

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТОПИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРАХ СТИЛЬБЕНА С ПОМОЩЬЮ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ

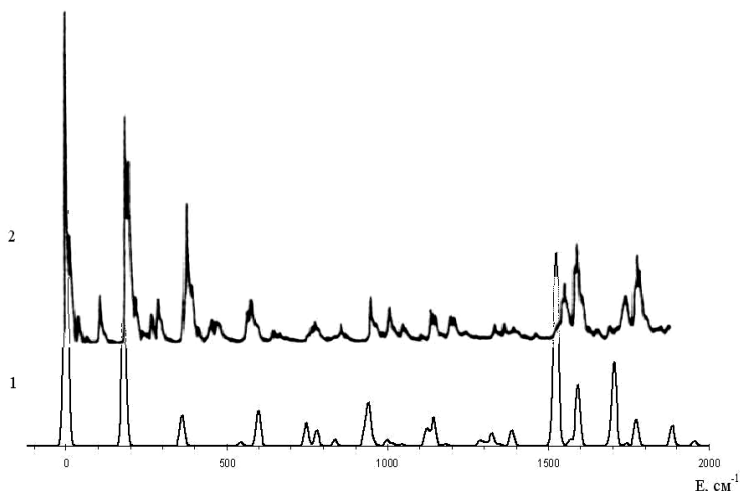
А.Н. Соловьев, В.И. Баранов

Смоленская сельскохозяйственная академия

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.Вернадского РАН

В рамках второго приближения параметрического метода теории электронно-колебательных спектров вычислено распределение интенсивности в вибронных спектрах ряда дейтерозамещенных производных стильбена. Показано, что для вычисления применима система параметров, которая была получена для незамещенных полиенов и аценов. В результате расчета получены теоретические

спектры, вибронная структура которых согласуется с экспериментом с достаточной для сопоставления точностью. Замена масс водородных атомов на массы дейтерия в расчете приводит к таким же качественным и количественным изменениям в спектре, что и в



Спектр флуоресценции стильбена-d12.
1 - расчет, 2 - эксперимент.

эксперименте.

Модель дейтерированной молекулы отличается от недейтерированной только массами атомов на концах СН связей. Это приводит к изменению (в разной степени) частот и форм всех колебаний молекулы. Из частот, которые участвуют в формировании вибронной структуры спектра, изменения главным образом касаются тех колебаний, где главную роль играют «качания» СН (CD) связей в плоскости молекулы. В спектре недейтерированной молекулы они занимают диапазон 1100 – 1400 см⁻¹, а в спектре дейтерированной смещены на 100 – 300 см⁻¹ в сторону меньших частот.