

Синглетные и триплетные переходы в УФ-спектрах оптического поглощения пирена

© Хатымова⁺ Ляйсан Зявдатовна, Хвостенко* Ольга Григорьевна
и Хатымов Рустем Владиславович

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; ⁺Поддерживающий переписку

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

Аннотация

Записаны УФ-спектры оптического поглощения пирена. «Обзорный» УФ спектр, показывающий картину переходов молекулы в синглетные электронно-возбужденные состояния в области 1-6 эВ, получен в циклогексане. Спектр оптического поглощения, демонстрирующий прямые вертикальные переходы молекулы в триплетные состояния, зарегистрирован в кювете с большой длиной оптического пути в бромпропане. Установлена экспериментальная энергия первого вертикального триплетного перехода в пирене как 2.75 эВ, что на 0.6 эВ выше первого адиабатического триплетного перехода, полученного ранее другими авторами методами флуоресценции. Отнесение полос полученных УФ спектров выполнено на основе квантово-химических расчётов TD B3LYP/6-311G. Электронное строение молекулы основного состояния, включая информацию о занятых и вакантных молекулярных орбиталях, задействованных в рассматриваемых электронных переходах, установлено на основе фотоэлектронного спектра пирена, взятого из литературы. В настоящей работе полосы фотоионизации указанного фотоэлектронного спектра отнесены к определенным занятым молекулярным орбиталям на основе расчетов B3LYP/6-311G. Определены симметрии и электронные конфигурации изученных синглетных и триплетных электронно-возбужденных состояний молекулы пирена.