##### Теоретическое исследование процесса ESIPT соединения 9-10-HBQ, регулируемого полярностью растворителя

*Liangyue Cheng, Чередниченко А.Г.*

*Аспирант, 3 год обучения*

*Российский университет дружбы народов Им. Патриса Лумумбы(RUDN), Москва, Россия*

*E-mail: 1042225185@pfur.ru*

Внутримолекулярный перенос протона в возбужденном состоянии (ESIPT) является важным процессом в области фотофизики и фотохимии и имеет широкое применение в таких приложениях, как флуоресцентные зонды, лазерные красители и биосенсоры. В данном исследовании в качестве объекта исследования был использован 9,10-дигидроксибензо[h]хинолин (9-10-HBQ), содержащий двойные водородные связи. Методы теории функционала плотности (DFT) и теории функционала плотности с переменной во времени (TD-DFT) использовались в сочетании с моделью поляризуемого континуума растворителя (PCM) для систематического изучения механизма влияния полярности растворителя на его процесс ESIPT. В исследовании были выбраны четыре растворителя различной полярности, а именно циклогексан (Cy), толуол (Tol), хлороформ (TCM) и ацетонитрил (ACN), и проанализированы параметры геометрии водородных связей, инфракрасные колебательные спектры, топологические параметры электронной плотности и кривые потенциальной энергии основного состояния (S₀) и возбужденного состояния (S₁), что позволило выявить регулирование среды растворителя на динамику переноса протонов. Результаты показывают, что в состоянии S₁ прочность водородной связи O₁—H₂—O₃ 9-10-HBQ значительно увеличивается, о чем свидетельствует сокращение длины водородной связи, красное смещение частоты инфракрасных колебаний и приближение индекса бифуркации валентной связи ядра (CVB) к нулю. Полярность растворителя оказывает существенное влияние на водородные связи: в растворителях с низкой полярностью (таких как Cy) водородные связи сильнее, а энергетический барьер ESIPT ниже (7,12 ккал/моль); в то время как в растворителях с высокой полярностью (таких как ACN) водородные связи ослабевают, а энергетический барьер увеличивается до 8,15 ккал/моль. Анализ пограничных молекулярных орбиталей (HOMO-LUMO) показывает, что перераспределение зарядов возбужденного состояния приводит к уменьшению электронной плотности атомов O₁ и увеличению электронной плотности атомов O₃, что приводит к переносу протонов. Кроме того, параметры критической точки поверхности и связи (BCP), такие как градиент плотности восстановления (RDG), дополнительно подтвердили, что эффект водородной связи в состоянии S₁ увеличивается с уменьшением полярности растворителя. Сканирование кривой потенциальной энергии показывает, что энергетический барьер реакции ESIPT в состоянии S₁ значительно ниже, чем в состоянии S₀, а увеличение полярности растворителя приводит к монотонному увеличению энергетического барьера, что указывает на то, что среда с низкой полярностью более благоприятствует спонтанному возникновению процесса ESIPT. В этом исследовании впервые систематически показано, как полярность растворителя влияет на динамику ESIPT 9-10-HBQ, регулируя прочность водородных связей, что обеспечивает теоретическую основу для разработки эффективных флуоресцентных материалов и молекул-зондов. Исследование подтвердило, что точный контроль процесса ESIPT может быть достигнут путем разумного выбора среды растворителя, что закладывает важную основу для расширения применения этого типа соединений в органических оптоэлектронных устройствах и биологической визуализации.[1]

**Литература**

[1] Cheng L.-Y., Cherednichenko A.-G. Theoretical study on the relationship between ESIPT process and solvent of 9, 10-dihydroxybenzo [h] quinolone // J. Photochem. Photobiol., A. 2025. Vol. 460. P. 116121.