

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ИСПУСКАНИЯ КРАСИТЕЛЯ НИЛЬСКОГО КРАСНОГО И ЕГО КОМПЛЕКСОВ С РАЗЛИЧНЫМИ АНАЛИТАМИ ДЛЯ ВИРТУАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ХЕМОСЕНСОРОВ

Фрейдзон А.Я., Сафонов А.А., Багатурьянц А.А.

Центр Фотохимии РАН, Москва

Фрейдзон А.Я.
Сафонов А.А.
Багатурьянц А.А.
Центр Фотохимии РАН

Методом TDDFT с функционалом PBE0 и дисперсионной поправкой Гримме рассчитаны спектры поглощения и испускания красителя Нильского Красного, предлагаемого в качестве индикатора для молекулярных хемосенсоров, а также его межмолекулярных комплексов с различными аналитами. Ряд аналитов включал воду, аммиак, метанол, этанол, ацетон, ацетонитрил, хлороформ и бензол.

Для комплексов с различным расположением красителя и аналита рассчитывались энергии связи в основном состоянии. Обнаружено, что спирты образуют наиболее прочные комплексы с красителем, энергия связи воды несколько меньше. Аммиак и органические растворители образуют слабо связанные комплексы.

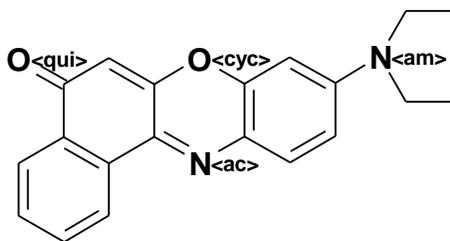


Рис.1. Сайты связывания аналитов в Нильском Красном

Обнаружено, что комплексообразование с аналитами незначительно влияет на положение полосы поглощения и полосы флуоресценции из локально-возбужденного (LE) состояния. Однако испускание из скрученного состояния с переносом заряда (TICT) оказалось крайне чувствительным к комплексообразованию. Наиболее отчетливо этот эффект проявляется в комплексах со спиртами и, в меньшей степени, с водой.

Обнаружено также, что диполь-дипольное взаимодействие между красителем и аналитом в возбужденном состоянии сильнее, чем в основном, за счет большего дипольного момента красителя в возбужденном состоянии.

Таким образом, показано, что TICT флуоресценция Нильского Красного может служить аналитическим сигналом при определении наличия спиртов в воздухе, но не позволяет различить метанол и этанол.