

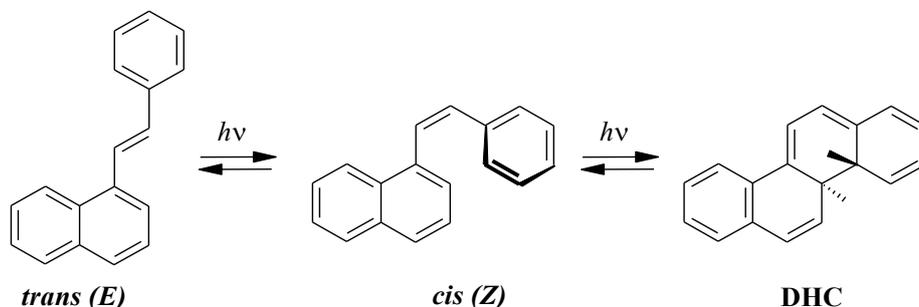
РАСЧЕТЫ ПУТЕЙ ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИИ И ФОТОЦИКЛИЗАЦИИ СТИРИЛНАФТАЛИНОВ И ПРОИЗВОДНЫХ

М.Ф.Будыка

Институт проблем химической физики Российской академии наук,

г. Черноголовка, E-mail: budyka@icp.ac.ru

Две основные внутримолекулярные фотохимические реакции диарилэтиленов (ДАЭ) - фотоизомеризация и фотоциклизация - могут протекать по диабатическому или адиабатическому пути. Имеется много примеров адиабатической *транс-цис* фотоизомеризации, в то время как круг соединений, вступающих в адиабатическую *транс-цис* фотоизомеризацию, ограничен производными 1-стирилнафталина (1SN). Предположения об адиабатическом характере фотоизомеризации основаны на фактах образования продуктов фотоциклизации – производных дигидрохризена (ДНС) – в одноквантовом процессе при возбуждении *транс*-изомера, что рассматривается как свидетельство о промежуточном участии возбужденного *цис*-изомера, поскольку фотоциклизация протекает только в S_1 -состоянии.



В докладе рассматриваются результаты расчетов поверхностей потенциальной энергии S_1 -состояния в области координат реакций фотоизомеризации и фотоциклизации для 1SN и некоторых его производных. Расчеты показали, что возможен прямой переход от *транс*-изомера через "перпендикулярный" и "перициклический" минимумы к ДНС минуя область координат *цис*-изомера. На основании полученных данных делается вывод, что образование продукта фотоциклизации в одноквантовом процессе при возбуждении *транс*-изомера не обязательно свидетельствует об адиабатическом характере реакции фотоизомеризации, поскольку может протекать без участия *цис*-изомера.