**Белорусский государственный университет**
**Физический факультет**
**кафедра биофизики**

# Люминесценция многокомпонентных растворов органических красителей при ориентационной релаксации растворителя

**Докладчик**
**студентка 5 курса**
**кафедры биофизики**
**Мичелёва Е.М.**

**Научный руководитель**
**кандидат физ.-мат. наук,**
**ст. преподаватель**
**Капуцкая И.А.**

# Актуальность

Одной из актуальных проблем в настоящее время является поиск путей создания сред со сложным нелинейным откликом на световой воздействие, которые могут найти применение в устройствах оптической обработки информации.

# Цель

Разработать модель и процедуру расчёта, основанную на методах статистического моделирования, ориентационной межмолекулярной релаксации при интенсивном возбуждении.

# Задачи

1. исследовать теоретически влияния ориентационной релаксации растворителя на оптические свойства растворов сложных органических молекул в условиях интенсивного возбуждения;
2. учесть изменения оптической плотности раствора на частоте возбуждающего излучения;
3. рассмотреть влияние на релаксационные процессы безызлучательного индуктивно-резонансного переноса энергии электронного возбуждения.

# Объект исследования – межмолекулярные взаимодействия

Существует три вида ван-дер-ваальсовых (универсальных) взаимодействий:

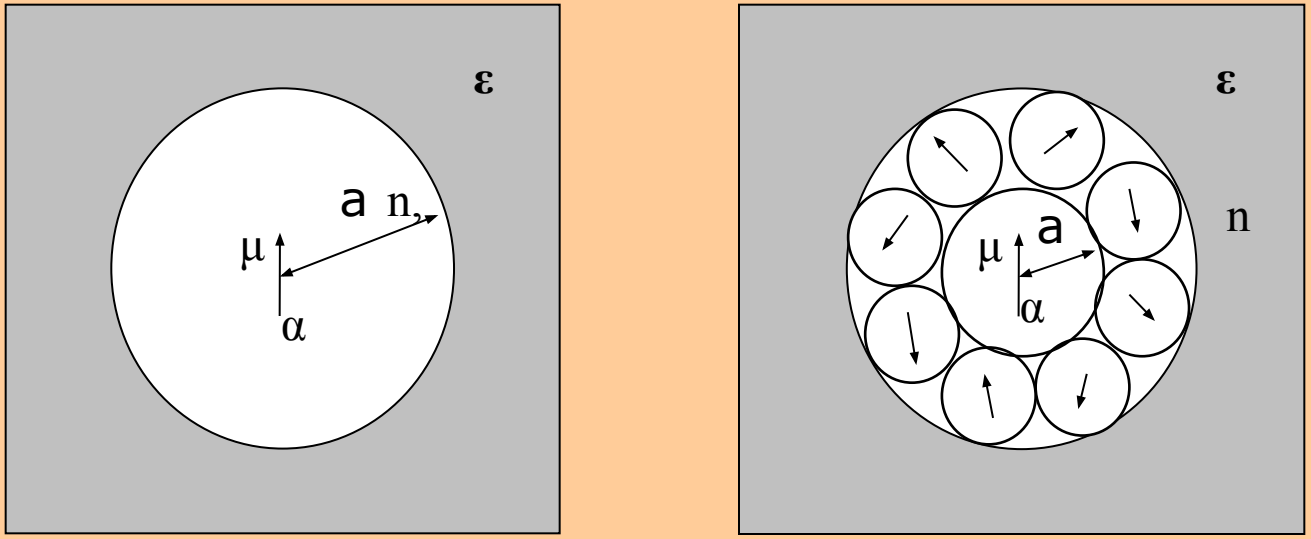
- Ориентационные $$\varphi_{op} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{r_i^6} \cdot \left[ \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{kT} \mu^2 \right]$$
- Индукционные $$\varphi_{инд} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{r_i^6} \cdot \alpha$$
- Дисперсионные $$\varphi_{дисп}^{g} = \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{r_i^6} \cdot \left[ \frac{3 I_u^0 I_v^0}{2\left(I_v^0 + I_u^0\right)} \cdot \alpha + \mu^2 \right]$$

где r – расстояние между молекулами активатора и растворителя,
α – поляризуемость молекул растворителя,
$I_{u(v)}^{\sigma}$ потенциал ионизации молекул активатора (растворителя).

# Предмет исследования – раствор органического красителя

**Модель Онзагера**

(схема, иллюстрирующая взаимодействие молекулы с окружающей средой)



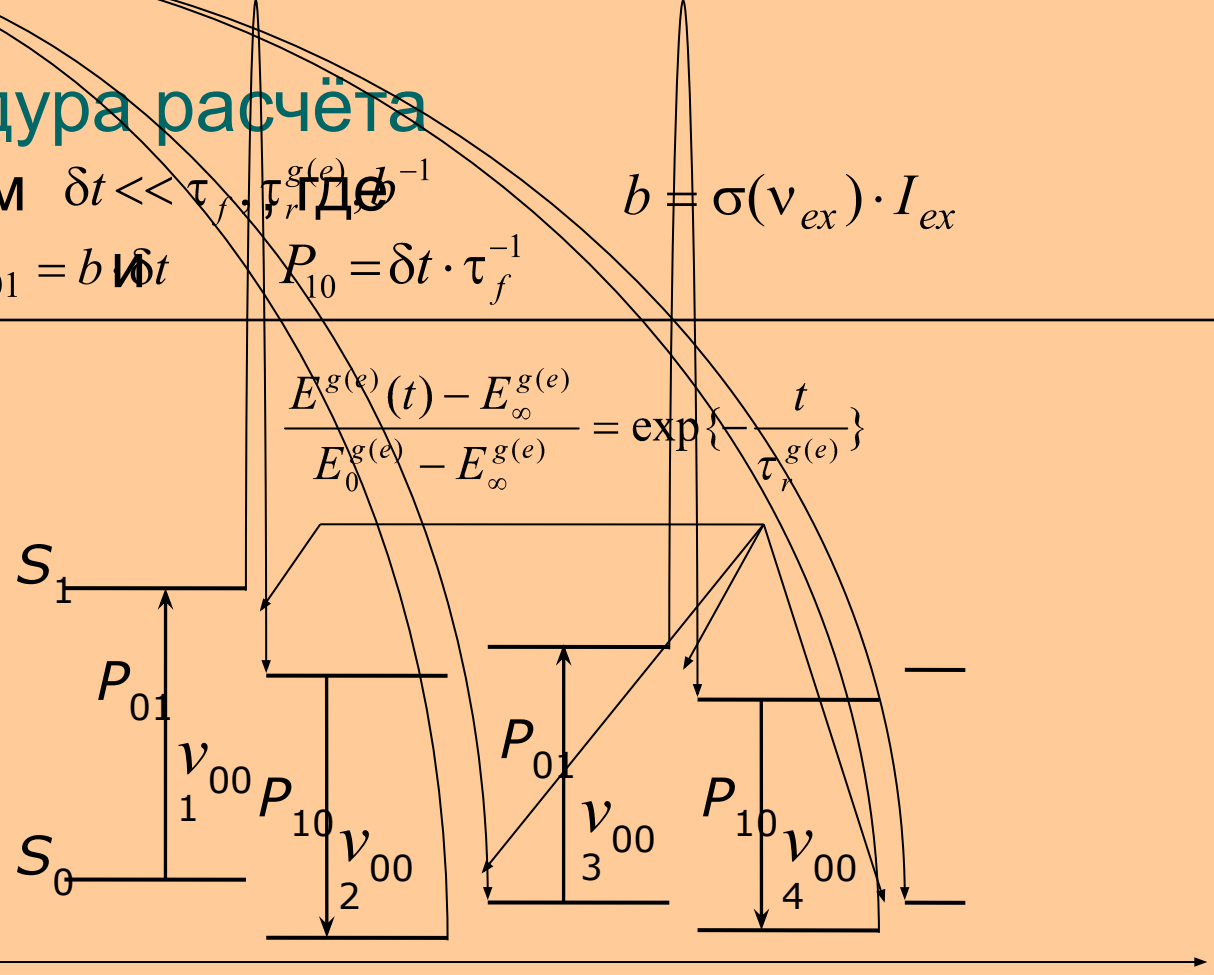

где μ – дипольный момент молекулы активатора;
a – онзагеровский радиус; α – поляризуемость молекулы активатора;
ε – диэлектрическая проницаемость среды;
n – показатель преломления среды

# Процедура расчёта

Выберем $\delta t << \tau_f, \tau_r^{g(e)}$, где $\tau_f = d^{-1}$ $\quad b = \sigma(\nu_{ex}) \cdot I_{ex}$

Тогда $P_{01} = b \cdot \delta t$ и $P_{10} = \delta t \cdot \tau_f^{-1}$

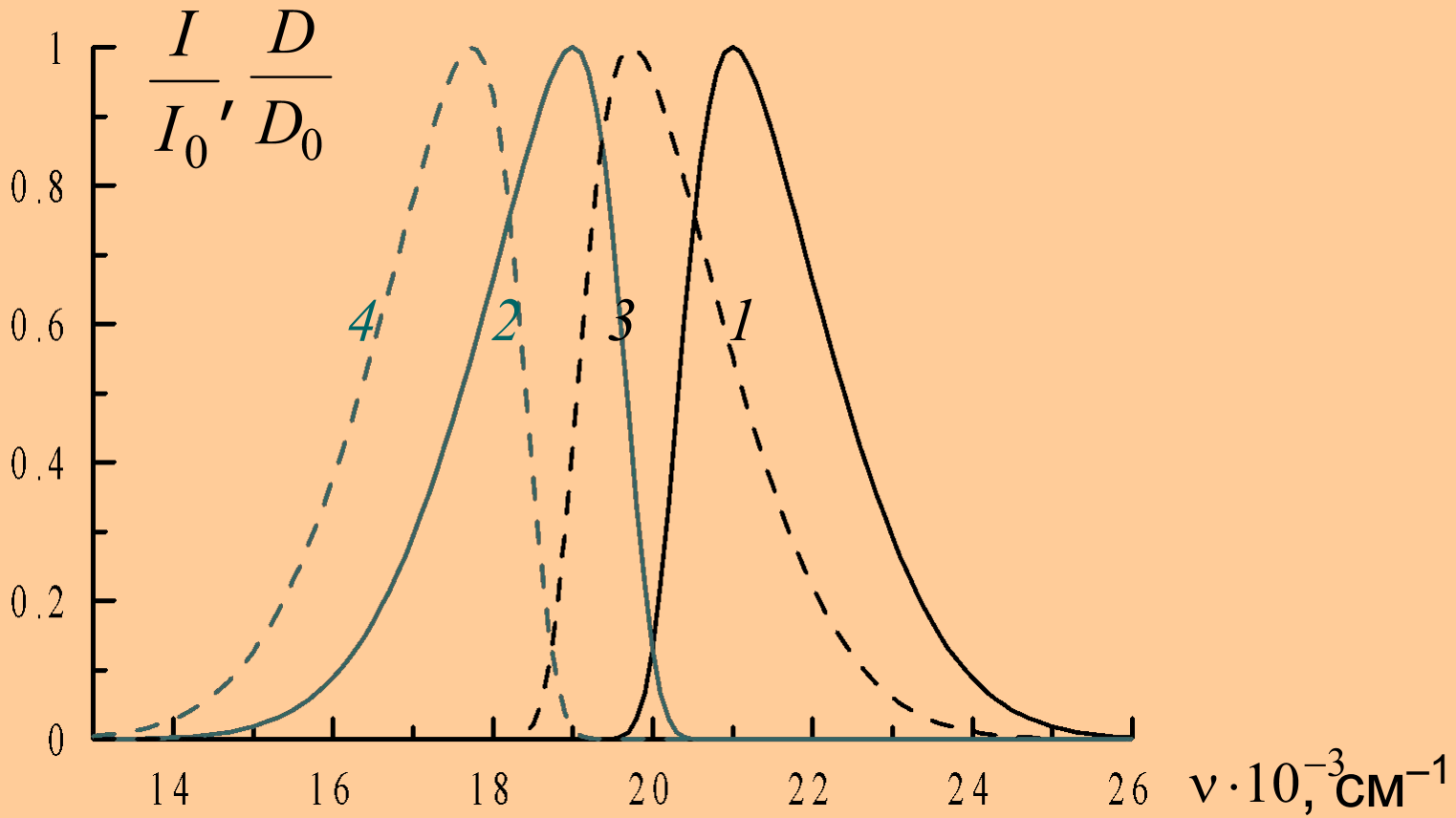
$$\frac{E^{g(e)}(t) - E_\infty^{g(e)}}{E_0^{g(e)} - E_\infty^{g(e)}} = \exp\{-\frac{t}{\tau_r^{g(e)}}\}$$




$$\nu_{00}^1 > \nu_{00}^2 > \nu_{00}^3 > \nu_{00}^4 > \ldots$$

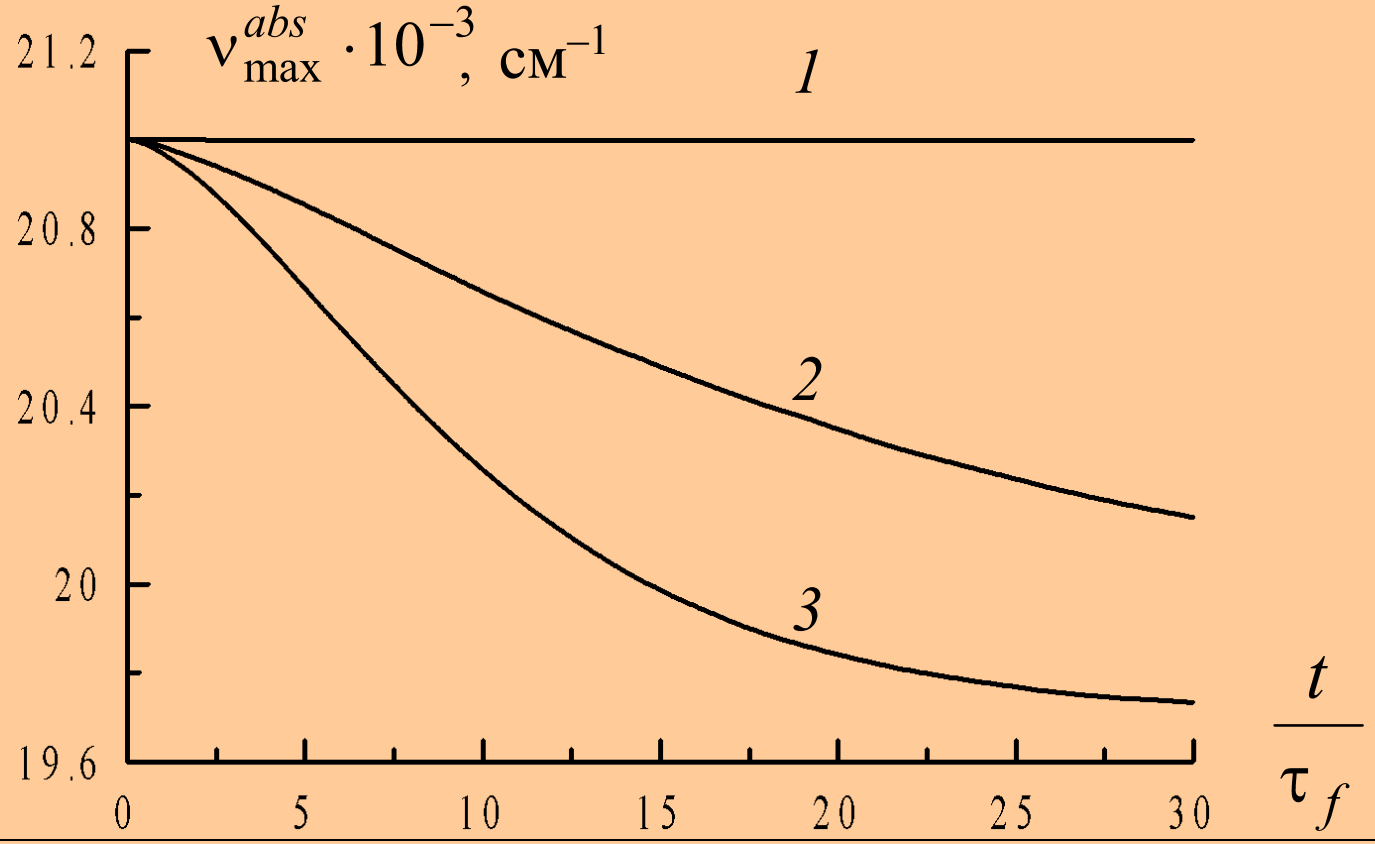
**Рисунок 1 – Спектры поглощения и флуоресценции**

Спектр поглощения (*1*, *3*) и флуоресценции (*2*, *4*).
*t* = 0 (*1*, *2*) и *t* =30 нс (*3*,*4*)



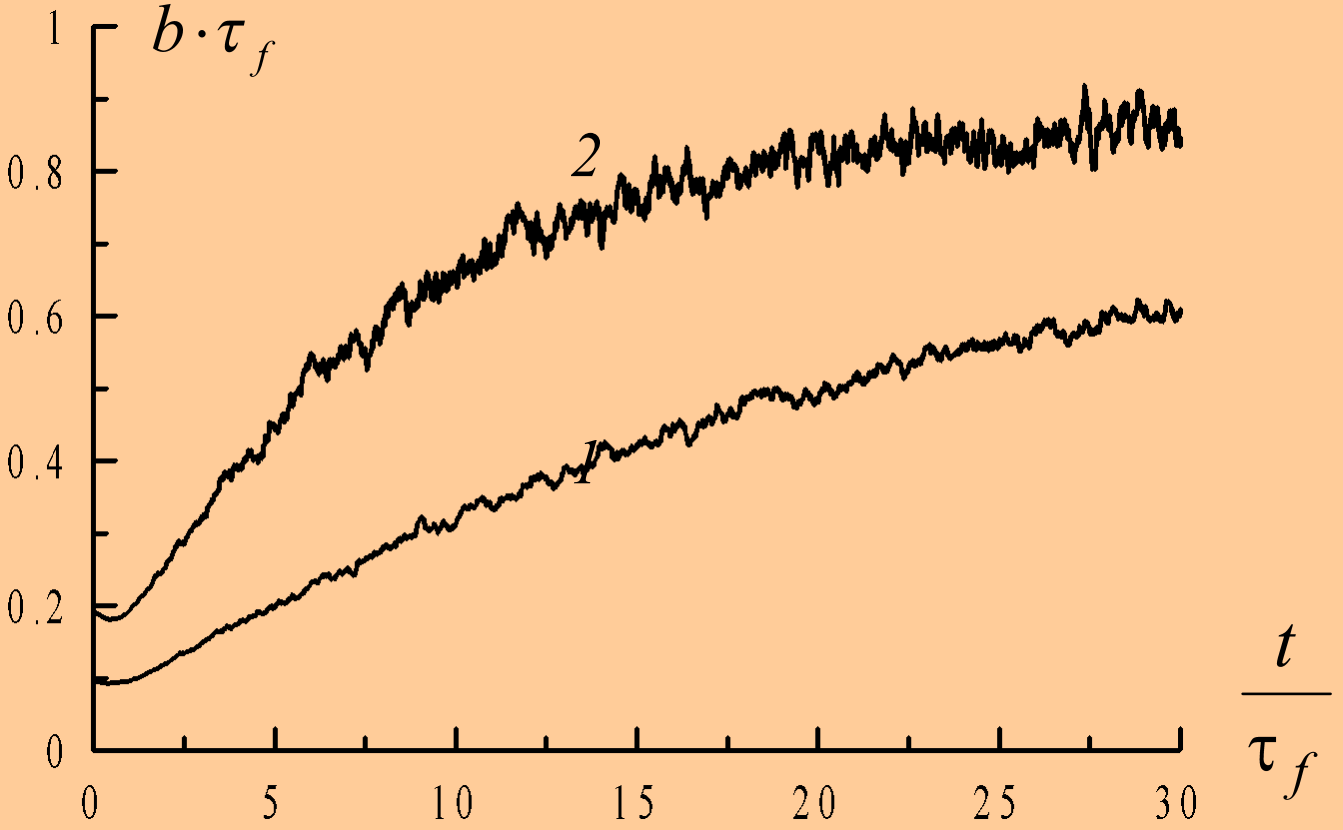
# Рисунок 2 – Зависимости положения максимума спектра поглощения от времени

$$b_0 \cdot \tau_f = 0.033(1), 3.33(2), 6.66(3); \quad \nu_{ex} = 19800\ см^{-1}$$



# Рисунок 3 – Зависимости константы скорости поглощения от времени

$b_0 \cdot \tau_f = 3.33(1), 6.66(2); \qquad \nu_{ex} = 19800\ см^{-1}$



# Рисунок 4 – Зависимости положения максимума спектра поглощения от времени

$\nu_{ex} = 23000(1), 21000(2), 20000(3), 19800\,см^{-1}(4);\ b_0 \cdot \tau_f = 3.33$

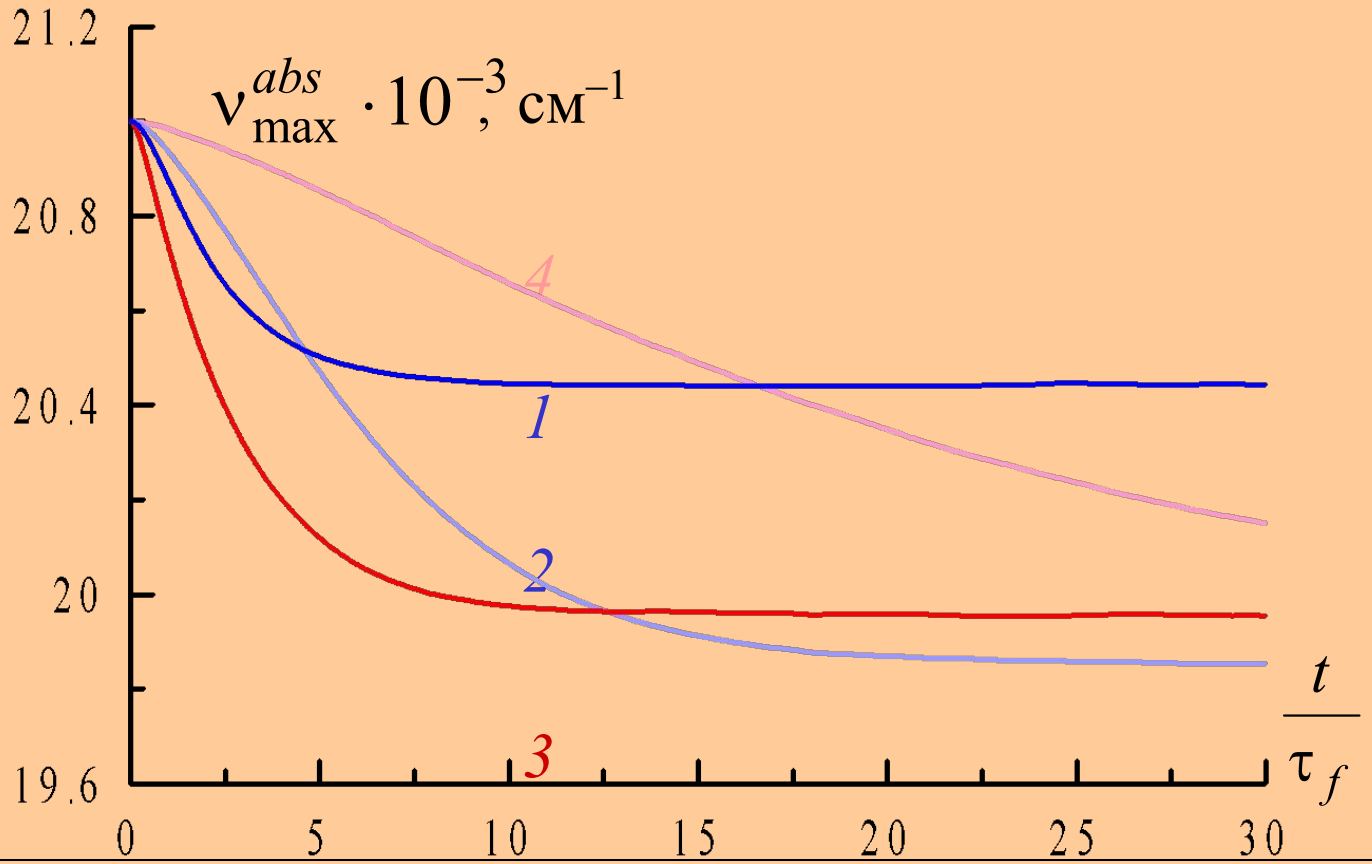


Рисунок 5 – Зависимости положения максимума спектра поглощения от времени

$$\nu_{ex} = 23900\,(1), 19350\,см^{-1}\,(2);$$

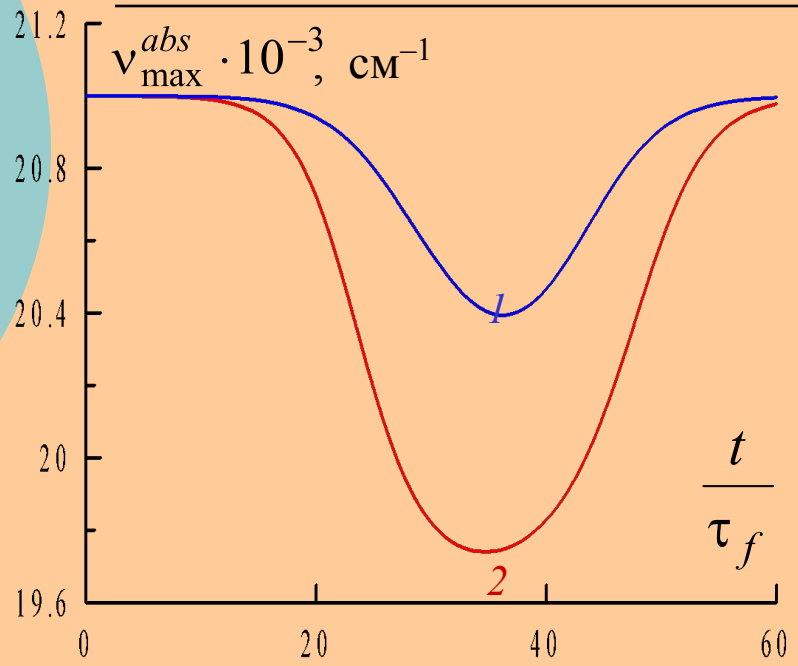
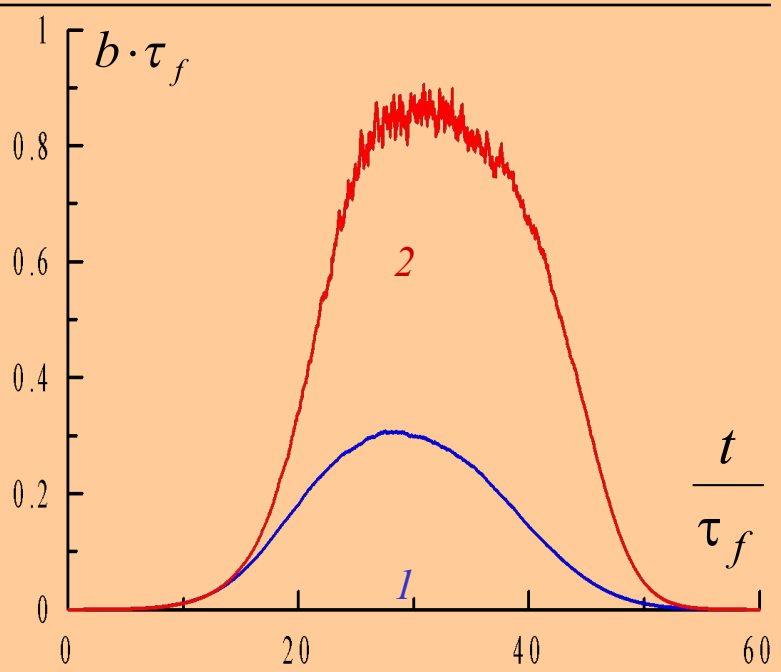


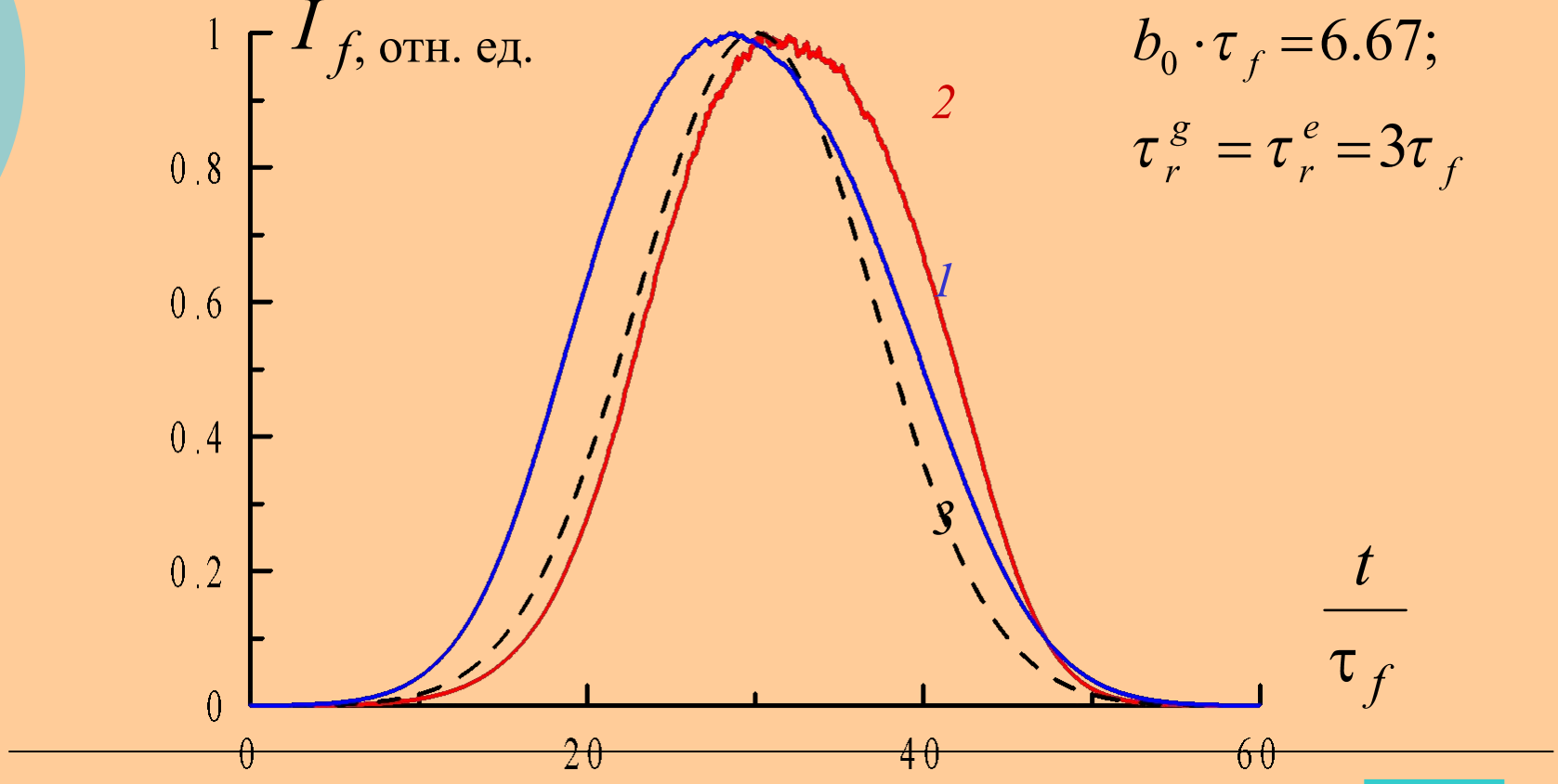

Рисунок 6 – Зависимости константы скорости поглощения от времени

$$b_0 \cdot \tau_f = 6.67; \quad \tau_r^g = \tau_r^e = 3\tau_f$$



# Рисунок 7 – Зависимости интенсивности флуоресценции от времени

$\nu_{ex} = 23900\,(1), 19350\,см^{-1}\,(2), форма\ импульса\,(3);$



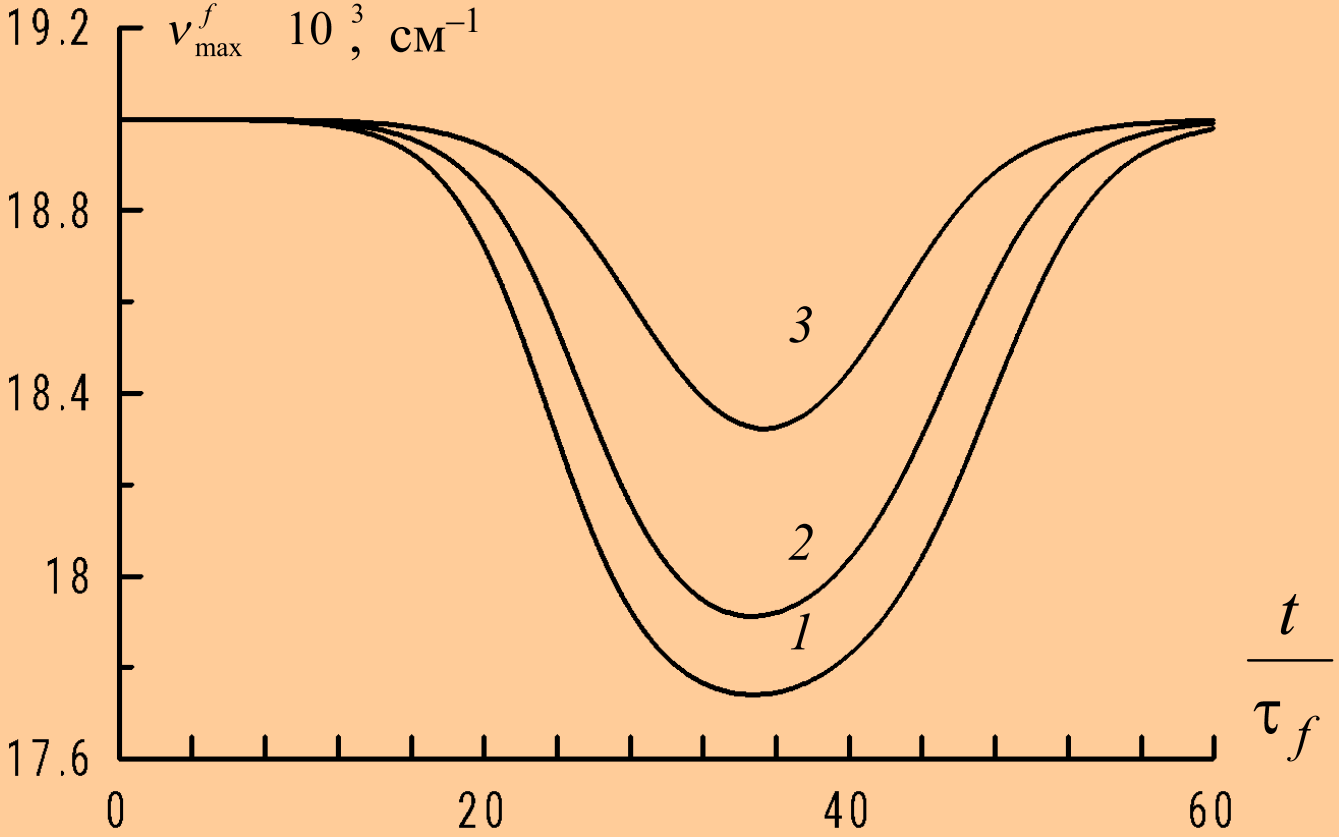

$b_0 \cdot \tau_f = 6.67;$

$\tau_r^g = \tau_r^e = 3\tau_f$

**Рисунок 8 – Зависимости максимума спектра флуоресценции от времени**

$C = 10^{-5}\ (1), 10^{-3}\ (2), 3 \cdot 10^{-3}$ моль/л (3);

$\nu_{ex} = 20000\,см^{-1}, b_0 \cdot \tau_f = 6.67; R_0 = 50\,A, \tau_r^g = \tau_r^e = 3\tau_f$



# Положения, выносимые на защиту

- При интенсивном возбуждении наиболее существенную роль из ММВ в растворе играют ориентационные взаимодействия.
- При интенсивном возбуждении в растворах органических красителей имеет место процесс ступенчатой межмолекулярной релаксации.
- При возбуждении лазерным импульсом раствора органических красителей происходит немонотонное смещение спектра флуоресценции во времени, обусловленное проявлением ступенчатой межмолекулярной релаксации.
- Безызлучательный индуктивно-резонансный перенос энергии электронного возбуждения приводит к уменьшению амплитуды смещения спектра.

# Спасибо за внимание!