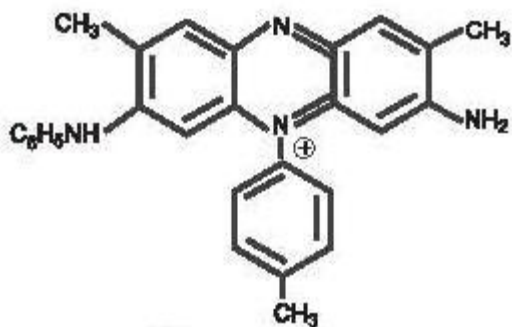


Молекулярна спектроскопія УФ і видимій області (використання барвників)

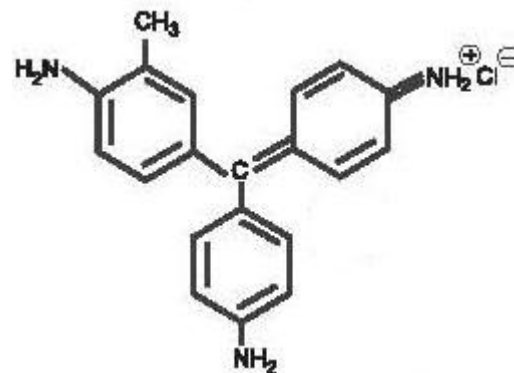
V. V. ІВАНОВ

- Materials Chemistry Department
- V. N. Karazin National University,
- 61077, Kharkiv, Ukraine
vivanov@karazin.ua

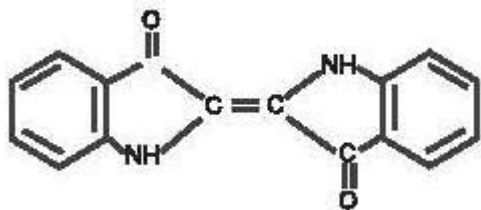
Перші синтезовані барвники



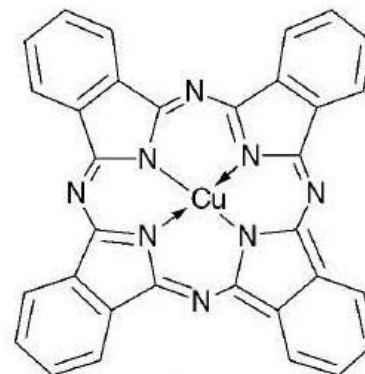
Мовеин (фіолетовий),
У. Перкин, 1856



Фуксин (червоний),
Я. Натансон, 1855

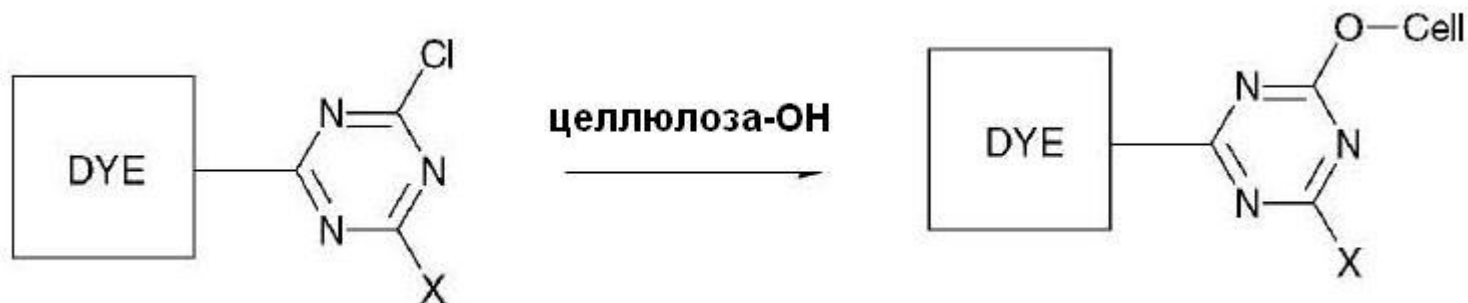


Індиго (синій)
А. фон Байер, 1883



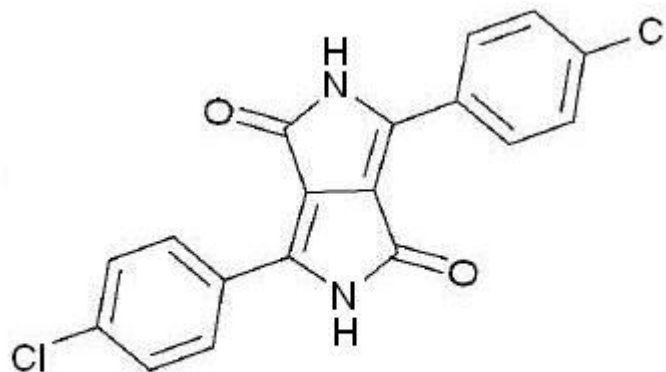
Фталоціанін купруму
(пігмент блакитний з
Зеленуватим відтінком)
20 роки 20 сторіччя

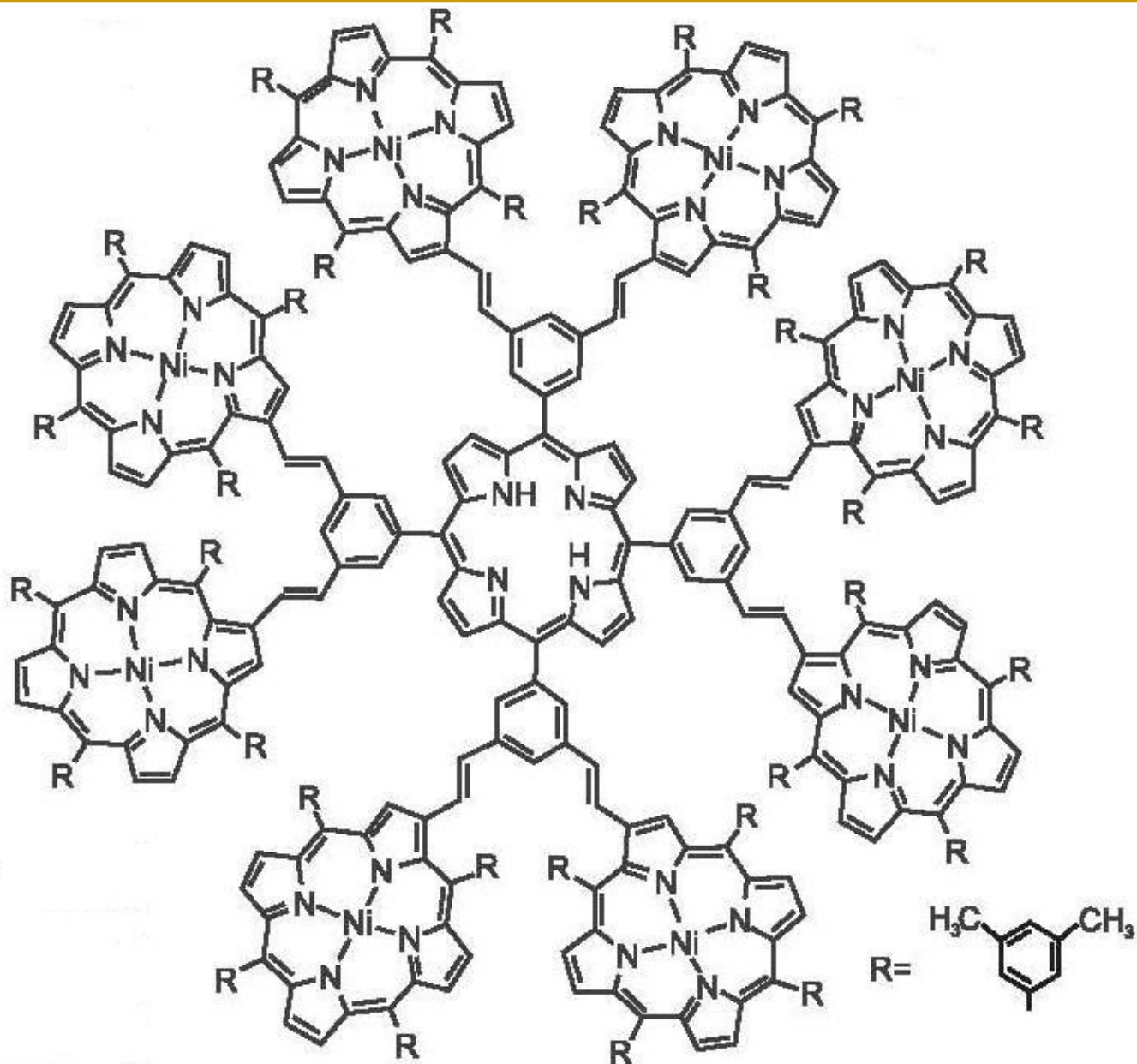
Проціонові барвники (1954)



Покраса тканини, бавовни, нейлона

Дикетопиролопіроли (1974)



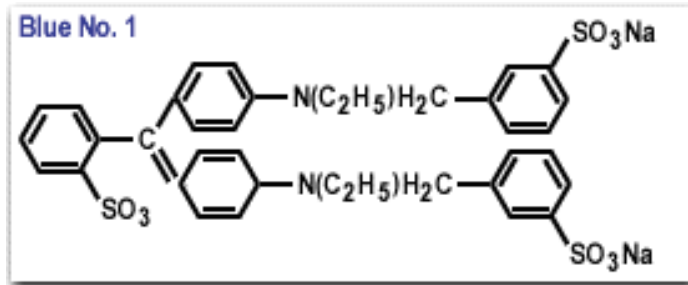


Сине-зелена окраска $\lambda(\text{max})=620 \text{ nm}$. Інтенсивне поглинання

Харчові барвники

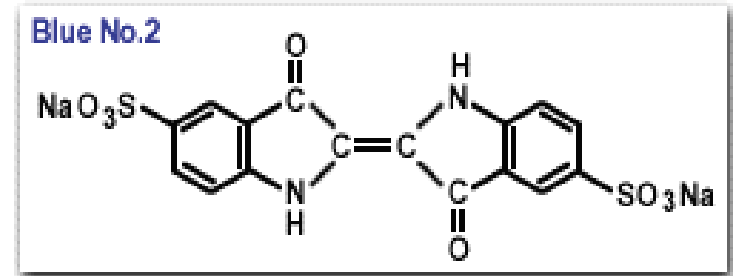
Яркий блакитний

Напої, желе, слоодке, приправи, глазурь



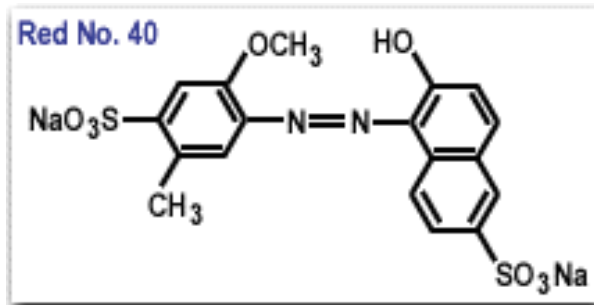
Королівський блакитний

Печиво, хліб, закуски, морзиво, солодке



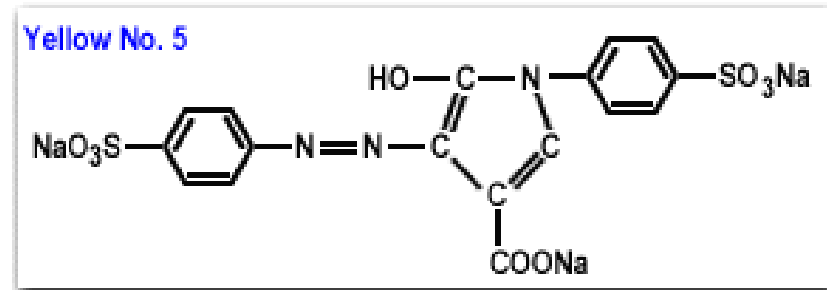
Помаранчево - червоний

Желатини, пудингі, солодке, печиво, приправи



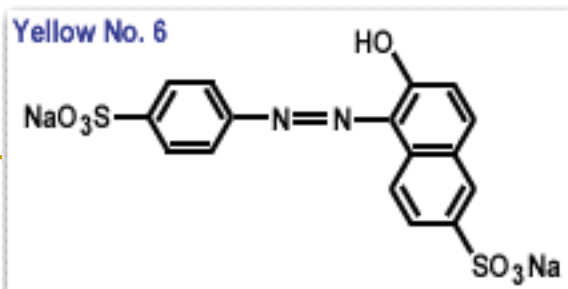
Жовто - лимонний

Печиво, морозиво, солодоці, консерви



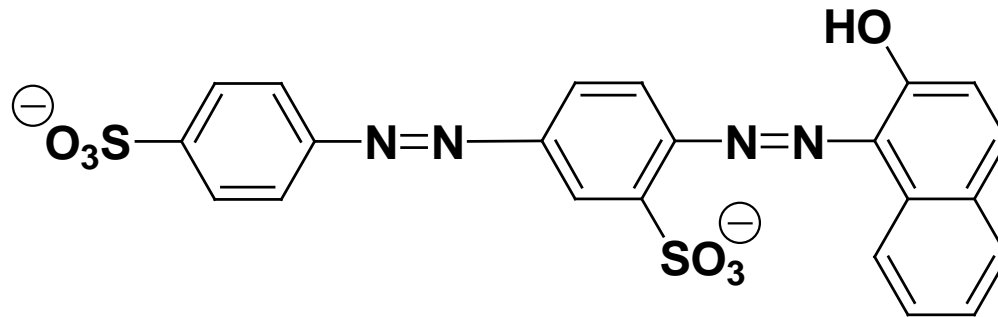
Жовто - Помаранчевий

Печиво, закуски, морозиво, десерт, солодоці



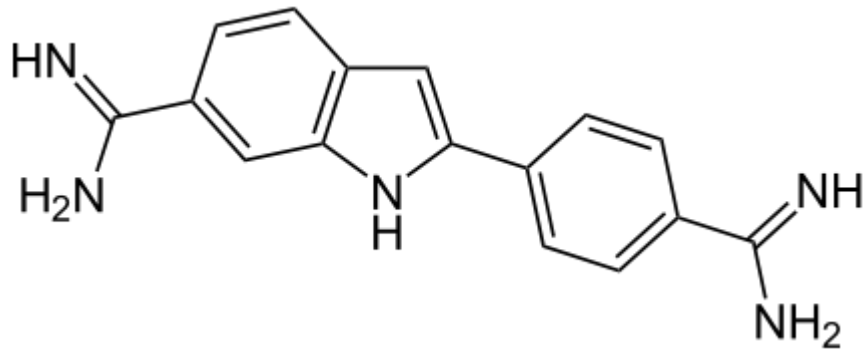
В біохімічних дослідженнях

В біологічних, біохімічних, медичинських дослідженнях барвники використовуються для селективного забарвлення різних тканин або кліткових структур.

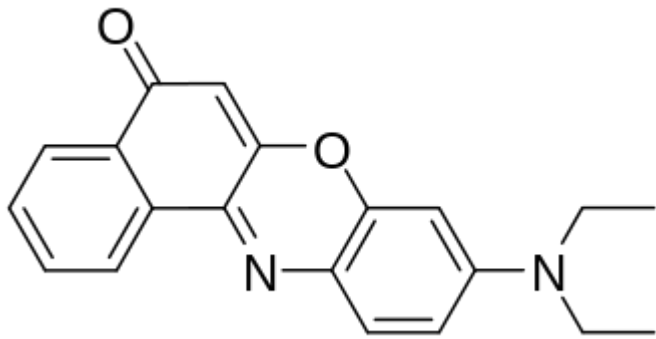


Biebrich Scarlet

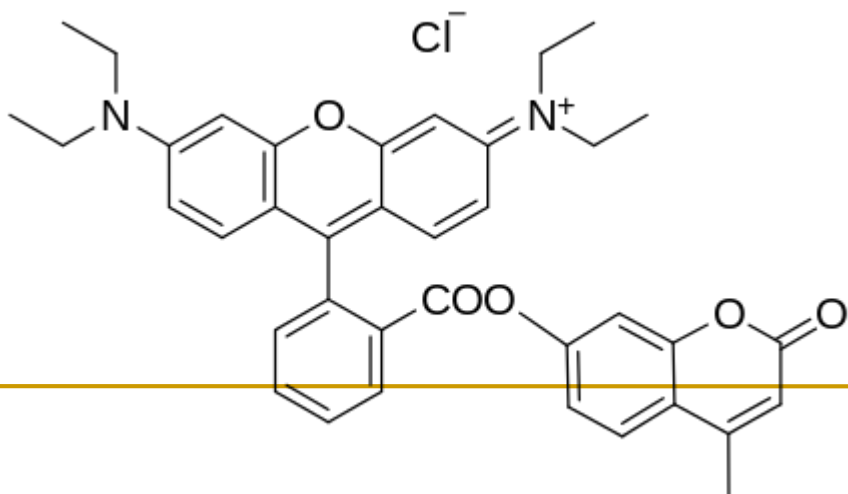
Забарвлення



ДНК ядра

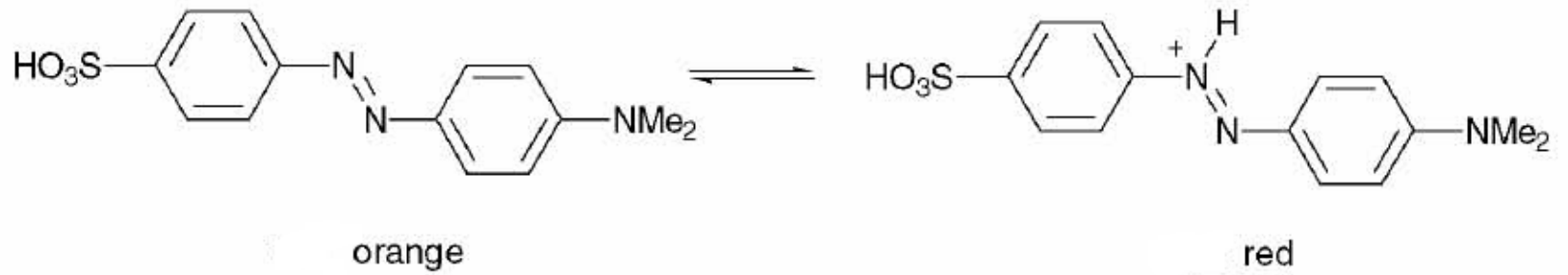


мембрани, ліпосоми

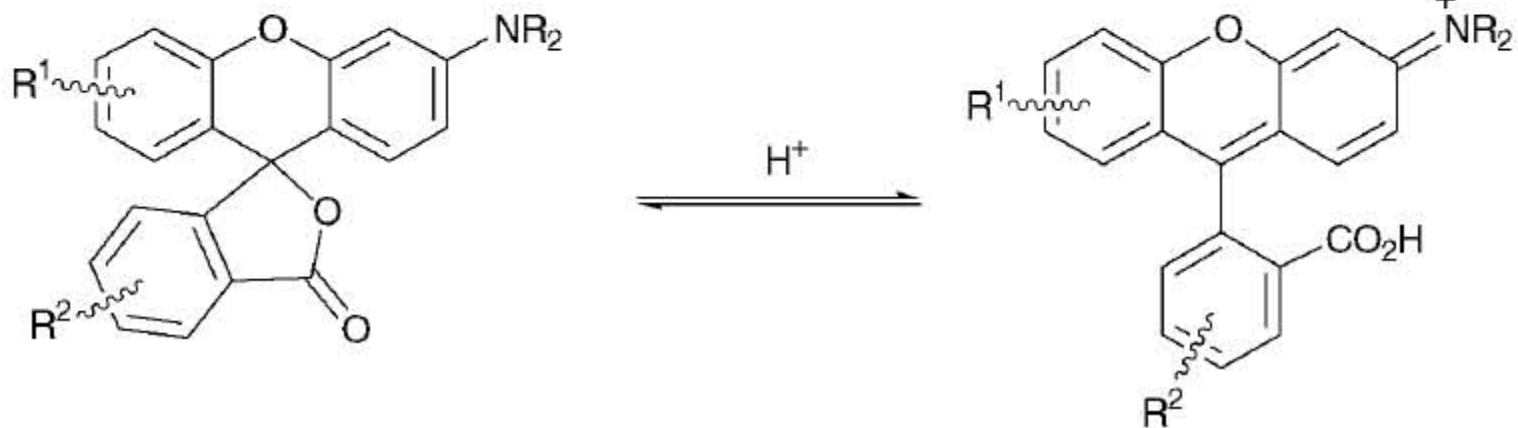
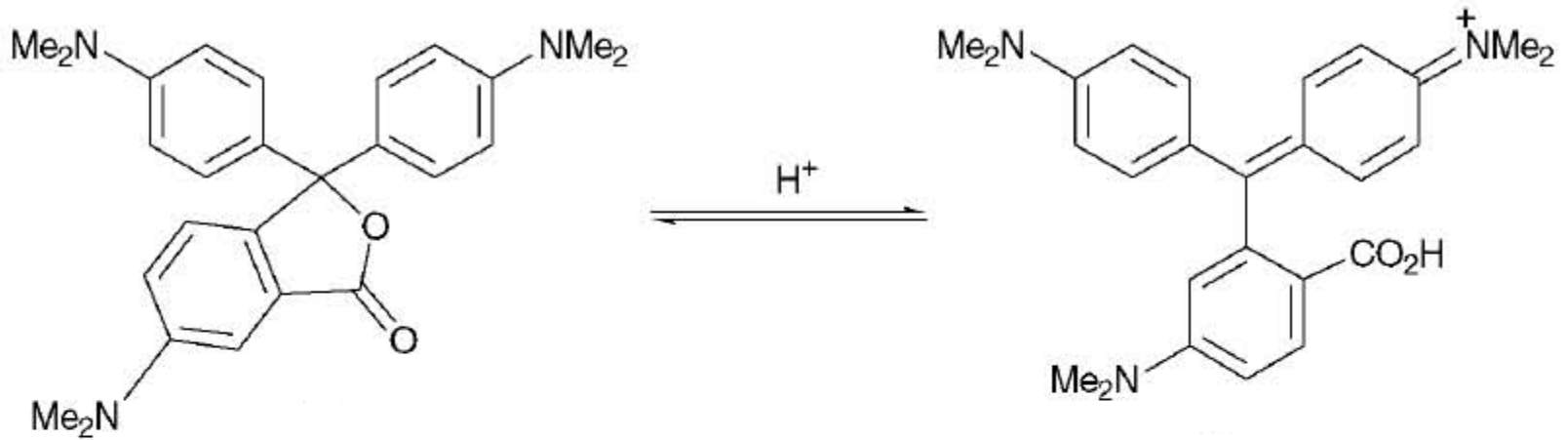


Мітохондрии

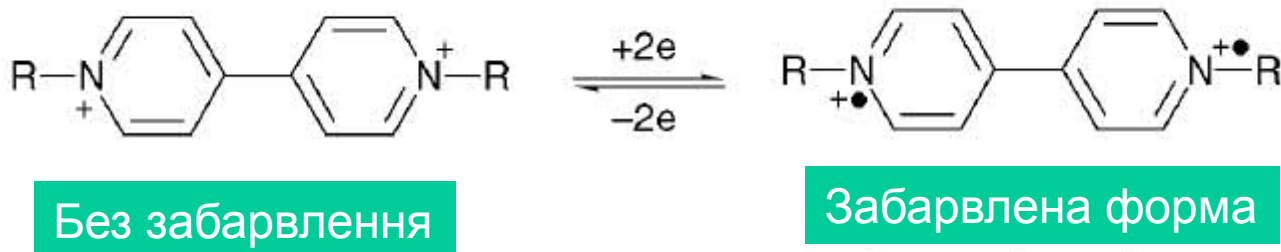
Хемохромізм



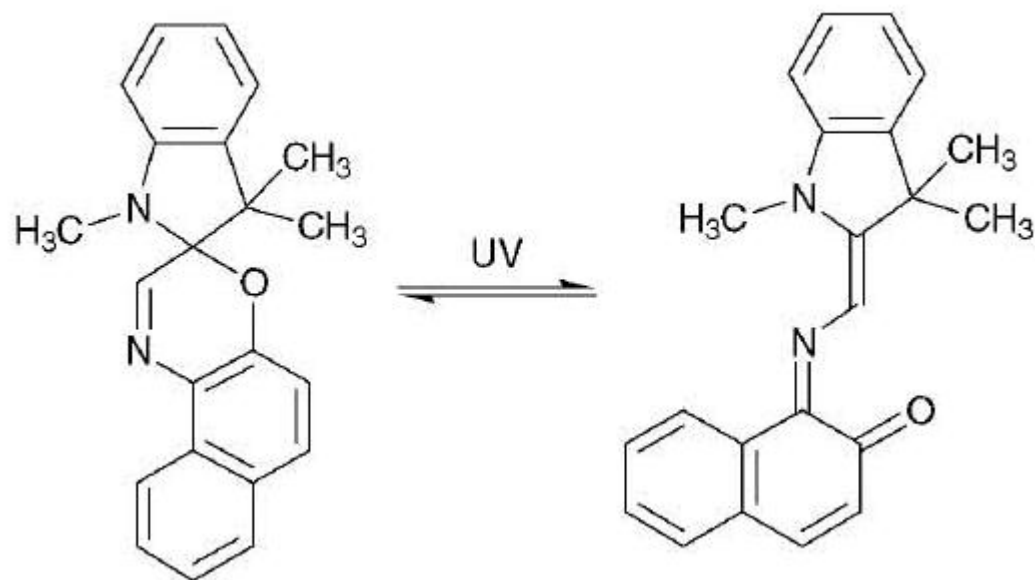
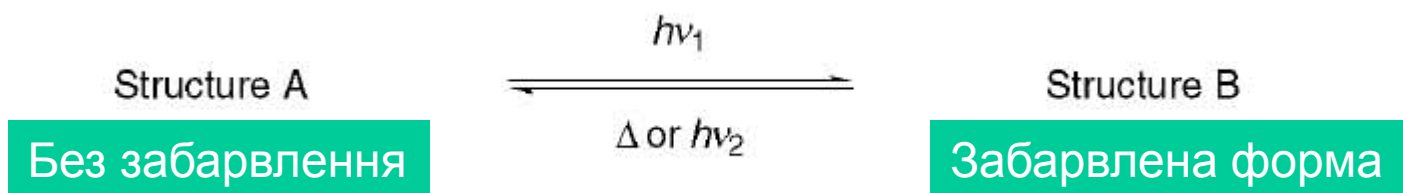
Термохромізм



Електрохромізм

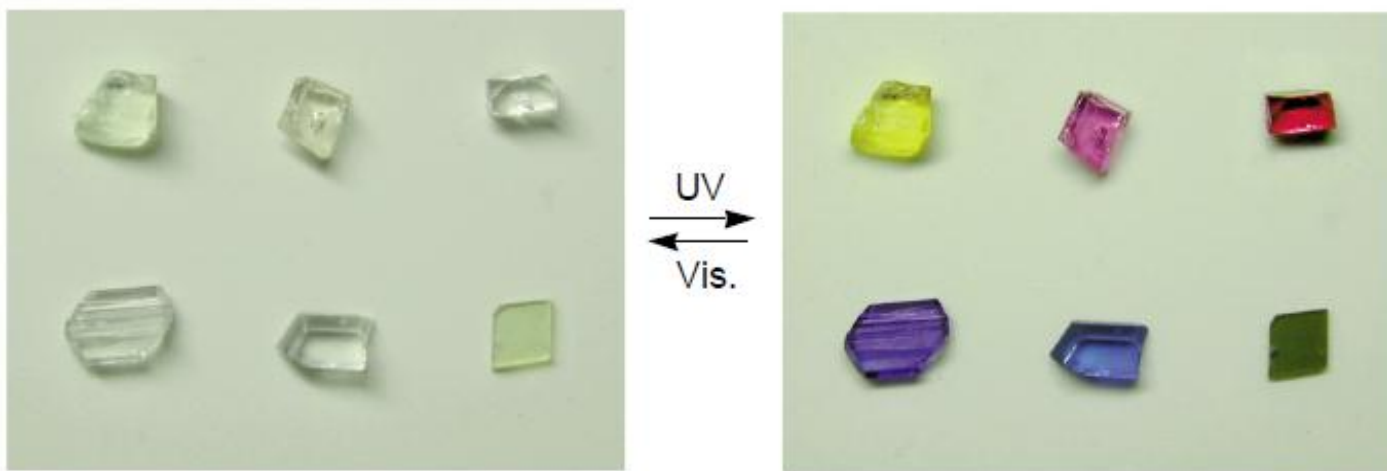


Фотохромізм

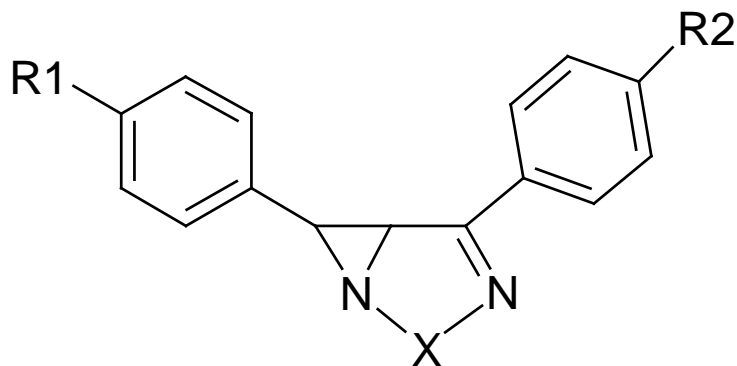


спироксазин

Зразки фотохромів

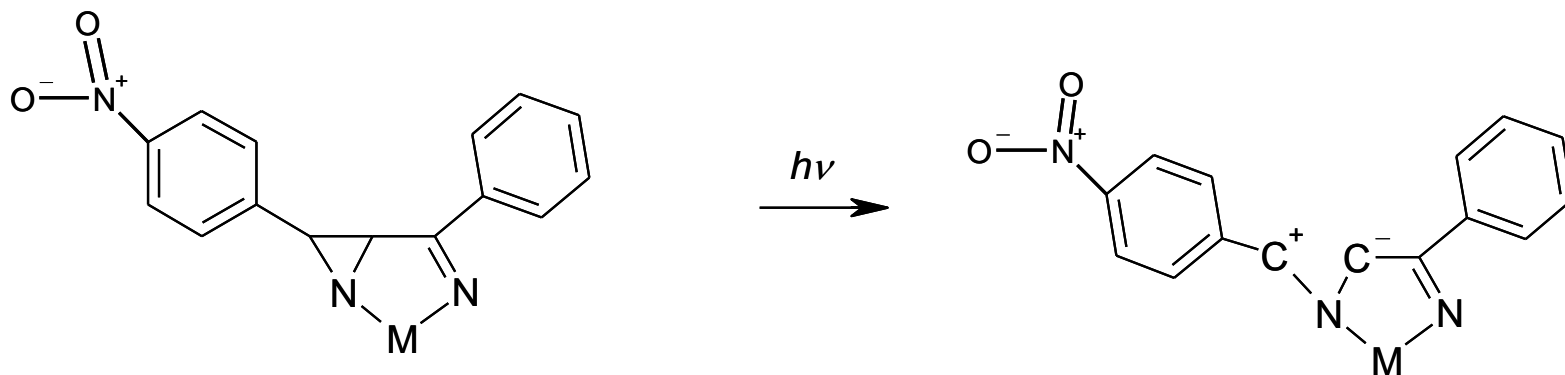


Фотохромізм азиридинів

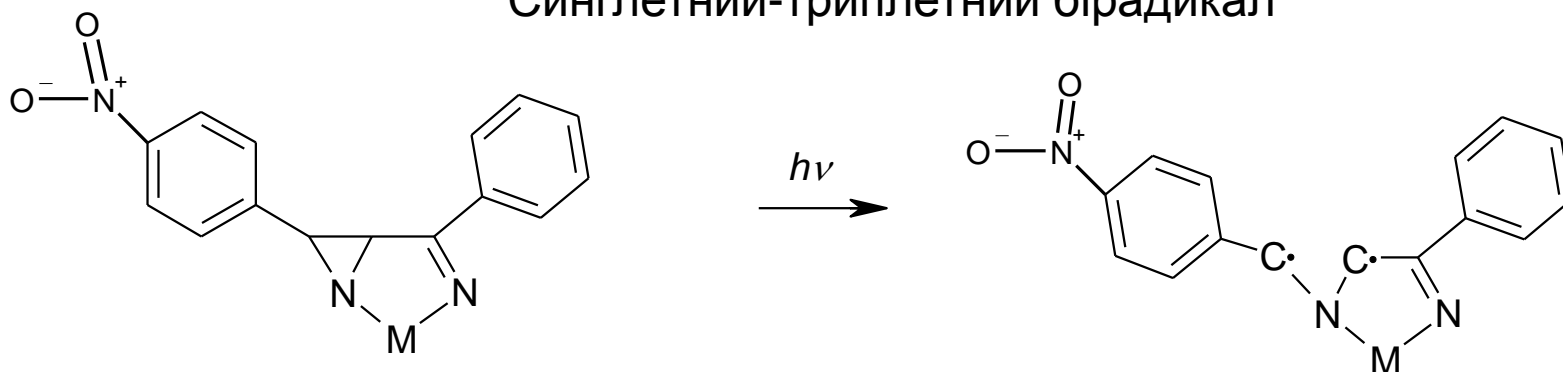


Можливий механізм фотохромізму (фотоактивності)

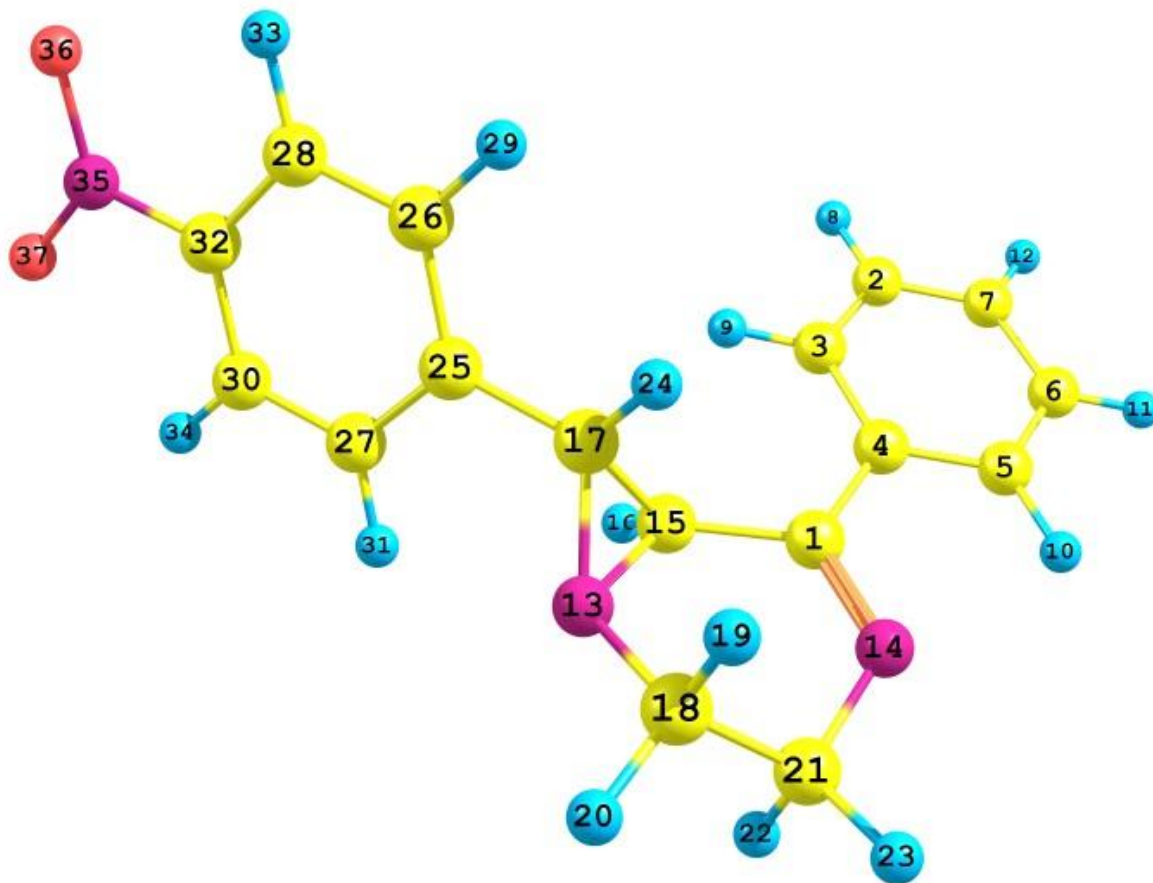
Орлов В.Д., *та ін*



Синглетний-триплетний бірадикал



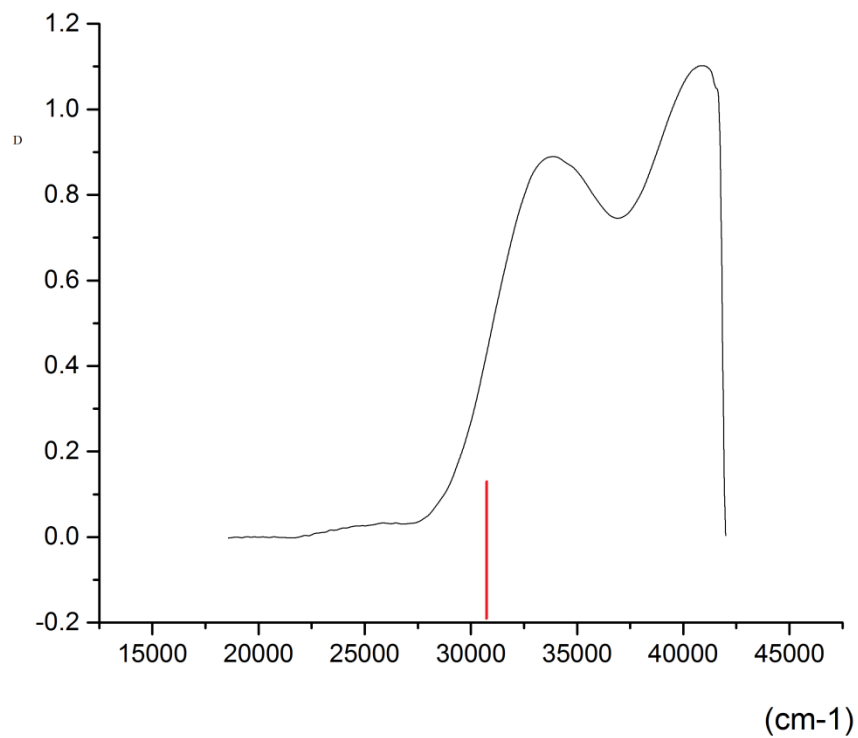
Основний стан 1,4-діазабіцикло[4.1.0]гепт-4-єнів (нітро похідного)



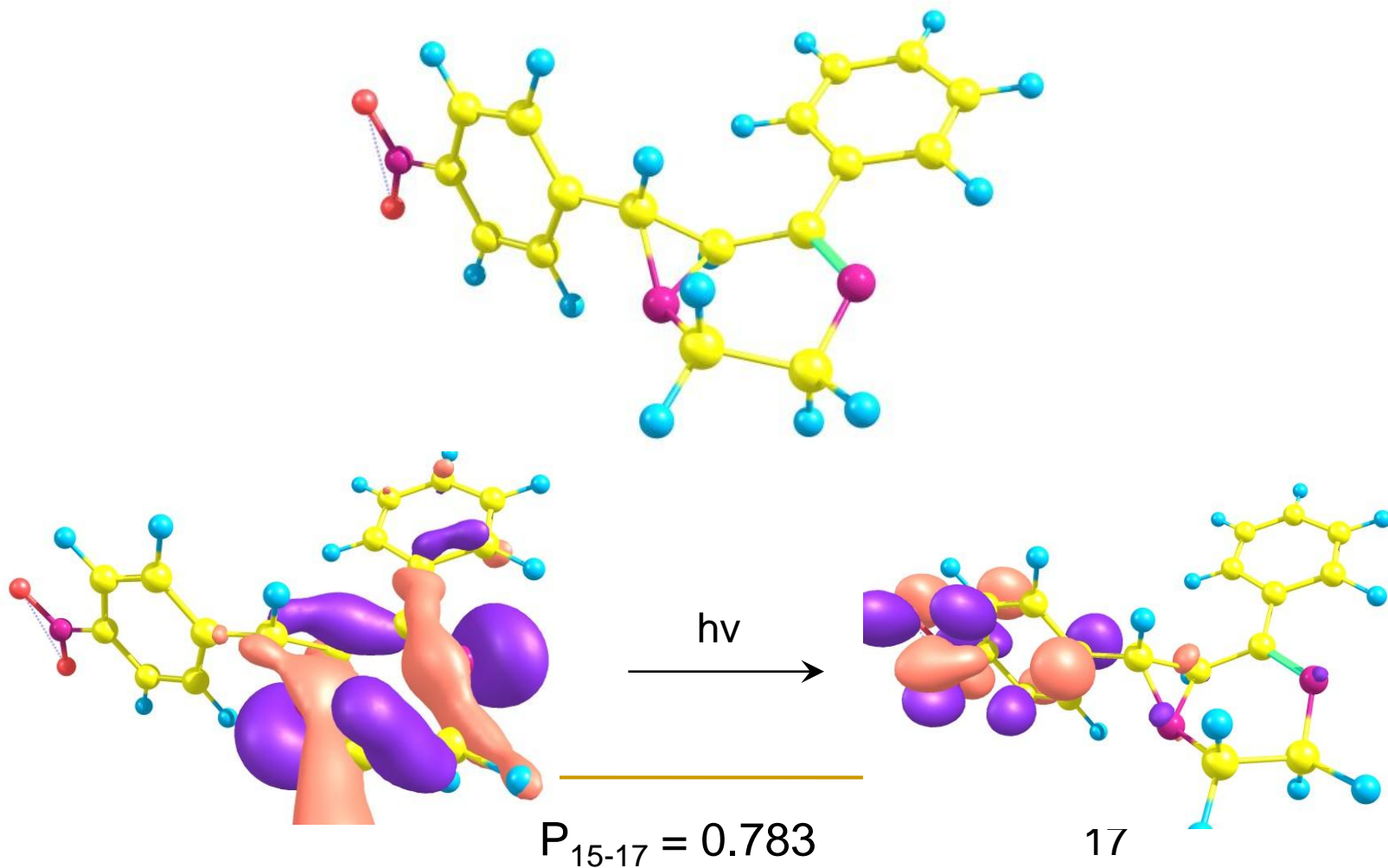
Диедральний кут: (13-15-17-1) 105°

$R_{15-17}=1.53 \text{ \AA}$, $P_{15-17} = 0.863$ 15

Спектр УФ поглинання

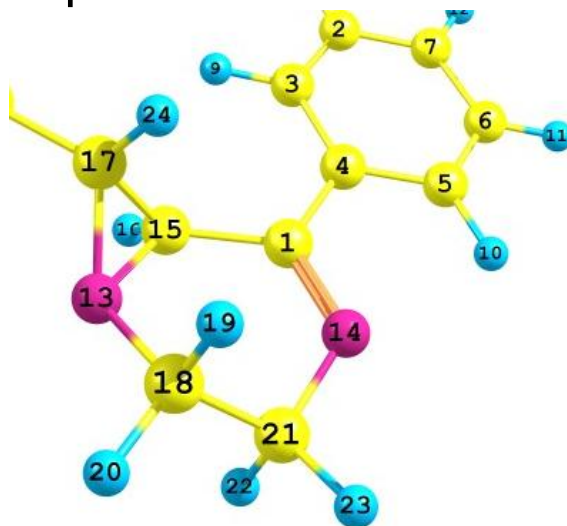


Перехід до найнижчого збудженого стану (орбітальна інтерпретація)



Релаксація у збудженому стані

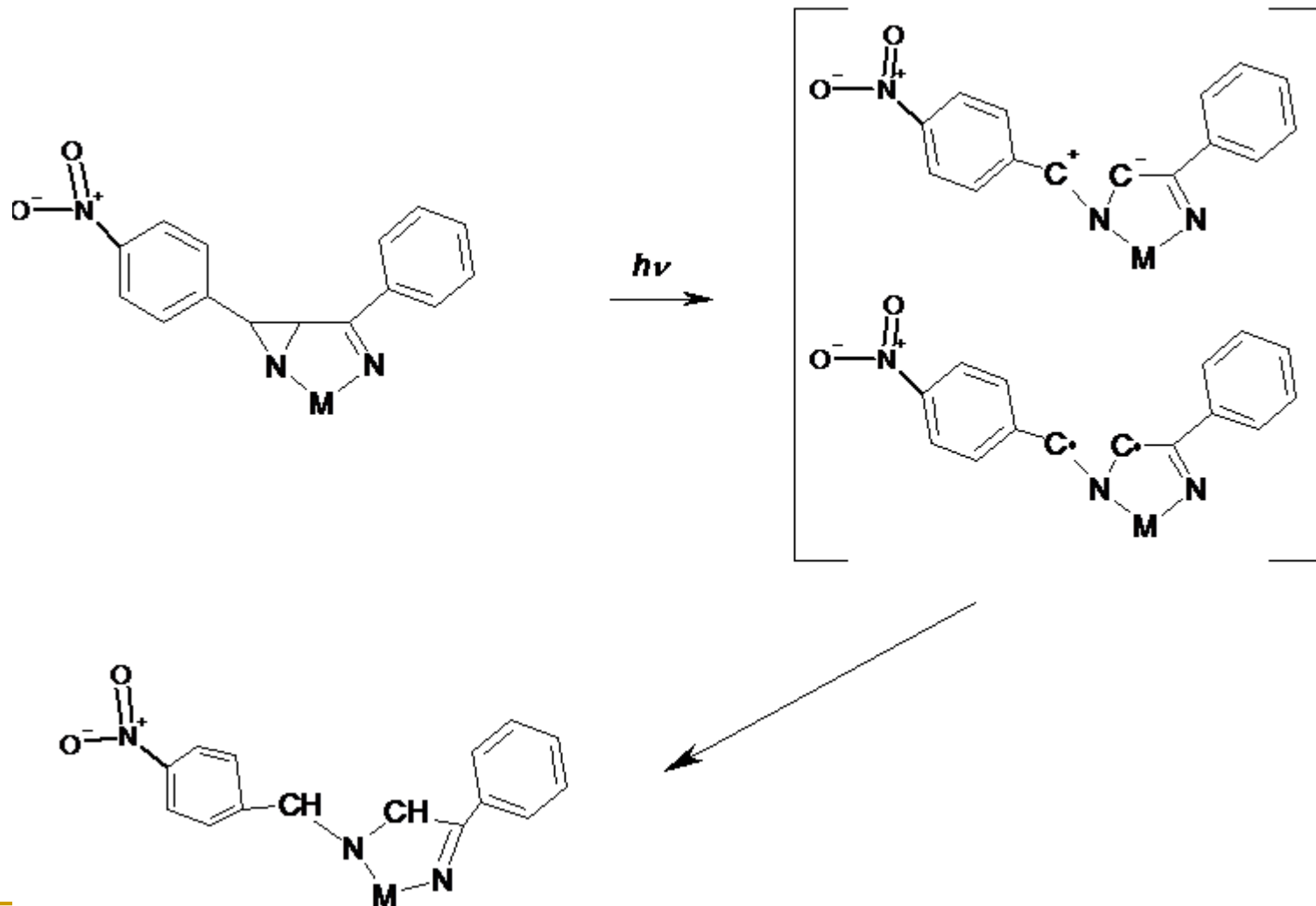
Параметри оптимальної геометрії



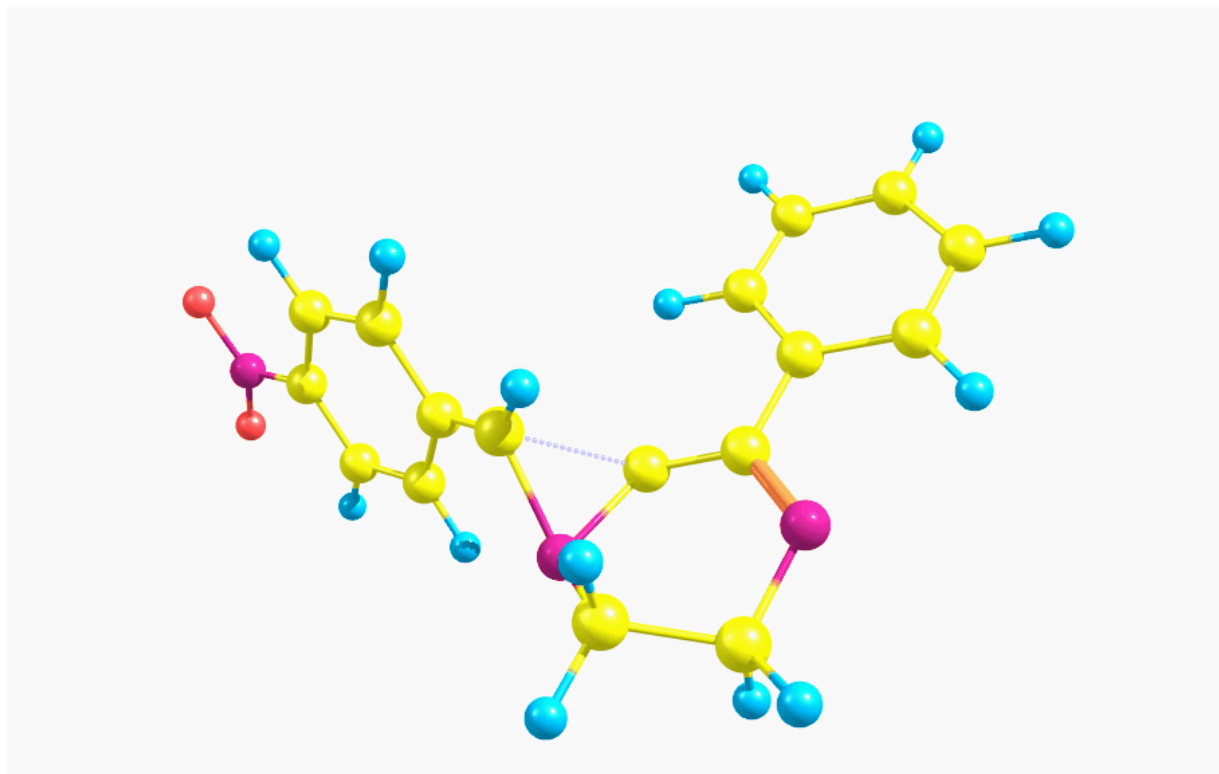
	Основний стан	Збуджений стан
Дієдральний кут (13-15-17-1)	105°	115°
R_{15-17}	1.53	1.54

Енергія релаксації = 13 ккал / моль 18

Фотоперетворення азиридинів

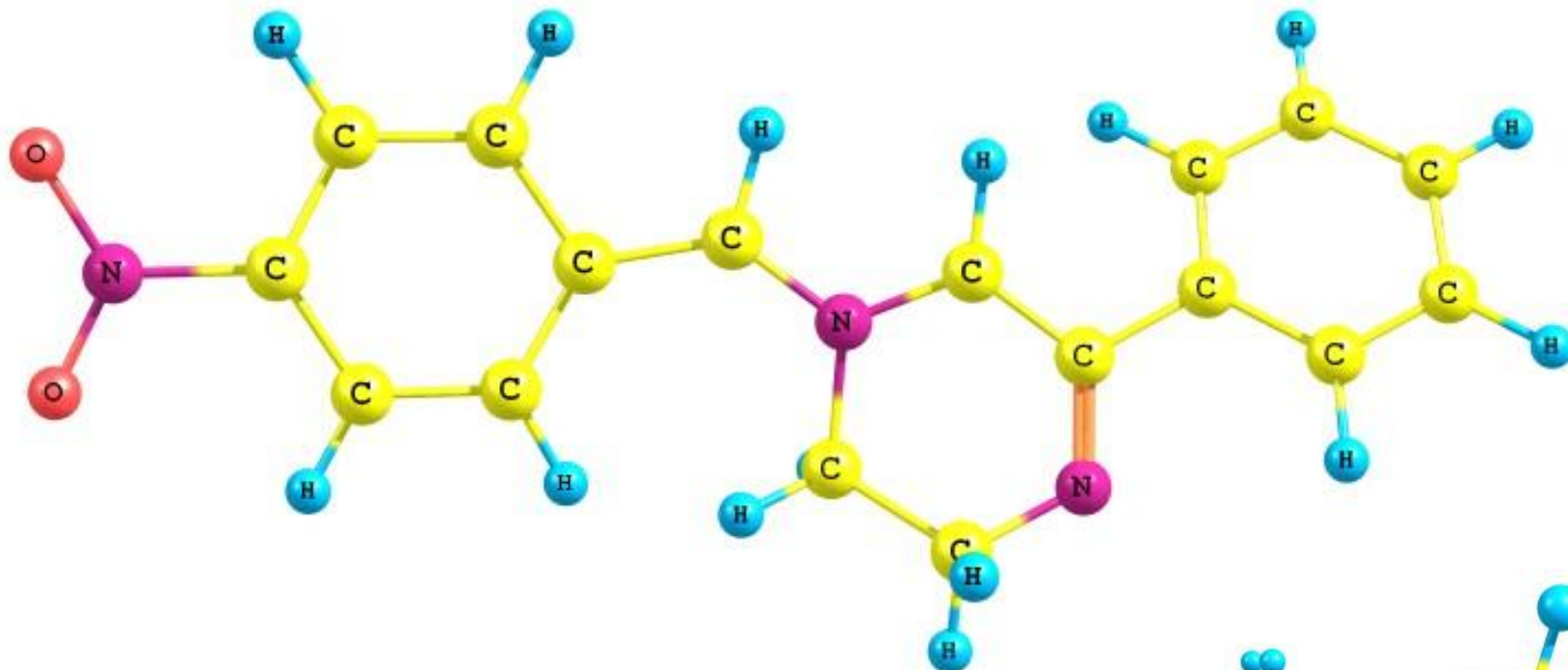


Перехідні стани розкриття азиридинового циклу

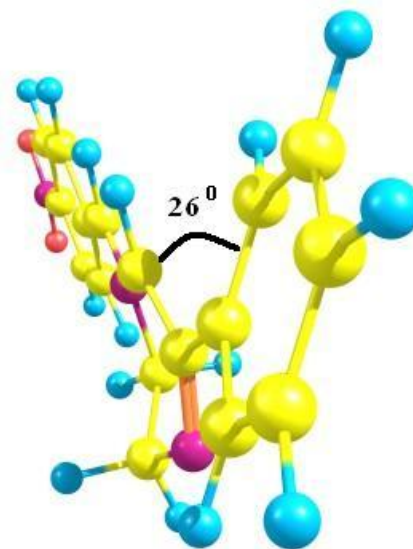


Перехідний стан $\omega = i 478 \text{ см}^{-1}$

Окрашена форма



$\lambda = 505 \text{ нм}, f = 0.98$



Енергетична діаграма розкриття трьохчленного циклу

