



Центр Фотохимии РАН

Исследование фотофизических свойств дибензоилметаната дифторида бора (DBMBF_2)

Выполнил:

Копысов В., гр. 541Б

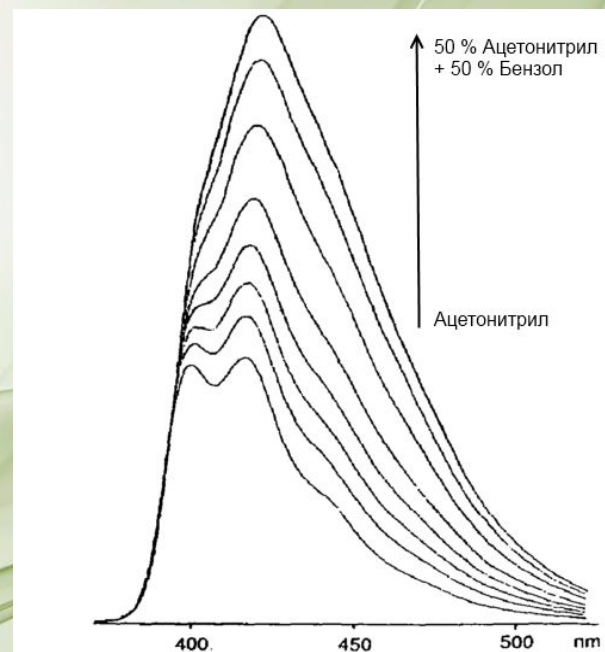
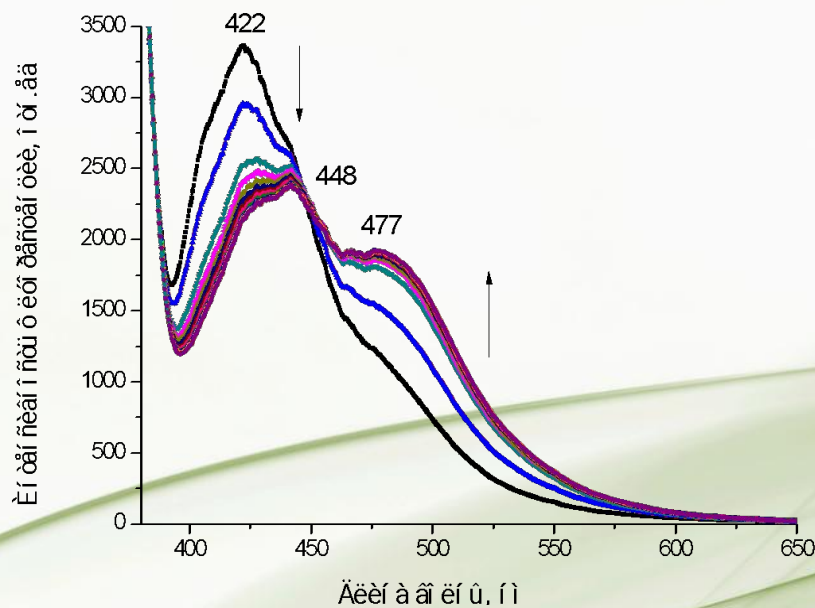
Научный

руководитель:

Сажников В. А.

Почему DBMVF₂?

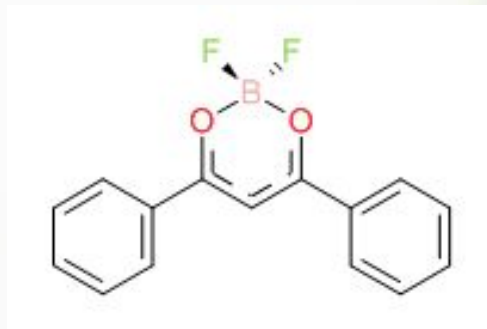
- Chow et al. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 57 (1991), 247-255
- Valat et al. *Canadian Journal of Chemistry*, 73 (1995), 1902-1913
- Truong et al. *Photochemical & photobiological sciences : Official journal of the European Photochemistry Association and the European Society for Photobiology*, 5(2006), 686-97



Цели работы

- Изучить фотофизические свойства DVBVF_2 в различных растворителях
- Построить систему энергетических уровней DVBVF_2
- Расширить модель на производные DVBVF_2
- Исследовать возможность использования DVBVF_2 и его производных для детектирования летучих ароматических углеводородов

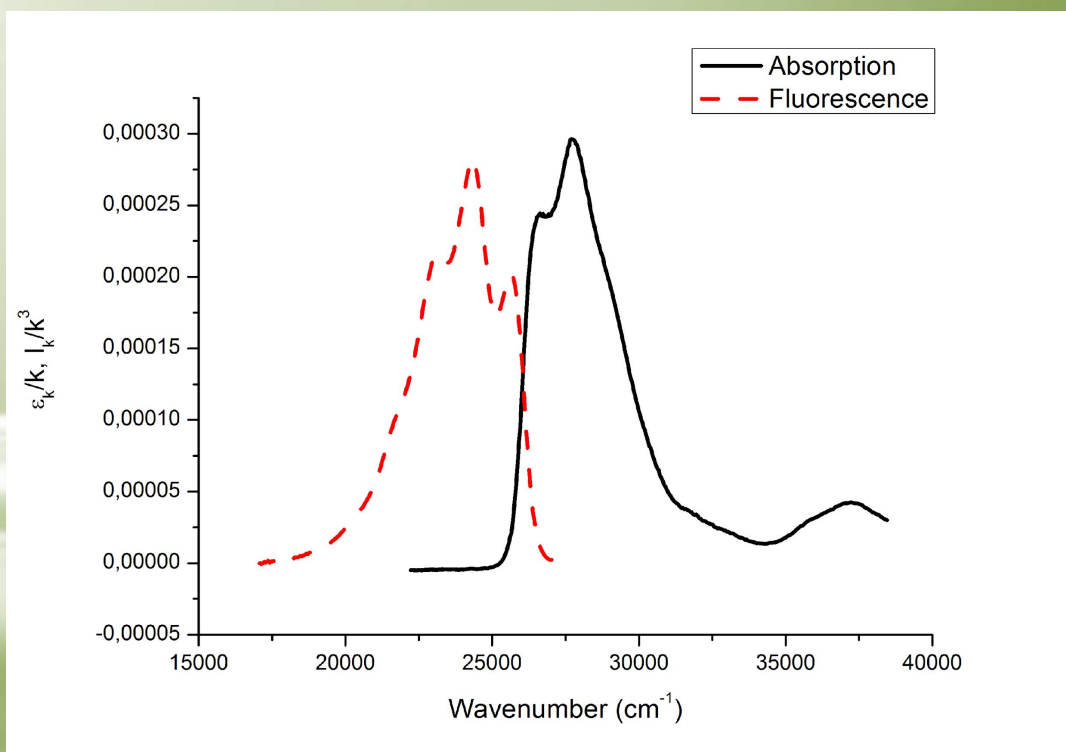
Строение молекулы DBMVF₂



- Легко химически синтезируются с выходом > 80%
- Достаточно стабильны в растворе и на воздухе
- Ароматичность (химические свойства, ЯМР, рентгеноструктурный анализ, ИК-спектроскопия)
- Дипольный момент 6,7 D (полярная связь B-O)
- Фотохимическая активность (2+2 фотоцикло-

Спектры поглощения и флуоресценции

| Р-ль | E_{0-0} (эВ) | λ_{abs} (нм) | λ_{fl} (нм) | ϵ_{max} ($M^{-1} \cdot cm^{-1}$) |
|-------------|-------------------|-------------------------|------------------------|--|
| C_6H_{12} | 3,23 | 360 | 410 | $3,2 \cdot 10^4$ |
| $CHCl_3$ | 3,186 | 364 | 416 | $4,5 \cdot 10^4$ |
| CH_3CN | 3,182 | 365 | 417 | $3,8 \cdot 10^4$ |



Измерение времен жизни

Твердотельный лазер накачки Millennia

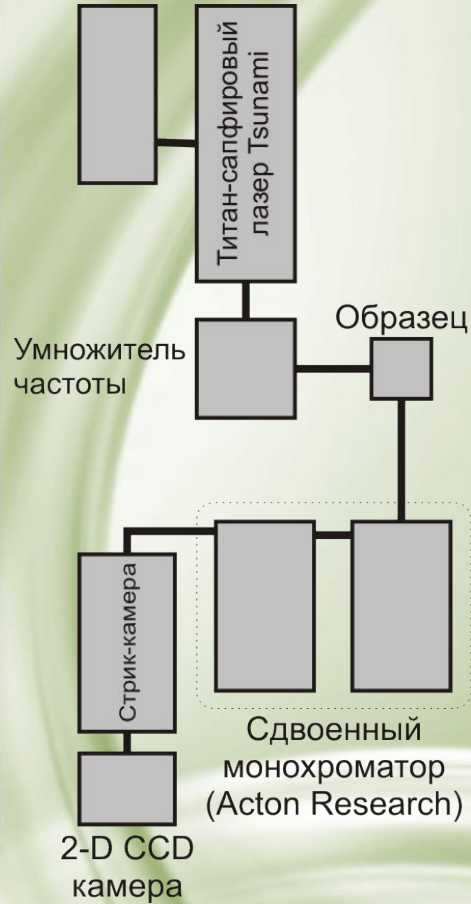


Схема №1

$\lambda_{\text{возб.}} = 370-375$
НМ

Тизм. < 10 нс

Твердотельный лазер накачки Millennia

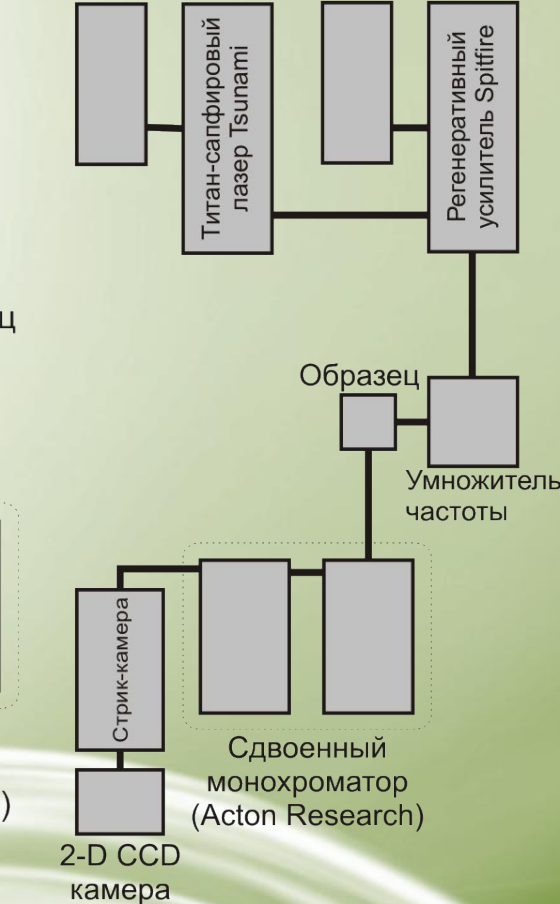
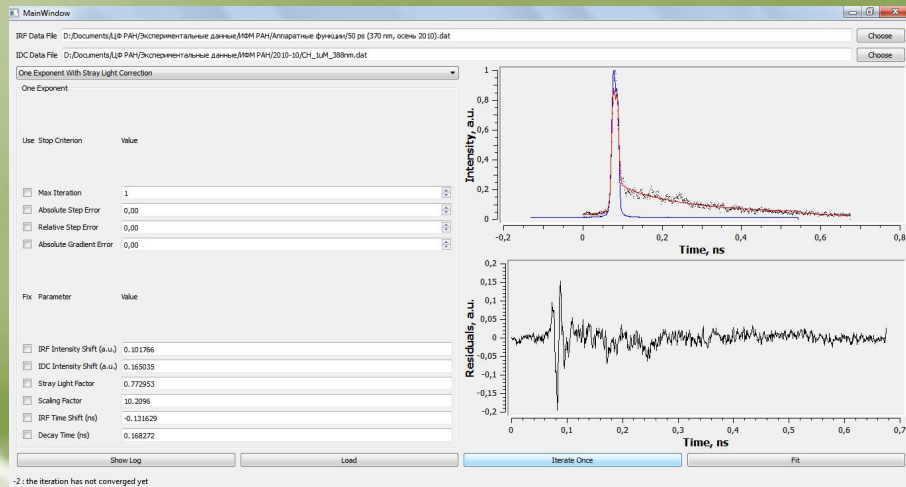
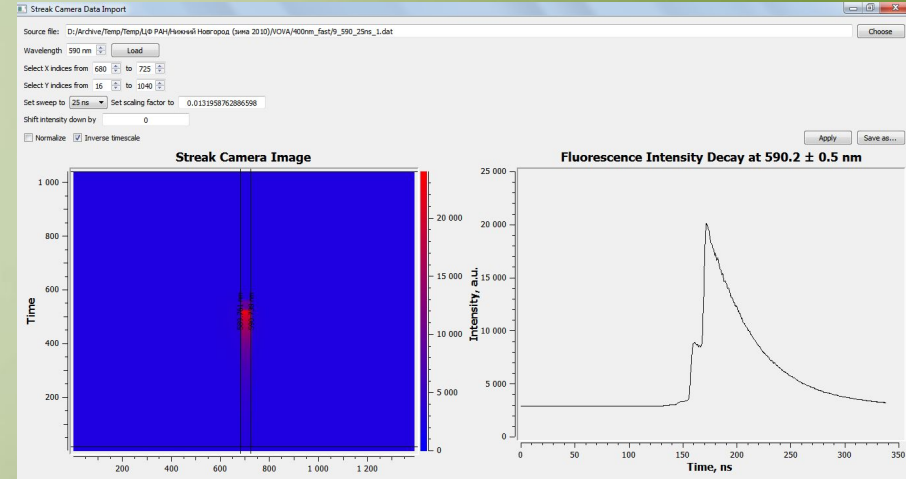


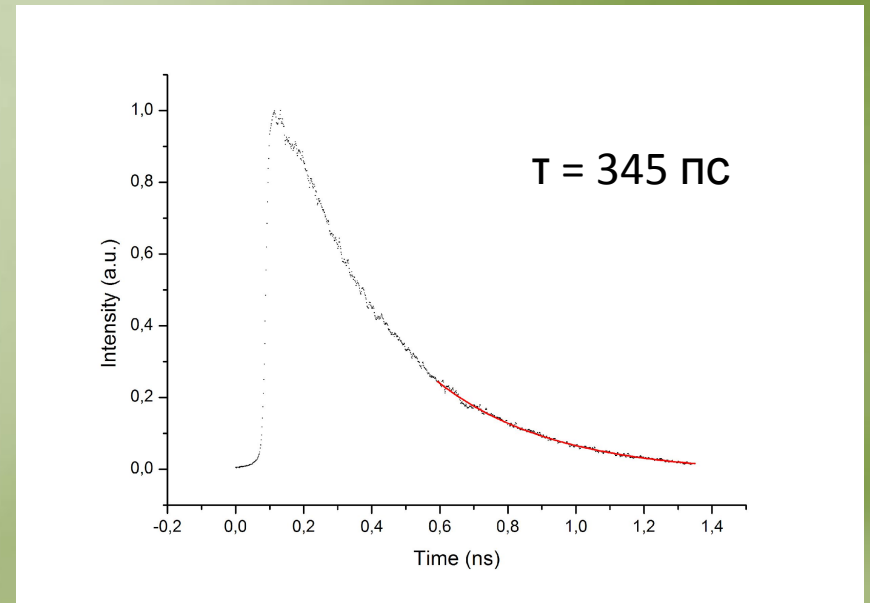
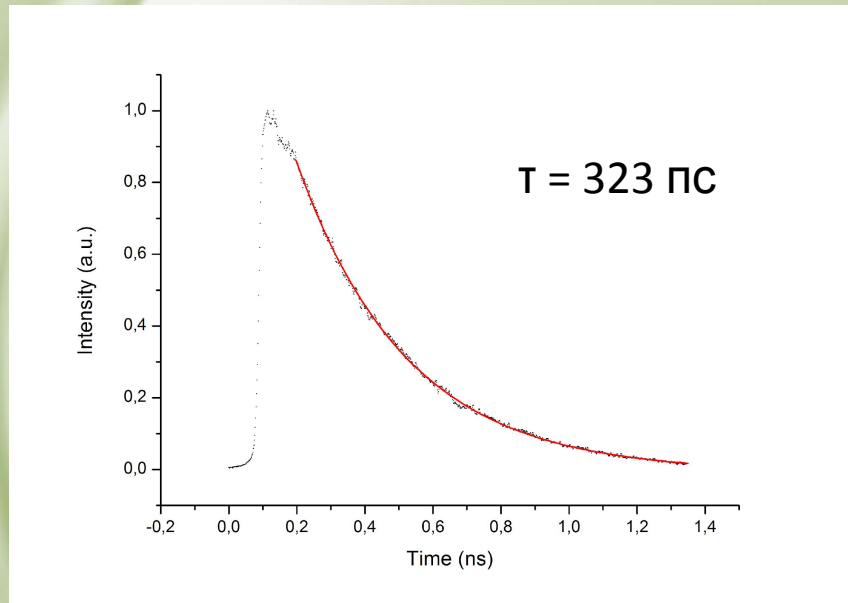
Схема №2

$\lambda_{\text{возб.}} = 267$ или 400
НМ



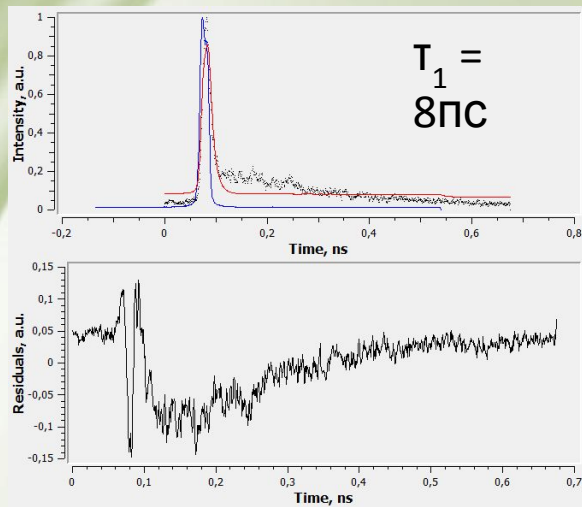
-2: the iteration has not converged yet

Методика деконволюции

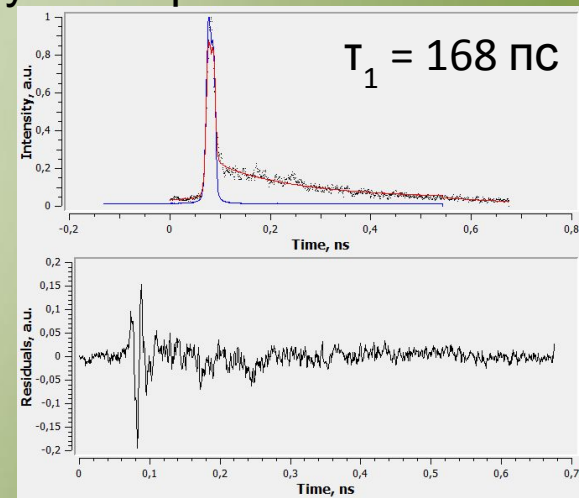


Методика деконволюции

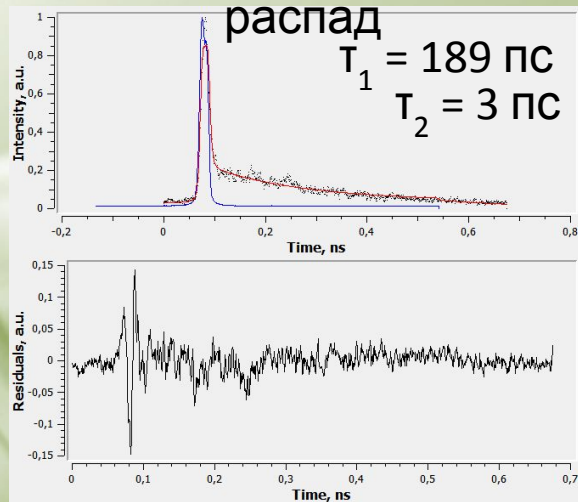
Моноэкспоненциальный распад



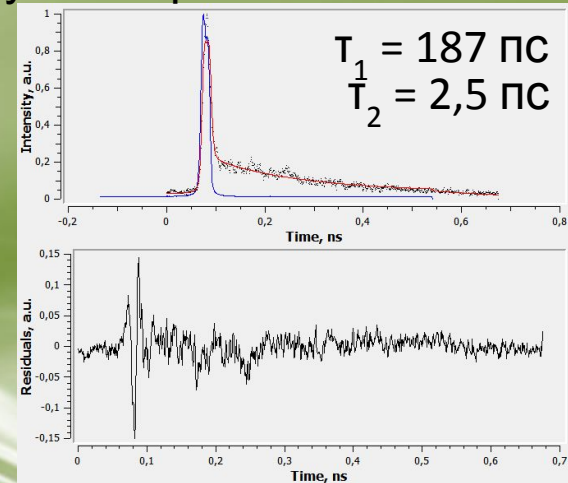
Моноэкспоненциальный распад с
учетом рассеянного света



Биэкспоненциальный



Биэкспоненциальный распад с
учетом рассеянного света



Времена жизни

| Ацетонитрил | 1 μM | 10 μM | 100 μM |
|-------------|-----------------|------------------|-------------------|
| 396 нм | 329 пс | 325 пс | 315 пс |
| 400 нм | - | 321 пс | 312 пс |
| 417 нм | 346 пс | 329 пс | 319 пс |
| 440 нм | 342 пс | 336 пс | 325 пс |
| 466 нм | 345 пс | 338 пс | 329 пс |

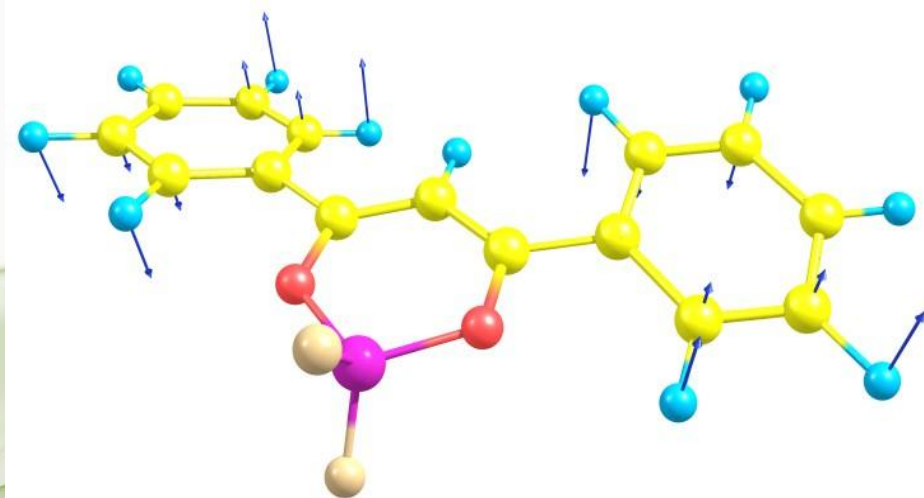
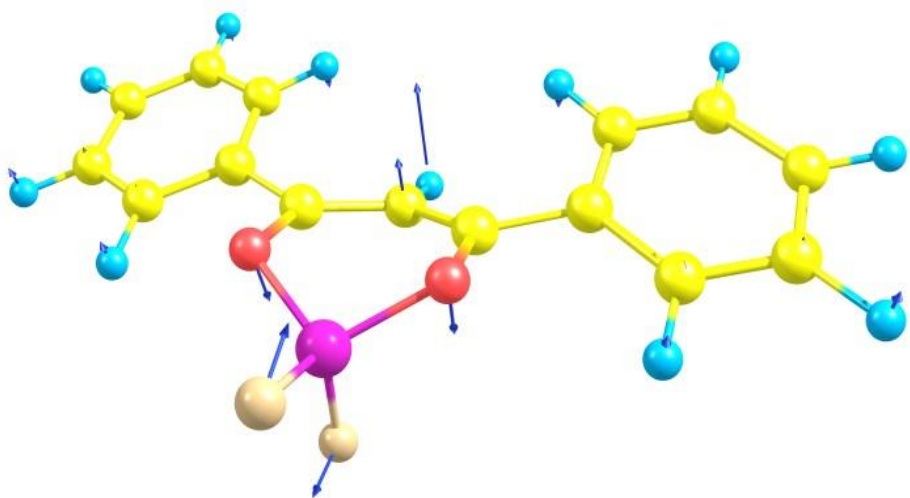
| Циклогексан | 1 μM | 10 μM |
|-------------|-----------------|------------------|
| 388 нм | 168 пс | 167 пс |
| 410 нм | 179 пс | 172 пс |
| 434 нм | 182 пс | 177 пс |
| 462 нм | 179 пс | 176 пс |

Кинетика флуоресценции

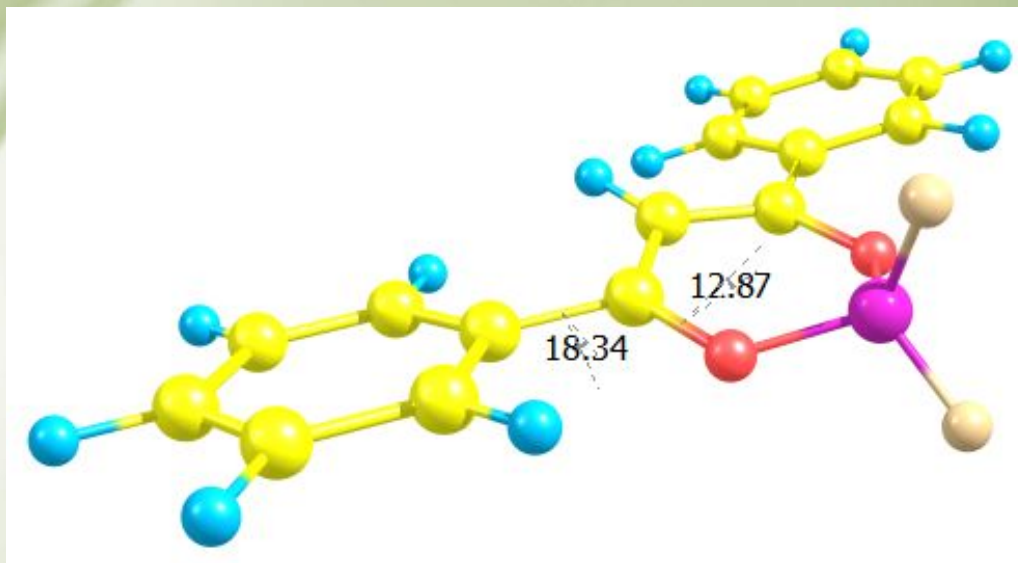
| | τ (пс) | Φ | τ_r (нс) | τ_{nr} (пс) |
|------------------------|-------------|--------|---------------|------------------|
| Ацетонитрил | 346 | 0,158 | 2,19 | 411 |
| Хлороформ | 637 | 0,28 | 2,28 | 885 |
| Циклогексан | 179 | 0,075 | 2,39 | 194 |
| Тетрахлорметан | 371 | 0,15 | 2,47 | 436 |
| Тетрагидрофуран | 316 | - | - | - |
| Ацетон | 374 | - | - | - |

Квантово-химический расчет

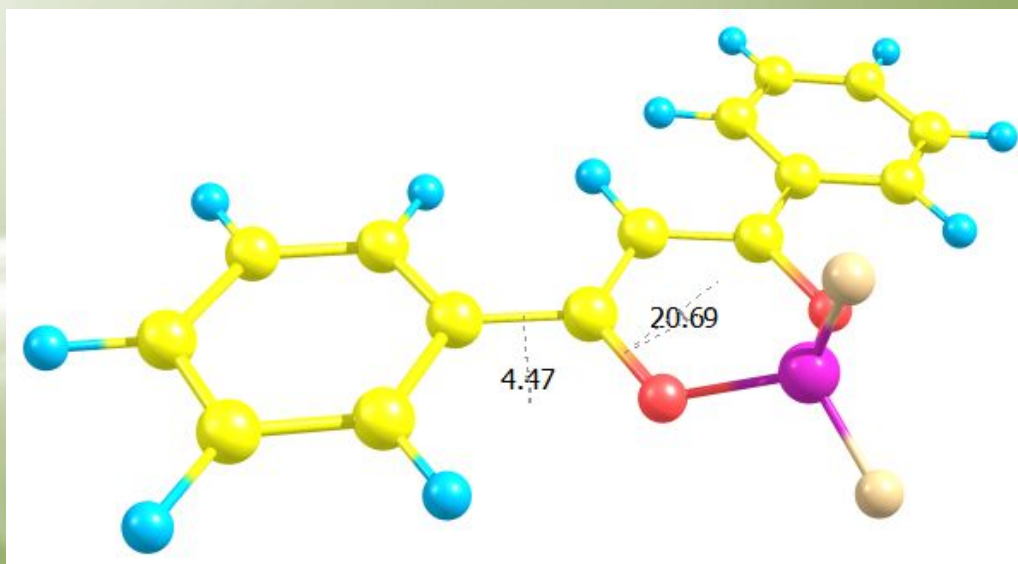
- Gustav et al. *Monatshefte für Chemie*, 120 (1989), 473-489
- Gustav & Storch. *Monatshefte für Chemie*, 121 (1990), 437-446
- Gustav & Storch. *Monatshefte für Chemie*, 121 (1990), 447-454.



Квантово-химический расчет

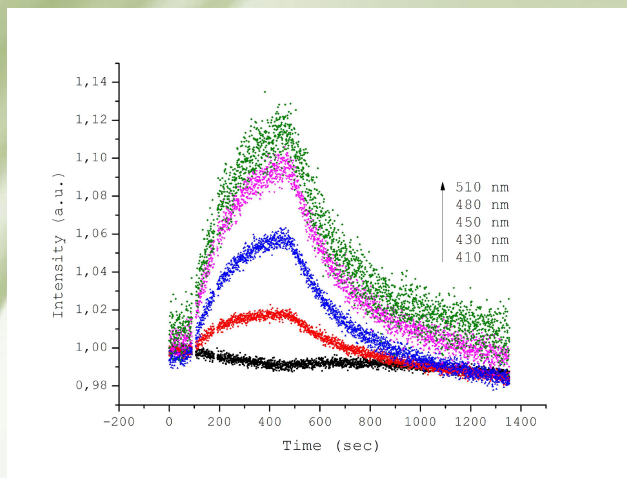


S_0
7,8 D

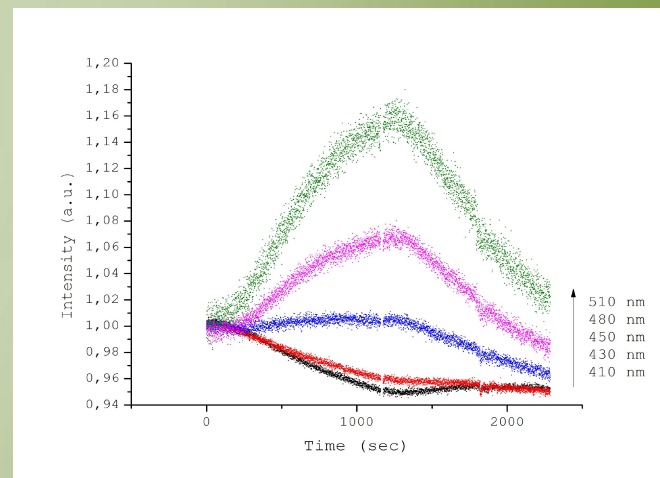


S_1
9,1 D

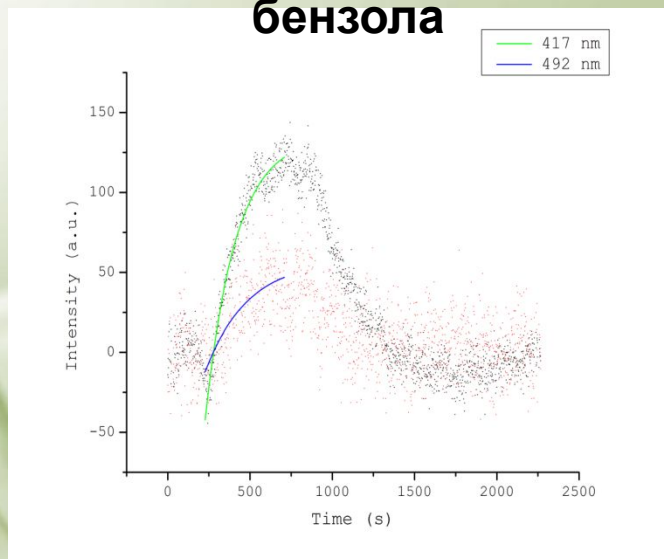
Детектирование паров МАУ



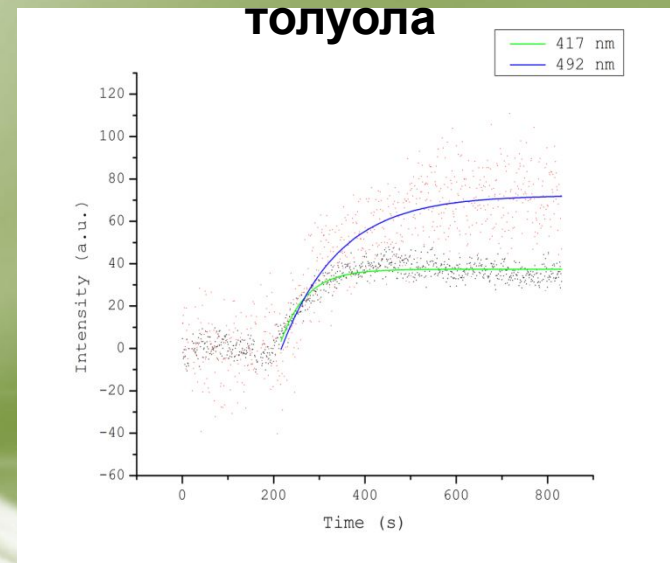
**Отклик на 3000 ppm
бензола**



**Отклик на 100 ppm
толуола**



Отклик на 12 ppm м-



Отклик на 800 ppm п-

Производные DVBVF_2

