

## Синглетные и триплетные переходы в УФ-спектрах оптического поглощения перилена

© Хатымова<sup>+</sup> Ляйсан Зявдатовна, Хвостенко\* Ольга Григорьевна,  
Хатымов Рустем Владиславович и Цеплин Евгений Евгеньевич

Лаборатория масс-спектрометрии отрицательных ионов и спектроскопии молекул. Институт  
физики молекул и кристаллов УНЦ РАН. Пр. Октября, 151. г. Уфа, 450075. Республика  
Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 231-91-68. E-mail: lesya0706@ya.ru

\* Ведущий направление; <sup>+</sup> Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** конденсированные ароматические соединения, перилен, электронное строение, синглетные электронно-возбужденные состояния, триплетные состояния, УФ-спектроскопия оптического поглощения, фотоэлектронная спектроскопия.

### Аннотация

Получены УФ-спектры оптического поглощения перилена в разных растворителях. Записан обзорный УФ-спектр синглетных переходов в циклогексане и УФ-спектр триплетных переходов в бромпропане. Использована методика регистрации триплетных переходов, основанная на применении кюветы с большой длиной оптического пути и растворителя, в структуре которого имеется тяжелый атом (Br), увеличивающий спин-орбитальное взаимодействие в исследуемой молекуле и тем самым вероятность образования триплетных состояний. Типы синглетных и триплетных электронно-возбужденных состояний перилена, доминирующие электронные конфигурации установлены с помощью квантово-химических расчётов TD B3LYP/6-31G. Характер занятых и вакантных молекулярных орбиталей, участвующих в электронных переходах, определен на основе литературного фотоэлектронного спектра перилена с отнесением полос фотоионизации методом B3LYP/6-31G. Показано, что энергия первого вертикального триплетного перехода в перилене составляет 1.92 эВ, что примерно на 0.4 эВ больше энергии адиабатического перехода, измеренной ранее другими авторами методами люминесценции.