

УДК 539.194: 535.37

## МЕХАНИЗМ СПЕЦИФИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ПОЛЯРНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ В СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ РЯДА ХИНОНОВ

Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН  
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71  
e-mail: tzeplin@mail.ru*

Сдвиги полос поглощения при переходе от неполярных растворителей к полярным обусловлены изменением межмолекулярного взаимодействия между молекулами растворенного вещества и молекулами растворителя, которое приводит к изменению энергетического расстояния между основным и возбужденным состояниями молекул растворенного вещества. При этом более сильное влияние на сдвиги полос оказывает образование молекулярных комплексов (специфические эффекты растворителя), и в частности – комплекса с образованием водородных связей.

На примере ряда хинонов: *para*-бензохинона, дурохинона, 1,2-нафтохинона и 5,12-тетраценхинона, показано, что при образовании водородных связей молекулы хинона с молекулами метанола происходит изменение некоторых энергетических щелей между занятыми и вакантными молекулярными орбиталями молекулы хинона, что и приводит к сдвигу соответствующих полос поглощения в полярном растворителе (метаноле) по сравнению с неполярным (гексаном). Результат получен с использованием расчетов электронных спектров методом TDDFT B3LYP/6-311+G(d,p).