



## РЕФЕРАТЫ-ПРОСПЕКТЫ МАГИСТЕРСКИХ ДИССЕРТАЦИЙ

УДК 51-76:612  
ББК 58

### КИНЕТИКА ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНА В РАМКАХ ДВУХ- И ТРЕХЦЕНТРОВЫХ МОДЕЛЕЙ

**Бутин Антон Владиславович**

Магистрант кафедры теоретической физики и волновых процессов,  
Волгоградский государственный университет  
Speen11@hotmail.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

**Ключевые слова:** фотоиндуцированный перенос электрона, донорно-акцепторный комплекс, реорганизация полярного растворителя.

Работа посвящена численному исследованию кинетики фотоиндуцированного переноса электрона (ФИПЭ) в рамках двух- и трехцентровой моделей внутримолекулярного перераспределения заряда. Кинетика сверхбыстрых фотоиндуцированных реакций переноса электрона в донорно-акцепторных комплексах имеет ряд особенностей [6; 7]. Первая особенность связана с тем, что приготовленное импульсом накачки локально-возбужденное состояние донорно-акцепторной системы не успевает завершить релаксацию до момента разделения зарядов, поэтому процесс разделения зарядов протекает на неравновесной стадии. Вторая предполагает, что для адекватного описания кинетики таких процессов необходимо введение двух координат реакции, соответствующих каждой из стадий, а именно стадии фотовозбуждения и стадии последующего переноса электрона. Поэтому для описания кинетики ФИПЭ необходимо использовать многоцентровые (например, двух- и трехцентровые) модели внутримолекулярного перераспределения заряда [3; 6; 7].

Дополнительной существенной характеристикой, влияющей на кинетику сверхбыстрого ФИПЭ, является угол между координатами реакции, соответствующими фотовоз-

буждению и переносу заряда. В работах [2–7] были разработаны двух- и трехцентровые модели пространственного перераспределения электронной плотности, позволившие рассчитывать значения данного угла в конкретных молекулярных системах. Было показано, что если в качестве донора (или акцептора) выступают протяженные органические молекулы, такие как ДСМ (4-дицианометилен-2-метил-6-р-диметиламиностирол-4Н-пирен), то внутримолекулярное перераспределение заряда в донорно-акцепторной системе можно моделировать в рамках трехцентровой модели [2; 3; 8]. Для описания внутримолекулярного перераспределения электронной плотности для таких систем как кумарины, изменение дипольного момента которых на стадии фотовозбуждения относительно невелико, можно использовать двухцентровую модель [2; 4; 5]. В рамках трехцентровой модели фотовозбуждение донора (или акцептора) рассматривается как перенос эффективного заряда, а фотоиндуцированный перенос электрона представляется как двухэтапный перенос заряда между тремя центрами. Двухцентровая модель ФИПЭ описывает перераспределение электронной плотности на стадии фотовозбуждения в терминах изменения дипольного мо-

мента молекулы, а последующий перенос электрона как перенос точечного заряда между двумя центрами.

В рамках данной работы предполагается провести дальнейшее количественное исследование влияния внутримолекулярного перераспределения заряда в донорно-акцепторной системе на стадии фотовозбуждения на скорость не только сверхбыстрого горячего переноса электрона, но и термического переноса электрона. В качестве параметров донорно-акцепторных систем будут использованы параметры реальных кумаринов [2; 4; 5], а также молекул растительного или животного пигмента, к которым относятся хлорофилл, *b*-каротин и рутин [1]. В качестве растворителей будут использованы метилонитрил и валеронитрил.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бондарев, С. Л. / С. Л. Бондарев, С. С. Дворников, С. М. Бачило // Оптика и спектроскопия. – 1988. – Т. 64, № 2. – С. 448–450.
2. Иванов, А. И. Кинетика быстрых фотохимических реакций разделения и рекомбинации за-

рядов / А. И. Иванов, В. А. Михайлова // Успехи химии. – 2010. – Т. 79, № 12. – С. 1139–1163.

3. Иванов, А. И. Фотоиндуцированный перенос электрона как двухстадийный перенос дробного заряда / А. И. Иванов, В. А. Михайлова, С. С. Хохлова // Журнал физической химии. – 2006. – Т. 80, № 9. – С. 1702–1710.

4. Хохлова, С. С. Влияние внутримолекулярного перераспределения заряда на скорость фотовозбуждения на скорость последующего переноса электрона / С. С. Хохлова, А. И. Иванов, В. А. Михайлова // Химическая физика. – 2007. – Т. 26, № 7. – С. 27–36.

5. Хохлова, С. С. Влияние изменения дипольного момента реагента на скорость фотоиндуцированного переноса электрона / С. С. Хохлова, А. И. Иванов, В. А. Михайлова // Журнал физической химии. – 2008. – Т. 82, № 6. – С. 1161–1167.

6. Ando, K. Nonequilibrium oscillatory electron transfer in bacterial photosynthesis / K. Ando, H. Sumi // Journal of Chemical Physics. – 1998. – Vol. 102. – P. 10991–11000.

7. Cho, M. Nonequilibrium photoinduced electron transfer / M. Cho, R. J. Silbey // Journal of Chemical Physics. – 1995. – Vol. 103, iss. 2. – P. 595.

8. Khohlova, S. S. Three-centered model of ultrafast photoinduced charge transfer: continuum dielectric approach / S. S. Khohlova, V. A. Mikhailova, A. I. Ivanov // Journal of Chemical Physics. – 2006. – Vol. 124, № 11. – P. 114507–114517.

## PHOTOINDUCED ELECTRON TRANSFER KINETICS WITHIN THE TWO AND THREE-CENTER MODELS

**Butin Anton Vladislavovich**

Master Student, Department of Theoretical Physics and Wave Processes,  
Volgograd State University  
Speen11@hotmail.ru  
Prosp. Universitetskyy, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Key words:** photoinduced electron transfer, donor-acceptor complex, polar solvent reorganization.