

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

где  $r$  – расстояние между молекулами активатора и растворителя,

$\alpha$  – поляризуемость молекул растворителя,

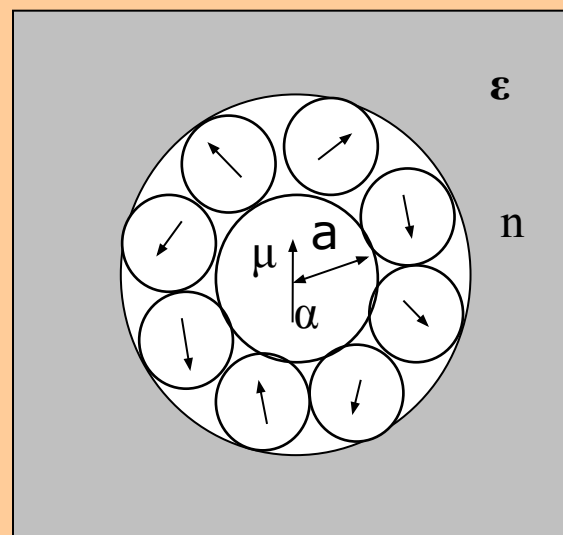
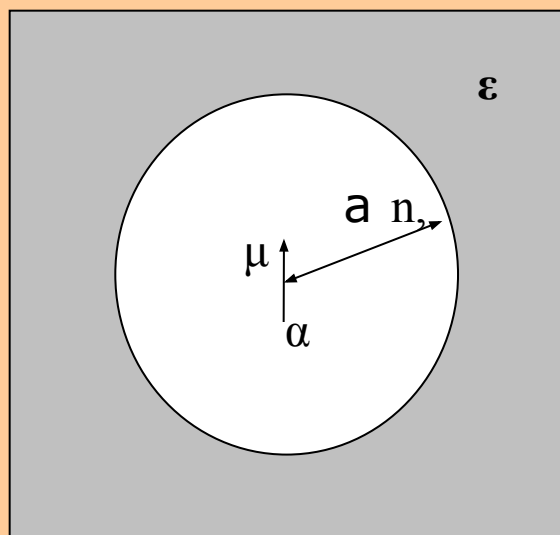
$I_{u(v)}^0$  потенциал ионизации молекул активатора (растворителя).



# Предмет исследования – раствор органического красителя

## Модель Онзагера

(схема, иллюстрирующая взаимодействие молекулы с окружающей средой)



где  $\mu$  – дипольный момент молекулы активатора;  
 $a$  – онзагеровский радиус;  $\alpha$  – поляризуемость молекулы активатора;  
 $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость среды;  
 $n$  – показатель преломления среды



# Процедура расчёта

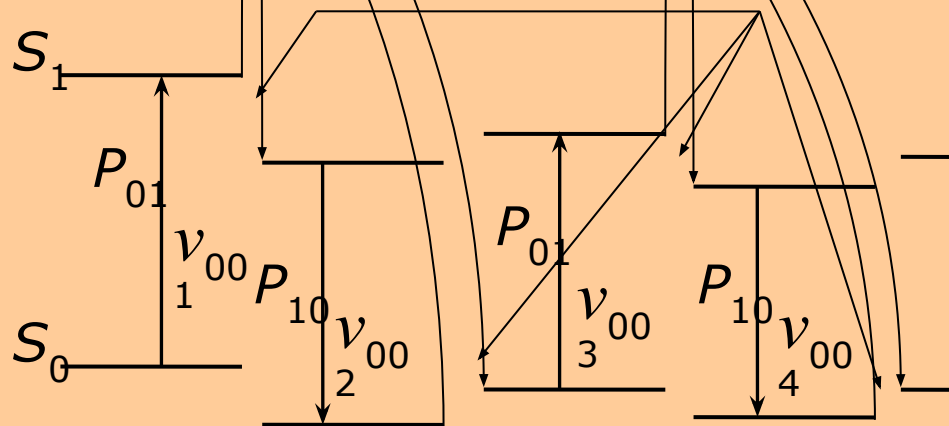
Выберем  $\delta t \ll \tau_f$ , где  $\tau_f = \tau_f^{g(e)}$

Тогда  $P_{01} = b \delta t$

$P_{10} = \delta t \cdot \tau_f^{-1}$

$$b = \sigma(v_{ex}) \cdot I_{ex}$$

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



$$v_{00}^1 > v_{00}^2 > v_{00}^3 > v_{00}^4 > \dots$$

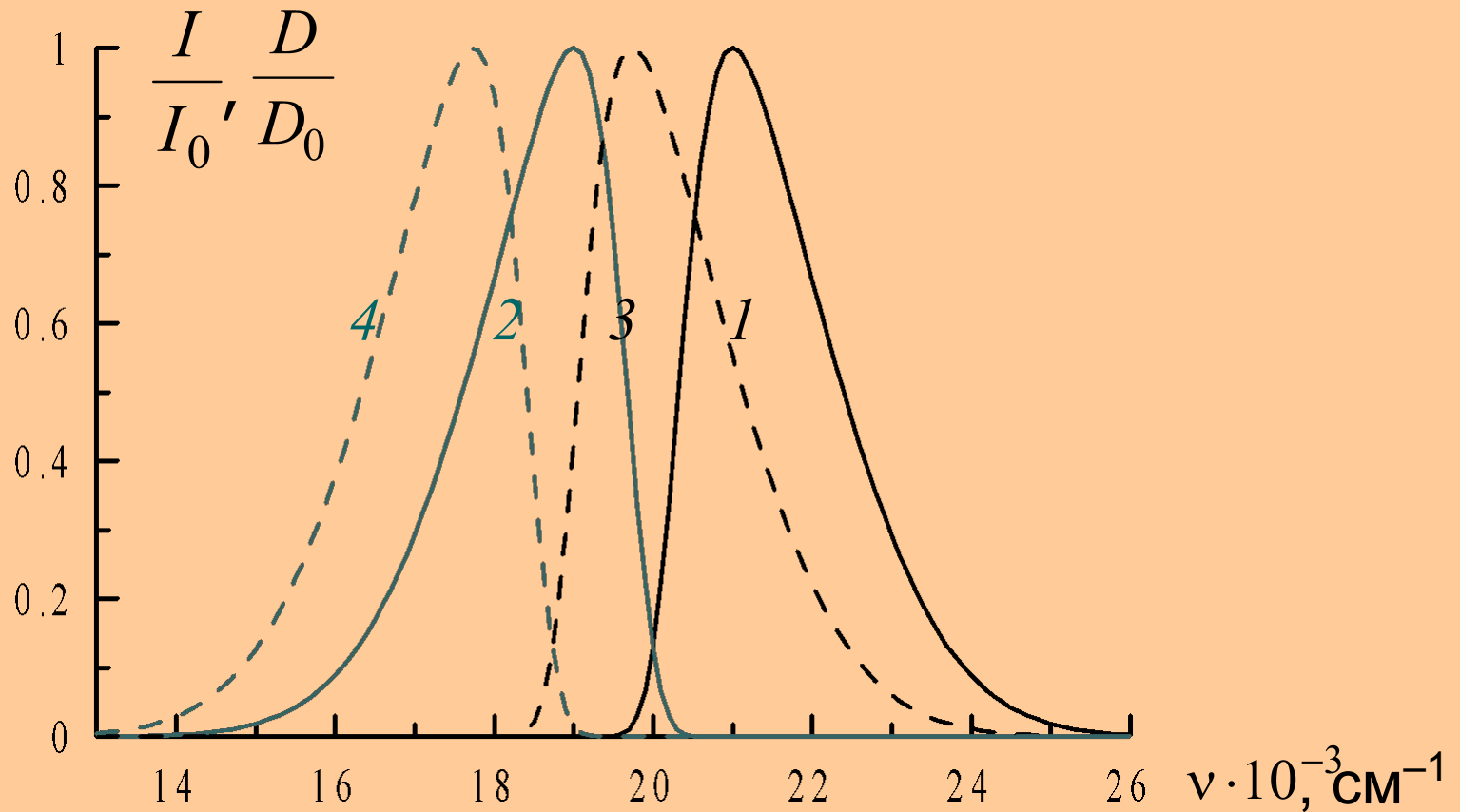
t



# Рисунок 1 – Спектры поглощения и флуоресценции

Спектр поглощения (1, 3) и флуоресценции (2, 4).

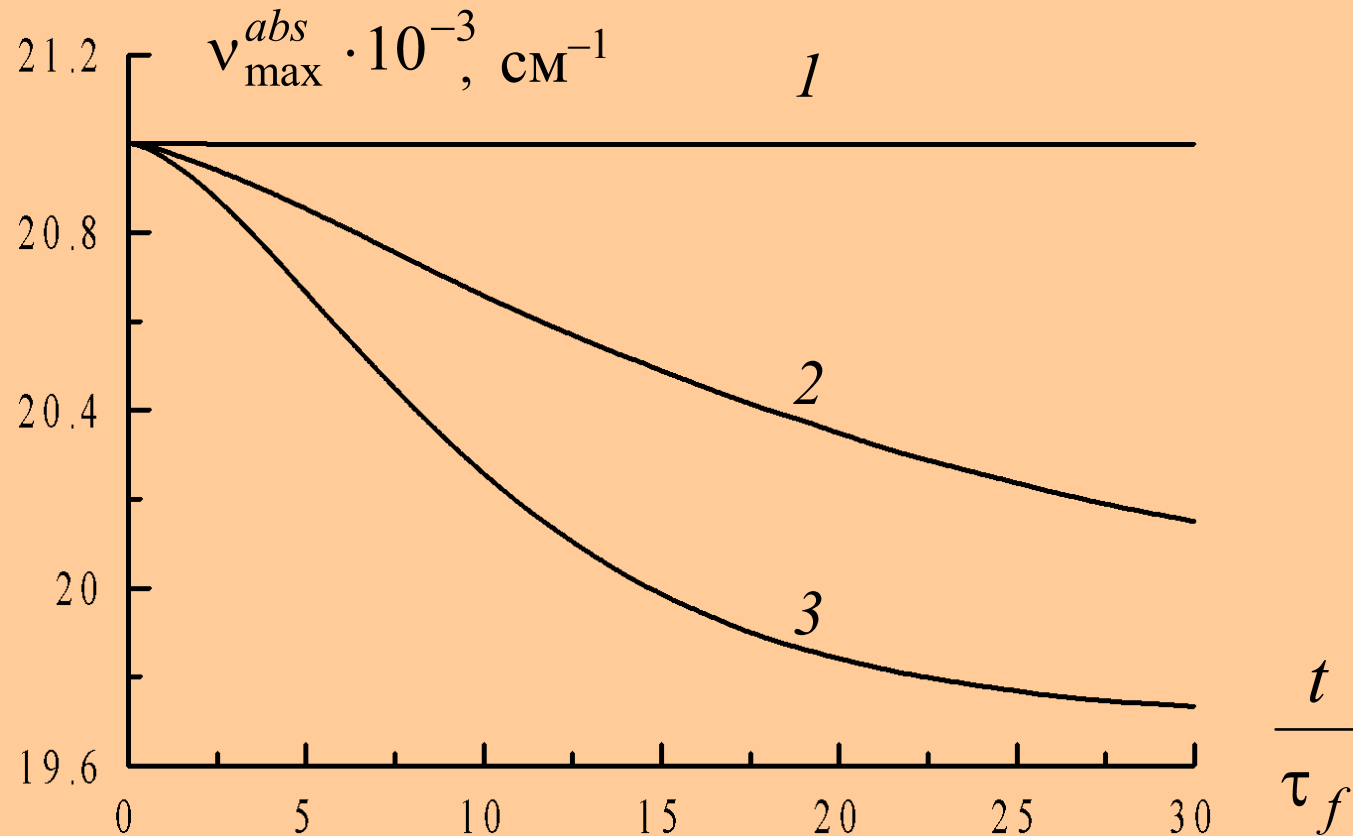
$t = 0$  (1, 2) и  $t = 30$  нс (3,4)





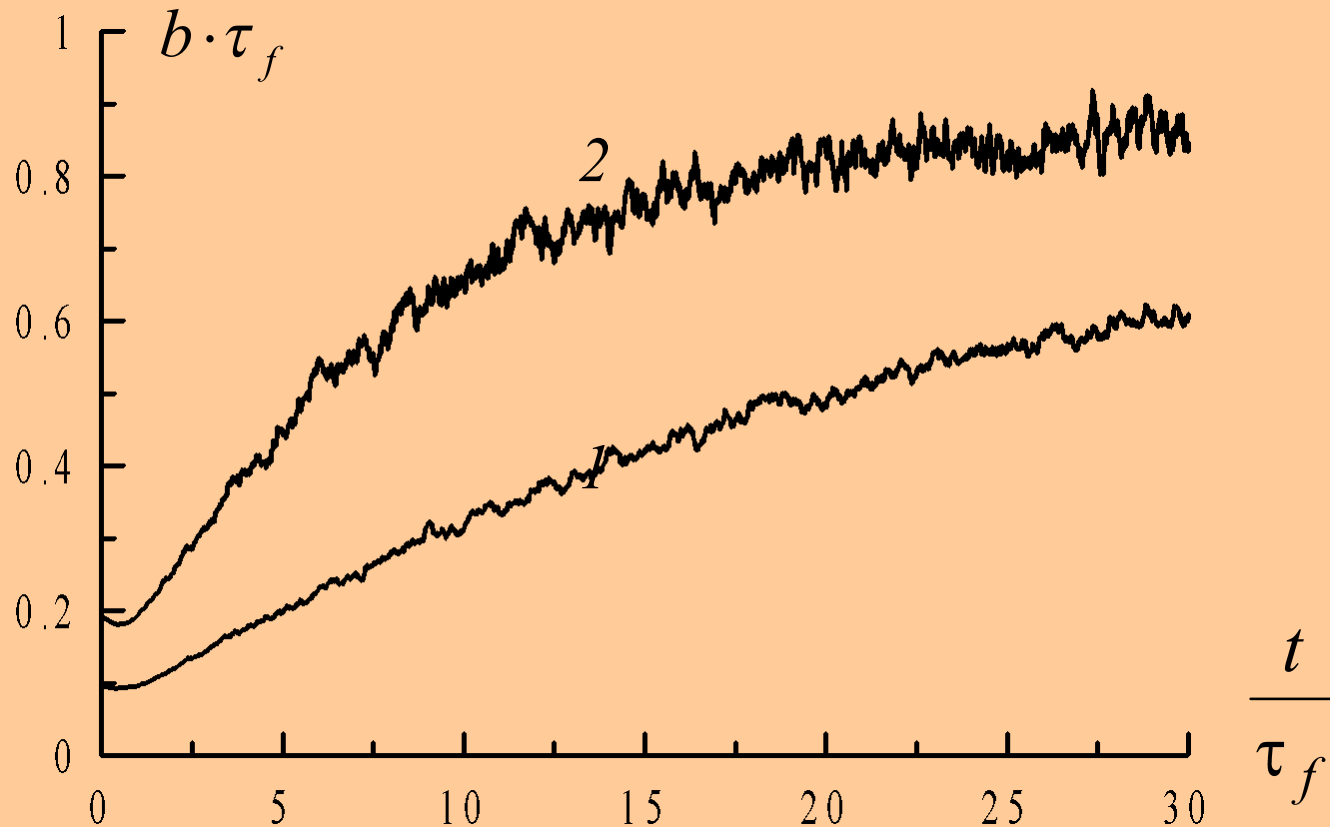
## Рисунок 2 – Зависимости положения максимума спектра поглощения от времени

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



# Рисунок 3 – Зависимости константы скорости поглощения от времени

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



# Рисунок 4 – Зависимости положения максимума спектра поглощения от времени

$$\nu_{ex} = 23\,000 (1), 21\,000 (2), 20\,000 (3), 19\,800 \text{ см}^{-1} (4); b_0 \cdot \tau_f = 3.33$$

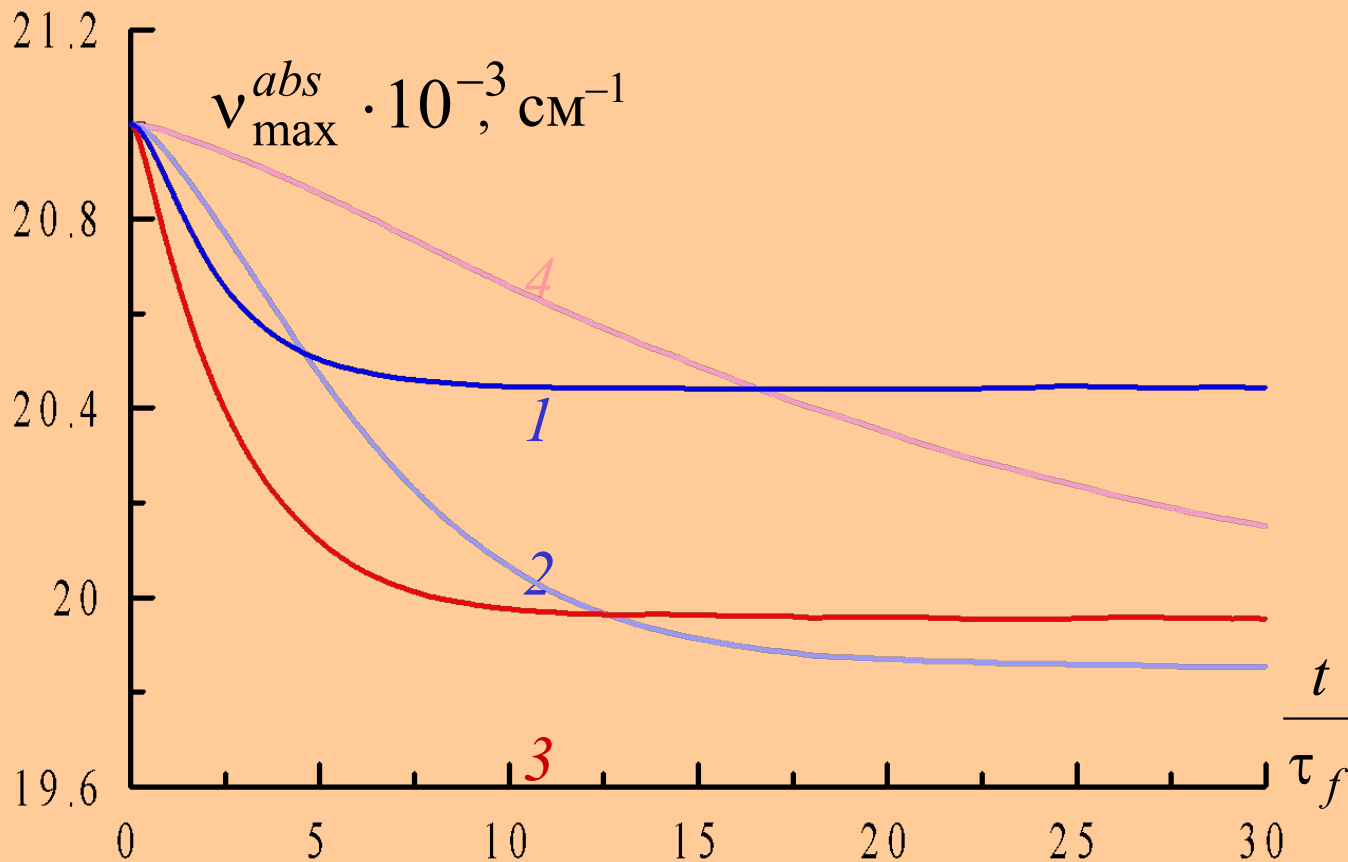
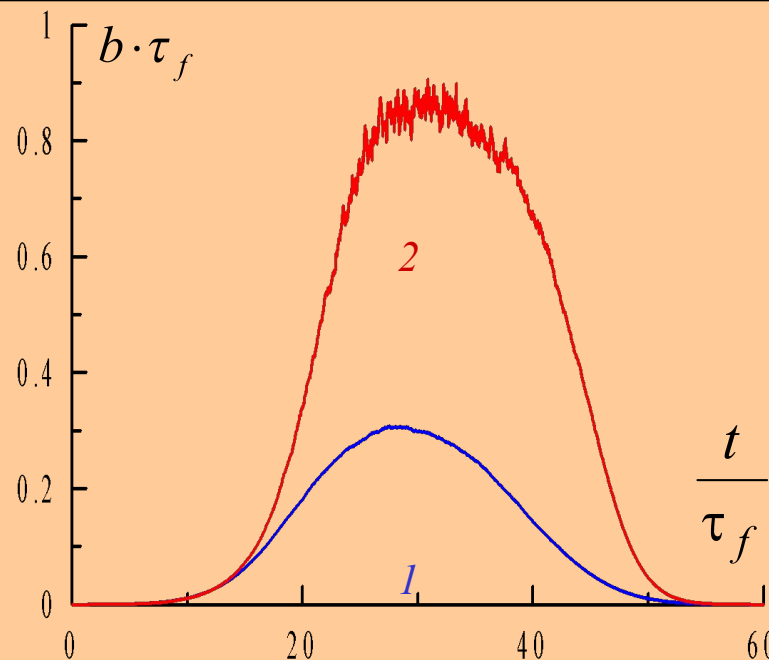
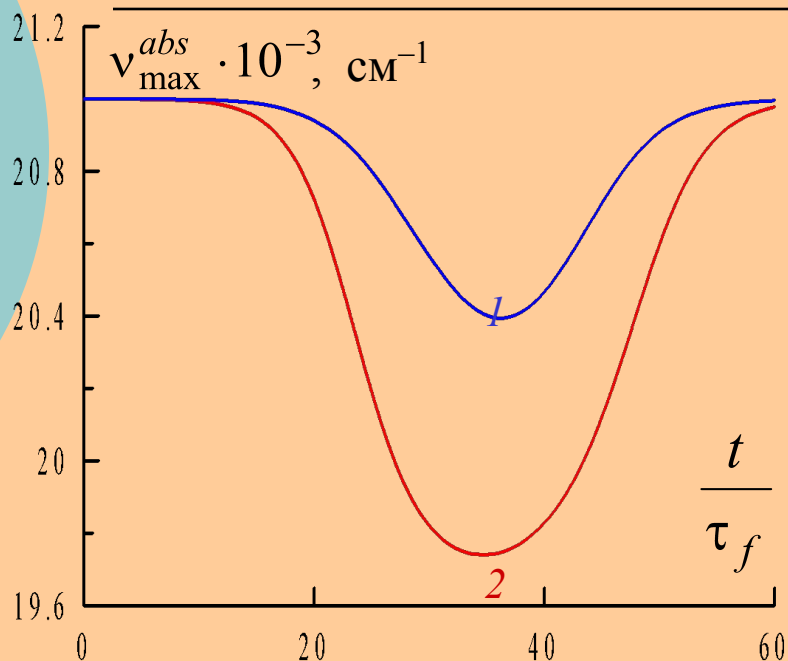


Рисунок 5 – Зависимости положения максимума спектра поглощения от времени

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

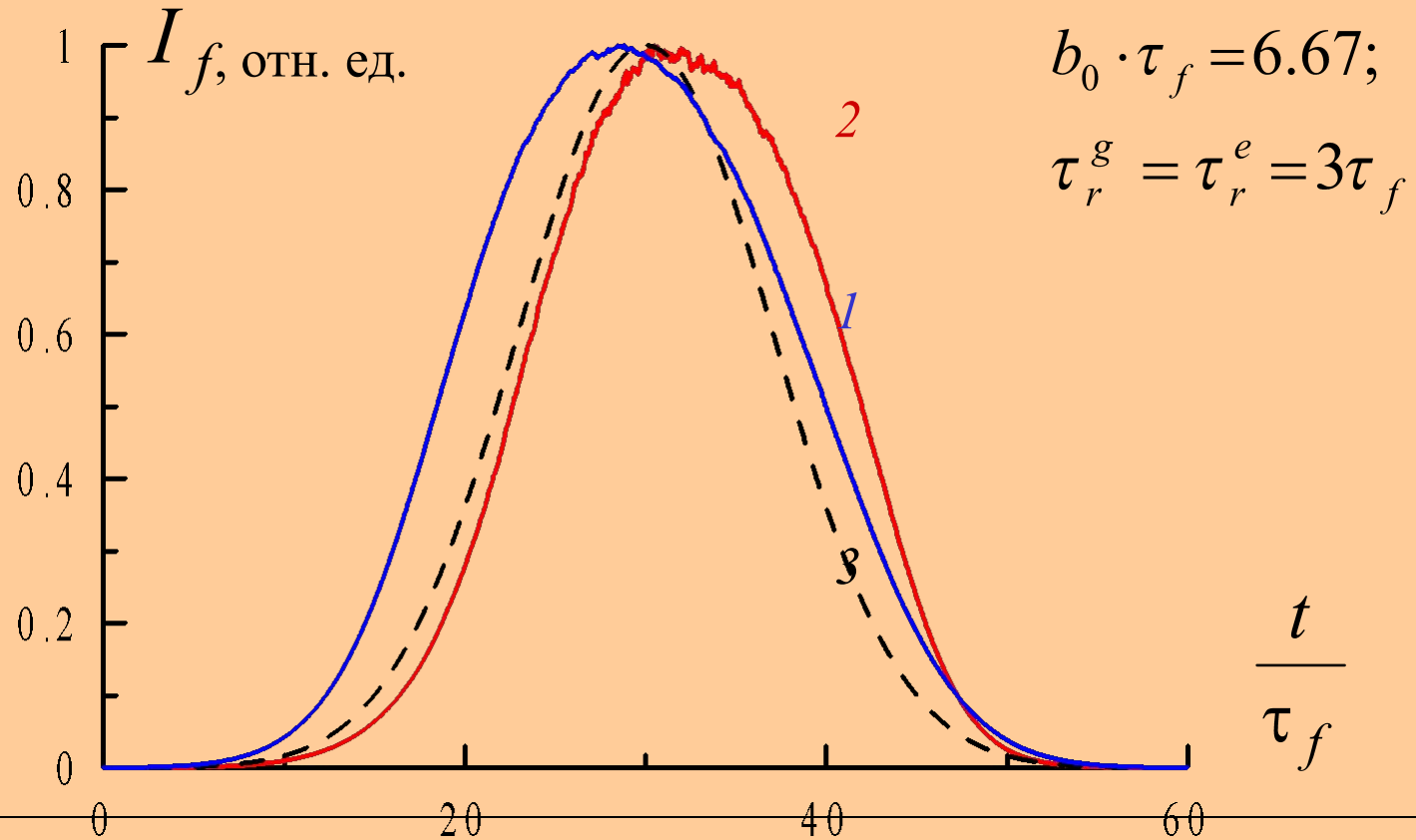
Рисунок 6 – Зависимости константы скорости поглощения от времени

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



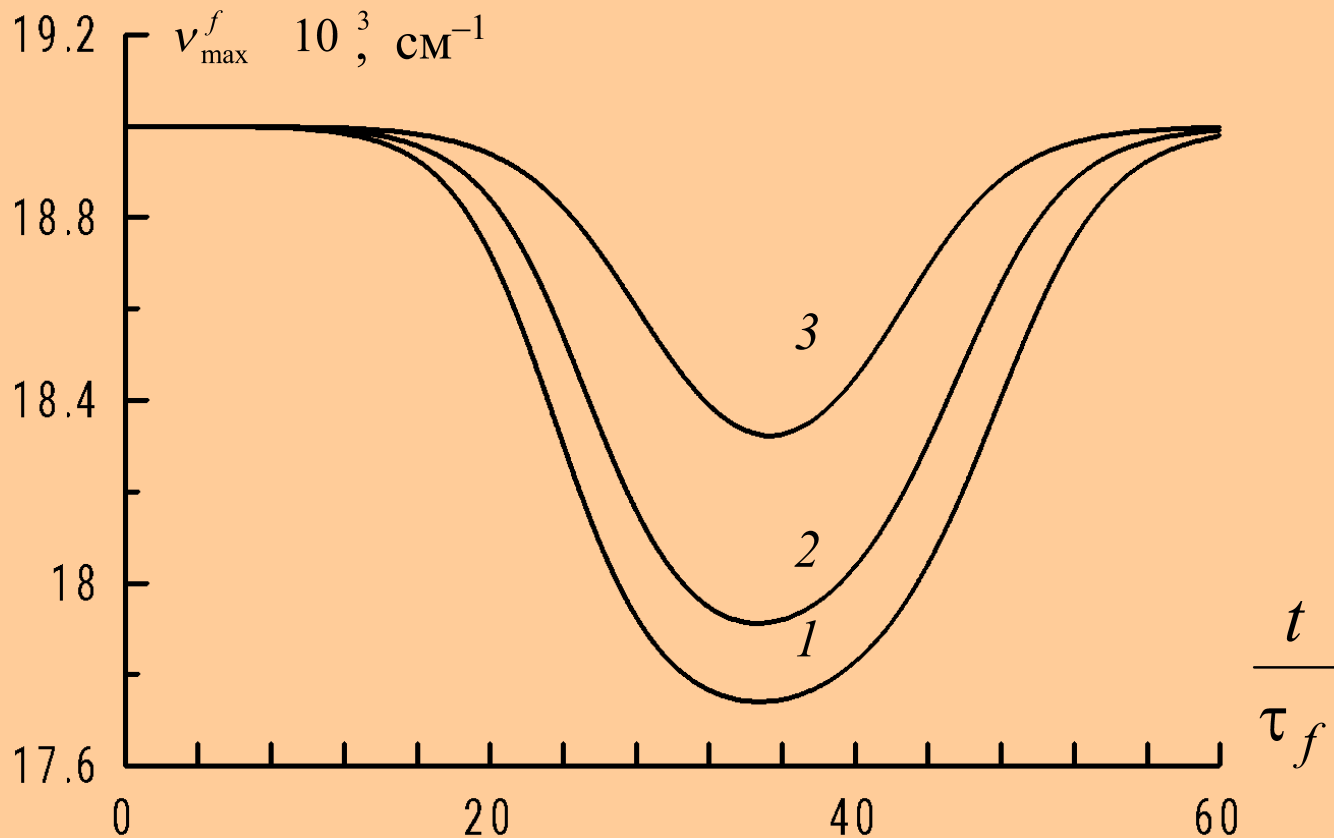
# Рисунок 7 – Зависимости интенсивности флуоресценции от времени

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



# Рисунок 8 – Зависимость максимума спектра флуоресценции от времени

$$C = 10^{-5} (1), 10^{-3} (2), 3 \cdot 10^{-3} \text{ моль/л } (3);$$
$$\nu_{ex} = 20000 \text{ см}^{-1}, b_0 \cdot \tau_f = 6.67; R_0 = 50 \text{ А}, \tau_r^g = \tau_r^e = 3\tau_f$$



# 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!

---



слайд 16 из 16

