

**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Влияние гетероатомного замещения на электронные спектры
поглощения порфиринов по данным квантово-химических
расчетов**

И.А.Кузьмин, Ю.А.Жабанов

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский проспект д.7, г. Иваново, Россия, e-mail: wonderful_37@list.ru*

Фотофизические свойства порфиринов, а именно их способность поглощать энергию в видимом диапазоне длин волн, важный параметр для их применения в медицинской, энергетической и каталитической промышленности.

В данной работе квантово-химически было исследовано влияние гетероатомного замещения внутри макроциклической полости порфирина, на электронные спектры поглощения. В качестве объектов исследования были выбраны 21-оксапорфирин, 21-тиапорфирин и 21,23-дитиапорфирин. Квантово-химические расчеты молекулярной структуры и электронных спектров поглощения проводились в приближении B3LYP/cc-pVTZ

При замене внутрициклического атома азота на гетероатом (O, S), происходит bathochromic смещение максимумов поглощения, что свидетельствует об уменьшении энергии необходимой для перевода молекулы в возбужденное состояние, рисунок 1.

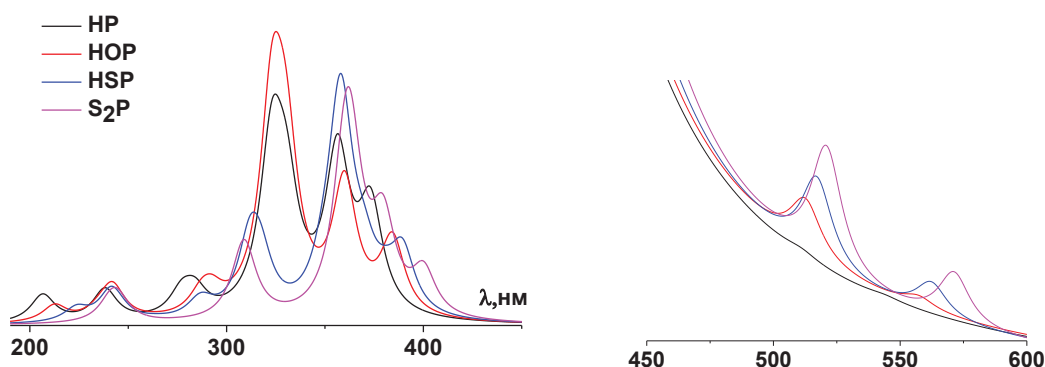


Рисунок 1. Теоретические электронные спектры поглощения порфирина, 21-оксапорфирина, 21-тиапорфирина и 21,23-дитиапорфирина

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-73-10107