формируются с участием переноса заряда с фенильной части молекулы на атомы кислорода метокси- и карбонильной групп. Присутствие OH , OCH_3 и карбонильной групп в структуре ванилиновой кислоты приводит к существованию дианионной формы как в основном, так и электронно-возбужденном состояниях.

Ключевые слова: ванилиновая кислота, поглощение, флуоресценция, фотофизические процессы, квантово-химический расчет.

Введение

В последние годы актуальность исследований лигнина и его модельных соединений определяется той ролью, которую он играет в химических процессах переработки древесины. Лигнин как составная часть древесины – наиболее трудно утилизируемый продукт, который образуется при ее химической переработке на целлюлозно-бумажных и гидролизных предприятиях [1]. Накопленные промышленные отходы занимают значительные земельные территории, выступают источником загрязнения окружающей среды, следствием чего является ухудшение условий жизни человека. Одновременно с вышесказанным лигнин может заменить запасы традиционного органического сырья при их истощении и стать основным источником получения необходимых соединений, что обусловлено особенностями его химического строения и практической неисчерпаемостью природных растительных ресурсов [2]. Важную роль в процессе делигнификации играет способность структурных фрагментов лигнина к кислотной ионизации. Ответственными за Н-кислотность центрами являются фенольные гидроксильные группы и в меньшей степени карбоксильные группы. В связи с этим мощным средством управления кислотностью фенольных соединений является изменение состава растворителя. В наибольшей мере это проявляется в смесях воды с диполярными апротонными растворителями, находящими широкое применение в химии древесины [3]. В то же время свойства, характеризующие реакционную способность модельных соединений лигнина в различных средах, мало изучены. В связи с вышесказанным в настоящее время приоритетной задачей являются исследования протолитических равновесий с участием родственных лигнину соединений в системах вода, вода – ацетон и вода – диоксан с позиции современных представлений о специфическом и неспецифическом взаимодействии, а также выявление механизма влияния растворителя на реакционную способность лигнинных соединений.

В современных технологиях 4-гидрокси-3-метоксибензойная кислота нашла свое применение в качестве органического поглотителя ультрафиолетовых лучей в солнцезащитных материалах. Органические молекулы могут представлять проблему безопасности при использовании в высоких концентрациях. Чтобы предотвратить прямой контакт органического поглотителя УФ-лучей с кожей человека, была выбрана 4-гидрокси-3-метоксибензойная кислота [4] и вставлена в слоистый двойной гидроксид Zn_2Al с помощью реакции соосаждения. Тем самым была образована защитная

* Работа выполнена при поддержке Программы повышения конкурентоспособности ТГУ среди ведущих мировых научно-образовательных центров (проект № 8.1.20.2018 Л).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>