

Тематический раздел: Физико-химические исследования.
Подраздел: Органическая химия.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 13-35-8-1

Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
“Структура и динамика молекулярных систем”. Яльчик-2013.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 4 мая 2013 г. УДК 539.194: 535.343:535.37.

Возбужденные электронные состояния и интеркомбинационная конверсия в филлохиноне

© Цеплина⁺ Светлана Николаевна, Цеплин* Евгений Евгеньевич
и Хвостенко Ольга Григорьевна

Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук.
Проспект Октября, 151. г. Уфа, 450075. Россия. Тел.: (347) 292-14-17. E-mail: sn_tseplina@mail.ru

^{*}Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: синглет-триплетная интеркомбинационная конверсия, филлохинон,
возбужденные спектроскопические состояния.

Аннотация

Получены спектры оптического поглощения, люминесценции и возбуждения филлохинона (витамина K1). На основании расчетов TDDFT B3LYP/6-31+G(d,p) проведено отнесение полос поглощения к определенным синглетным переходам. Выявлено, что в филлохиноне регистрируется два разных спектра возбуждения, в зависимости от длины волны регистрации, один из которых связан с процессом флуоресценции, а другой – фосфоресценции, в согласии также с соответствующим отнесением полос люминесценции. На основе комплексного анализа спектров поглощения, люминесценции и возбуждения, а также применяя правило отбора показано, что интеркомбинационная конверсия в филлохиноне преимущественно происходит между состояниями S₁ и T₂.