**NUMER IDENTYFIKACYJNY // CONTRIBUTION ID**

**Sonda molekularna ESIPT FET: wpływ pola elektrycznego na właściwości widmowe // ESIPT molecular probe FET: electric field effect on spectral properties**

**Autor // Author:** Vladimir Tomin, Tomasz Wróblewski

 *Instutut Nauk Ścisłych i Techicznych, Uniwersytet Pomorski w Słupsku, ul. Arciszewskiego 22A, 76-200 Słupsk*

**Korespondujący autor // Corresponding Author:** tomasz.wroblewski@upsl.edu.pl

**Słowa kluczowe**: wewnątrzcząsteczkowy transfer protonów w stanie wzbudzonym, FET, fluorescencja, pole elektryczne, moment dipolowy, symulacja DFT // **Keywords**: Excited-state intramolecular proton transfer; FET, fluorescence, electric field, dipole moment, DFT simulation

Zastosowano obliczenia DFT w celu zbadania wpływu pola elektrycznego na strukturę, właściwości widmowe, reakcję wewnątrzcząsteczkowego przeniesienia protonu w stanie wzbudzonym (ESIPT) i momenty dipolowe 4′-(dietyloamino)-3-hydroksyflawonu (FET). FET, dobrze znany fluorescencyjny 3-hydroksyflawon, wykazuje wydajną podwójną fluorescencję ze swoich form normalnej i tautomerycznej. Nasze symulacje ujawniły znaczący wpływ pola na energie stanu singletowego, częstotliwości przejścia elektronowego i powierzchnie orbitali molekularnych. Cząsteczki FET wykazują znaczną polaryzowalność, co prowadzi do ~50% wzrostu stałego momentu dipolowego w stanach singletowych. Zmiany częstotliwości przejścia elektronowego wywołane przez przyłożone pole elektryczne stanowią podstawę do zrozumienia modulacji charakterystyk widmowych w rozpuszczalnikach, w których substancja rozpuszczona oddziałuje z polem elektrycznym wnęki reakcyjnej. Ponadto, włączenie oddziaływań międzycząsteczkowych przy użyciu modelu Onsagera pozwala nam wyjaśnić, w jaki sposób solwatochromizm i znaczne niejednorodne poszerzenie widma wibronowego mogą powstawać w rozpuszczalnikach polarnych z powodu fluktuacji termicznych pola elektrycznego.

Selektywna spektroskopia fluorescencyjna FET w acetonitrylu ujawnia umiarkowane przesunięcie ku czerwieni w widmie formy normalnej i zależność jego intensywności od energii wzbudzenia, zjawisko znane jako efekt wzbudzenia krawędzi czerwieni (REEE) w temperaturze pokojowej. Tradycyjnie REEE obserwuje się, gdy substancje rozpuszczone znajdują się w unieruchomionych środowiskach, takich jak zamrożone matryce, polimery lub membrany. Obserwowany wzór REEE przypisujemy wzajemnemu oddziaływaniu niejednorodnych widm substancji rozpuszczonych i unikalnym cechom szybkiej reakcji ESIPT.