

## ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539.194:535.37

DOI: 10.17223/00213411/64/8/3

*О.Н. ЧАЙКОВСКАЯ, О.К. БАЗЫЛЬ, Е.Н. БОЧАРНИКОВА*

## СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА И ФОТОЛИЗ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОЛА \*

Экспериментально и методами квантовой химии исследованы спектрально-люминесцентные свойства и фотолиз фенола и некоторых его производных. Показано, что замещение метильной группой (*n*-крезол) и введение второго бензольного кольца (бисфенол А) приводят к сдвигу полос поглощения в сторону длинных волн и некоторому изменению их интенсивности. Неплоское строение *n*-крезола и бисфенола А способствует росту эффективности синглет-триплетной конверсии и, как следствие этого, снижению квантового выхода флуоресценции. Расчетами установлены механизмы фотолиза рассмотренных молекулярных систем. Показано, что в феноле и *n*-крезоле происходит разрыв О–Н-связи по механизму преддиссоциации. Фотолиз бисфенола А под действием солнечной радиации протекает по механизму прямой диссоциации, но с заметным потенциальным барьером ( $\sim 12000 \text{ см}^{-1}$ ).

**Ключевые слова:** фенол, *n*-крезол, бисфенол А, фотофизические процессы, квантово-химический расчет, фотолиз, спектрально-люминесцентные свойства.

## Введение

Широкое распространение фенолов в окружающей среде обусловлено их физико-химическими свойствами, а именно хорошей растворимостью как в водной среде, так и в органических матрицах, низким давлением паров и высокой реакционной способностью [1–3]. Фенолы образуют группу ароматических органических соединений, которые содержат гидроксильные группы, связанные с бензольными кольцами. Фенольные соединения являются ингибиторами свободно-радикальных процессов и широко распространены в биомедицине [4–6]. Природные фенолы используются как антиоксиданты. Производные фенола находят применение в терапии хронических воспалительных заболеваний иммунной природы, таких, как гепатит, дерматит, ревматизм и экзема. Они используются для лечения ран и защиты тканей от проникающей радиации и от действия сильных окислителей [7]. Фенол и *n*-крезол являются известными антибактериальными агентами широкого спектра действия, обладают противовоспалительными свойствами, действуют на грамм-положительную и грамм-отрицательную флору, а также на грибковые микроорганизмы, поэтому их активно используют в качестве антибактериальной добавки в полимеры [8, 9]. Изучение фенолов оптическими и квантово-химическими методами актуально в связи с высокой фармакологической активностью этих соединений [10–13].

Фенол и его основные производные относят к основным токсикантам, загрязняющим окружающую среду. Они принадлежат к соединениям первого и третьего классов опасности. *n*-Крезол и бисфенол А входят в состав многих композиционных полимерных материалов либо как мономеры, либо как антиоксидантные или консервирующие добавки. Так, к примеру, бисфенол А является одним из ключевых мономеров в производстве эпоксидных смол и поликарбонатных пластиков [14, 15], а также отвердителем и стабилизатором в полимерных материалах. Фенолы попадают в поверхностные воды со стоками предприятий нефтеперерабатывающей, сланцеперерабатывающей, лесохимической, коксохимической, анилинокрасочной и др. промышленности. В водах они могут находиться в растворенном состоянии в виде фенолятов и свободных фенолов. При обработке хлором воды, содержащей примеси фенола, могут образовываться очень опасные органические токсиканты – диоксины. В загрязненных природных водах содержание фенолов может достигать сотен микрограммов на литр. Сброс фенольных вод в водоемы и водотоки резко ухудшает их общее санитарное состояние, оказывая влияние на живые организмы не только своей токсичностью, но и значительным изменением режима биогенных элементов и растворенных газов (кислорода, углекислого газа). Процесс самоочищения водоемов от фенола протекает относительно медленно, и его следы могут уноситься течением реки на большие расстояния. Присутствие даже очень малых количеств фенола в воде, предназначенной для хозяйственно-питьевых целей, значительно ухудшает ее качества.

\* Результаты были получены в рамках выполнения госзадания 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>