

УДК 539.19

Д.И. Волкович, мл. науч. сотр.
(Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, г. Минск);
В.А. Кузьмицкий, вед. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук
(КИИ МЧС Республики Беларусь, г. Минск);
К.Н. Соловьев, член-кор., д-р. физ.-мат. наук
(Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, г. Минск)

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА INDO/Sm ДЛЯ РАСЧЕТОВ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Развитие вычислительной техники сделало возможным выполнение квантовохимических расчетов возбужденных электронных состояний молекул класса тетрапирролов на уровне *ab initio* и DFT/TDDFT. Однако достигнутая при этом точность для энергии уровней не превосходит точность полуэмпирических методов. Нами [1] при варьировании параметров метода INDO/S проведены обширные расчеты молекул порфина и Mg-порфина, на основании чего предложена его модифицированная параметризация (INDO/Sm). Показано, что воспроизведение положения Q- и В-переходов в экспериментальных электронных спектрах с точностью $\sim 300 \text{ см}^{-1}$ возможно только при одновременном изменении и одноэлектронных, и двухэлектронных интегралов. Методом INDO/Sm рассчитаны электронные спектры фундаментальных тетрапиррольных структур, включая хлорин, бактериохлорин, тетрабензопорфин, тетраазапорфин; результаты для энергии Q-уровней согласуются с наблюдаемыми с погрешностью $\sim 300\text{-}700 \text{ см}^{-1}$, в то время как погрешность расчетов INDO/S составляет не менее 3000 см^{-1} . Параллельно с экспериментальными исследованиями методом INDO/Sm выполнены обширные расчеты [2-5] нескольких рядов тетрапиррольных соединений, в том числе аналогов фталоцианина с пятичленными гетероароматическим циклами, фенилзамещенных порфиразинов, аналогов бактериохлорофилла и др., что позволило установить существенные спектрально-структурные корреляции.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Кузьмицкий В.А., Волкович Д.И. // ЖПС. **75** (2008) 28.
- 2 Волкович Д.И. и др. // ЖПС. **75** (2008) 606.
- 3 Solovyov K.N. et al // *Macroheterocycles*. **3** (2010) 51.
- 4 Волкович Д.И. и др. // ЖПС. **78** (2011) 171.
- 5 Кнюкшто В.Н. и др. // *Оптика и спектр*. **113** (2012) 401.