

УЧАСТИЕ ИОННЫХ ФОРМ В ФОТОПРЕВРАЩЕНИЯХ БИСФЕНОЛА А ПОД ДЕЙСТВИЕМ СОЛНЕЧНОГО СВЕТА*

О.К. Базыль, Е.Н. Бочарникова, О.Н. Чайковская, Г.В. Майер

Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Исследованы спектры поглощения и флуоресценции заряженных форм бисфенола А (ВРА): аниона и катиона. Интерпретация природы электронно-возбужденных состояний и фотолиза молекулы ВРА была сделана с помощью квантово-химических расчетов. Проведено сравнение спектров ВРА в водном растворе при переходе от нейтральной формы к ионным. Расчеты показали, что малая величина квантового выхода флуоресценции во всех рассмотренных молекулярных структурах определяется большой эффективностью синглет-триплетной конверсии. В анионной форме ВРА зафиксировано снижение на два порядка эффективности радиационного канала распада, вызванное изменением орбитальной природы флуоресцентного состояния, по сравнению с нейтральной и катионной формами. Показано, что за счет перекрывания спектров поглощения анионной формы в водном растворе и солнечного света происходит рост вероятности фотолиза исследуемой молекулы.

Ключевые слова: бисфенол А, катион, анион, квантовая химия, электронные спектры, фотолиз.

Введение

Одной из важнейших проблем, стоящих перед наукой, является проблема создания безопасной экологической обстановки для живых организмов и окружающей среды. Одним из веществ, ухудшающих экологию окружающей среды, является бисфенол А (ВРА) [1–3], получивший широкое практическое применение при изготовлении поликарбонатного пластика, используемого в строительстве, электротехнике, инженерии, оптике, медицине, пищевой промышленности, упаковках детского питания и игрушек. По мере применения поликарбонатного пластика выявлена его высокая генотоксичность [4], выражающаяся в негативном воздействии на эндокринную систему живых организмов. В связи с этим задачи трансформации структуры ВРА с целью снижения токсичности, а также поиск путей его разрушения остаются актуальными. Известные в настоящее время биологические и фотокаталитические методы очистки воды от ВРА оказываются малоэффективными [5–9]. В связи с вышесказанным вопрос поиска рациональных способов утилизации требует детального знания физико-химических свойств данного соединения и причин их изменения в зависимости от внешних условий.

В целях поиска эффективных способов утилизации свойства бисфенолов исследуются различными экспериментальными и теоретическими методами. Одними из способов решения названной проблемы являются спектральные методы [8–10] и квантово-химические расчеты [3, 10–15]. Первые дают возможность не только идентифицировать соединение, продукты его превращения и их свойства, но и подтвердить или опровергнуть выводы теоретического решения проблемы. Ранее при исследовании протонно-акцепторного равновесия гидросоединений [16–18] было показано, что при нейтральных значениях pH среды эти соединения существуют в воде в ионных формах как в основном, так и в возбужденных состояниях. Учитывая особенности воды как растворителя, содержащего радикалы и заряженные фрагменты данного растворителя при облучении, разумно предположить и в других гидросоединениях, а именно в ВРА, существование заряженных форм (катионных и анионных).

В соответствии со сказанным выше предметом настоящего исследования явилось установление влияния заряда на спектры бисфенола А, а также влияние заряда на фотолиз ВРА под воздействием солнечного излучения. Авторы [10] исследовали поведение нейтрального ВРА под действием солнечной радиации и пришли к выводу, что в воде водоемов и в сточных водах при добавлении NaClO и без него не происходит полного разрушения ВРА, хотя известно [5–7], что использование УФ-источников света в сочетании с различными химическими реагентами способствует усилению его деградации.

* Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № 0721-2020-0033.

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>