

**ФОТОСЕНСИБИЛИЗИРУЮЩАЯ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ
АКТИВНОСТЬ ХЛОРОФИЛЛА В ПРОЦЕССАХ ВЗАИМОПРЕВРАЩЕНИЯ
O₂ И H₂O₂: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ
ИССЛЕДОВАНИЕ**

**А. В. Лобанов¹, Г. И. Кобзев², Н. А. Смирнов³, Г. В. Синько³, О. В. Неврова¹,
Г. Г. Комиссаров¹**

¹*Институт химической физики имени Н.Н. Семенова РАН*

²*Оренбургский государственный университет*

³*Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени Е.И. Забабахина*

Рассмотрены процессы образования и распада H₂O₂ в насыщенных кислородом воздуха системах, содержащих хлорофилл (Chl) при освещении. Облучение проводили светом галогенной лампы в комплекте с линзами, конденсором и светофильтром КС-13, отсекающим излучение с $\lambda < 630$ нм, в кварцевых кюветах толщиной 1 см. Мощность светового потока составляла 20-80 мВт/см². Проанализированы водно-мицеллярные и водно-белковые системы на основе Chl, растворы Chl в CCl₄, CHCl₃, EtOH с добавками воды (смешанные или двухфазные системы) и водные суспензии кремнеземов с адсорбированным Chl. Квантовохимические расчеты комплексов Chl-O₂ и Chl-H₂O₂ выполнены с набором базисных функций 6-31G** в DFT-приближении с использованием обменно-корреляционного функционала PBE1PBE в программе Gaussian 03 и другими методами.

Показано, что промежуточные частицы при образовании H₂O₂ – это ¹O₂, NO[•] и O₂^{•-} (соотношение радикальных АФК зависит от pH). По расчетам энергий взаимодействия Chl выступает как фотосенсибилизатором ¹O₂, так и частично его дезактиватором. Разложение H₂O₂, как обнаружено экспериментально, легче осуществляется ассоциатами Chl_n. Расчетами модельных систем Chld₂ и Chld₃ (Chld – хлорофиллид) выявлены их предпочтительные структуры и активные центры координации. Рассмотрена возможность сопряженной фотофиксации CO₂ в этих условиях.

Работа выполнена при поддержке программой Президиума РАН П-15 и Ведущей научной школой (грант НШ-65059.2010.3).