

## Прогнозирование спектральных характеристик азопигментов при малом изменении их химической структуры на примере желтого светопрочного 2 «З»

© Дегтярев<sup>1\*</sup> Андрей Александрович, Ростова<sup>2</sup> Дария Павловна

Кафедра «Химия и химические технологии». Тамбовский государственный технический университет.  
ул. Советская, 106. г. Тамбов, 392000. Россия. Тел.: +7 (4752) 63-44-44.  
E-mail: <sup>1)</sup> ad.dycost@gmail.com ; <sup>2)</sup> rostova.dariya@yandex.ru

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

**Ключевые слова:** пигмент желтый светопрочный 2 «З», цветовой тон пигмента, оптическая спектроскопия, TD-DFT, ESD, молекулярный кластер, вибронные состояния.

### Аннотация

В работе исследованы спектры пигмента желтого светопрочного 2 «З» (M0) и двух его модификаций полученных заменой диазосоставляющей на 4-хлор-2-нитроанилин (M1) и 4-нитроанилин (M2). Были рассчитаны спектры вертикального возбуждения одиночной молекулы, спектры вертикального возбуждения бимолекулярного кластера (для учета экситонного расщепления) и проведен расчет динамики возбужденного состояния одиночной молекулы (для учета влияния вибронных состояний).

Определено, что учет экситонного расщепления смещает спектры исследованных пигментов в коротковолновую область, а учет вибронных состояний уширяет полосы поглощения асимметрично, в основном в длинноволновую область.

Для всех подходов наблюдается увеличение координаты тона цветового пространства LCH в ряду  $N_{M0} < N_{M1} < N_{M2}$ . Для кластерного подхода смещение тона модификаций по сравнению с исходным пигментом составило  $\Delta N_{M1} = 3.8^\circ$  и  $\Delta N_{M2} = 4.8^\circ$ , для подхода с использованием динамики возбужденного состояния  $\Delta N_{M1} = 12.9^\circ$  и  $\Delta N_{M2} = 15.5^\circ$ . Экспериментальное смещение для модификации M2  $\Delta N = 6.2^\circ$ .

Определено, что по сравнению с экспериментальным спектром кластерный предсказывает заниженную интенсивность для длинноволновой части спектра, где основной вклад дают вибронные состояния, а подход с использованием динамики возбужденного состояния предсказывает уширение полосы поглощения в длинноволновой области за счет лишних колебательно-вращательных степеней свободы, которые не реализуются в реальном кристалле. Комбинация данных подходов может вполне надежно использоваться для прогнозирования смещения тона пигмента при изменении его химической структуры.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Дегтярев А.А., Ростова Д.П. Прогнозирование спектральных характеристик азопигментов при малом изменении их химической структуры на примере желтого светопрочного 2 «З». *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №9. С.18-24. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-18

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Дегтярев А.А., Ростова Д.П. Прогнозирование спектральных характеристик азопигментов при малом изменении их химической структуры на примере желтого светопрочного 2 «З». *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.8. №3. Id.16. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-18/ROI-jbc-RA/24-8-3-16

### The output for citing the English online version of the article:

Andrey A. Degtyarev, Daria P. Rostova. Prediction of spectral characteristics of azopigments with a small change in their chemical structure using the example of pigment Yellow 3. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.8. No.3. Id.16. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-18/ROI-jbc-A/24-8-3-16