

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВИБРОННОЙ СТРУКТУРЫ
СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ТИАЗИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ***А.Е. Курцевич¹, О.Н. Чайковская^{1,2}, В.С. Чайдонова^{1,3}¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*² *Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*³ *Центр гигиены и эпидемиологии в Республике Хакасия, г. Абакан, Россия*

Проведено теоретическое моделирование методом TDDFT изменения вибронных спектров поглощения и флуоресценции в молекулах двух красителей тиазинового ряда – метиленового синего и метиленового зеленого, при переходе из кислотной среды в щелочную. Показано, что введение NO₂-группы приводит к более разрешенным вибронным спектрам в случае низких значений pH и к противоположному эффекту при высоких значениях pH. Объяснить этот эффект можно внутримолекулярным взаимодействием функциональных групп, входящих в состав соответствующих молекул.

Ключевые слова: метиленовый синий, метиленовый зеленый, тиазиновые красители, квантовая химия.

Введение

Тиазиновые красители давно известны и имеют значительное применение в таких сферах, как медицина, бактериология, микроскопия, фотохимия, текстильная промышленность, аналитическая химия и квантовая электроника. Этот факт поддерживает интерес к изучению фотофизических свойств молекул данного класса. Важными представителями этого ряда соединений являются метиленовый синий (MB) и метиленовый зеленый (MG), которые, первоначально, нашли свое применение в качестве красителей различных тканей (шелка, хлопка), кожи, бумаги, а также пластмасс [1–3], позднее этот список был расширен, например, копировальной бумагой и лаковыми красителями. В настоящее время эти соединения применяются в медицинской микроскопии в качестве подкрашивающих пигментов [4, 5]. На сегодняшний день нет полного понимания зависимостей типа структура – свойство для фотофизических процессов, протекающих в молекулах при возбуждении ультрафиолетовым и видимым светом [6–8]. Несмотря на широкое распространение в промышленной и научной сфере, свойства MB и MG по сравнению с фенотиазином до конца не изучены. Это делает актуальной задачу исследования и описания механизмов фотофизических процессов, протекающих в этих системах.

В данной работе проводится теоретическое предсказание структуры вибронных спектров поглощения и флуоресценции MB и MG на основе квантово-химических расчетов, выполненных в рамках теории функционала плотности.

Вычислительные детали

Первым этапом моделирования являлось получение корректных равновесных геометрий основного и возбужденного электронных состояний исследуемых молекул, а также спектра вертикальных переходов поглощения и флуоресценции – переходов без учета вибронных эффектов.

Следующий этап – получение матрицы Гесса и градиента энергии. На основе данных о вертикальных переходах и градиенте энергии в основном и возбужденном состояниях были получены теоретические спектры поглощения и флуоресценции с учетом влияния колебательных степеней свободы молекул.

Все расчеты проводились на уровне теории *BHandHLYP/aug-cc-pvdz*. В методе функционала плотности энергия электронной корреляции учитывается путем введения обменно-корреляционного функционала с некоторым нелокальным обменным интегралом. Для функционала *BHandHLYP* нелокальный обменный интеграл содержится в количестве 50% на всех межэлектронных расстояниях [9]. Все квантово-химические вычисления проводились при помощи программного пакета *Orca 4.2.1* [10, 11], вибронные спектры получены при помощи программы *orca_asa* (ASA – «Advanced Spectral Analysis») [12]. Для моделирования низких значений pH (кис-

* Результаты были получены при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-32-90116).

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>