

УДК 535.37+541.65+543.4

Т.Б. Карлович, ст. преп., канд. физ.-мат. наук;  
Ю.Х. Аджиб, асп. (АУЛ, г. Бейрут, Ливан);  
Н.Н. Крук, зав. каф. физики, д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

## **ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ NH-ТАУТОМЕРИЗАЦИИ СВОБОДНЫХ ОСНОВАНИЙ КОРРОЛОВ**

Методами флуоресцентной спектроскопии и математического моделирования изучена NH-таутомеризация свободных оснований корролов. Задача рассмотрена с использованием квантово-механической модели, включающей в себя переходы между возбужденными состояниями двух таутомеров. Экспериментально показано, что существует потенциальный барьер с некоторой энергией активации, разделяющий длинноволновой T1 и коротковолновой T2 таутомеры. При низких температурах концентрация таутомеров T2 в растворе превышает концентрацию T1 таутомеров благодаря малой скорости перехода между двумя таутомерами. Однако с увеличением температуры скорость таутомеризации будет возрастать и достигнет значения, необходимого для преодоления потенциального барьера. В этом случае концентрация таутомера T1 в возбужденном состоянии будет увеличиваться. При этом обратный процесс таутомеризации с превращением таутомера T1 в таутомер T2 отсутствует, что показано экспериментально.

Определена величина энергии активации для таутомеризации в нижнем возбужденном синглетном состоянии, определена константа скорости таутомеризации как функция температуры. Получены выражения описывающие динамику населенностей энергетических состояний обоих таутомеров как функцию времени после фотовозбуждения. Выполнен совместный анализ теоретических и экспериментальных результатов и показано, что температурная зависимость спектров флуоресценции, обусловленная протеканием процессов NH-таутомеризации, может быть адекватно описана с помощью полученных выражений для населенностей нижних возбужденных синглетных состояний таутомеров.