



Центр Фотохимии РАН

Исследование фотофизических свойств дибензоилметаната дифторида бора (DBMBF_2)

Выполнил:

Копысов В., гр. 541Б

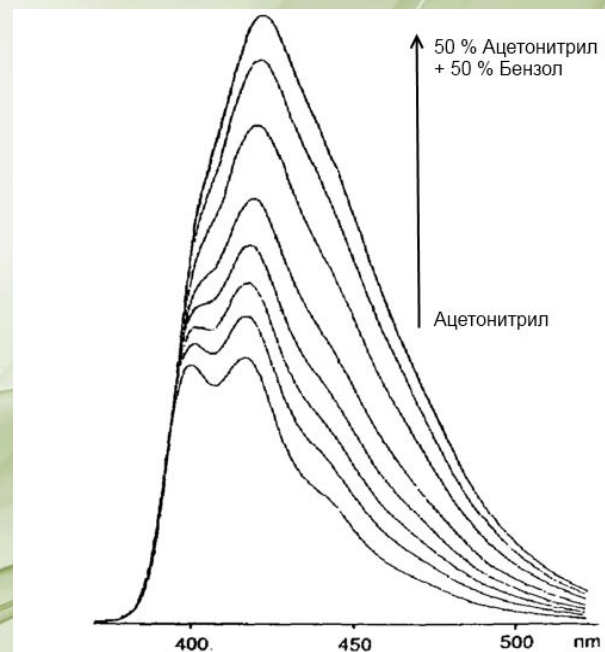
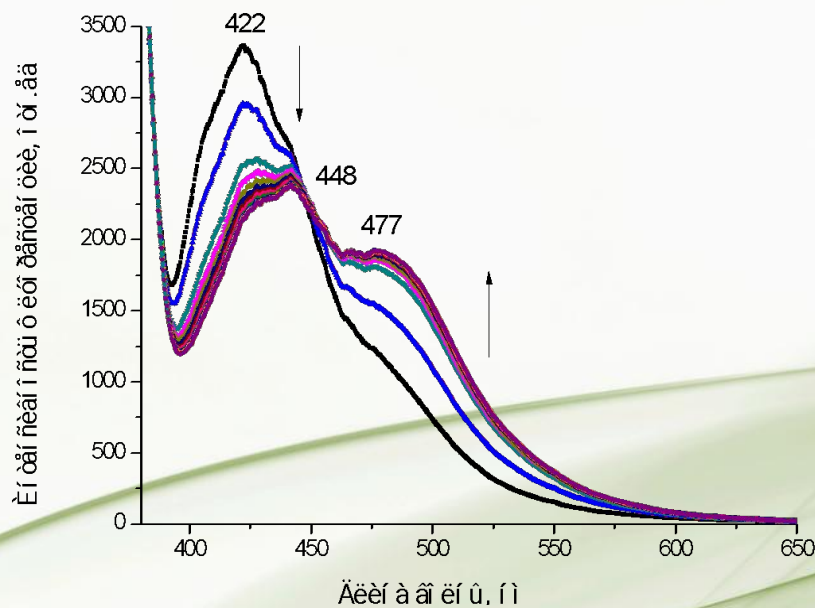
Научный

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

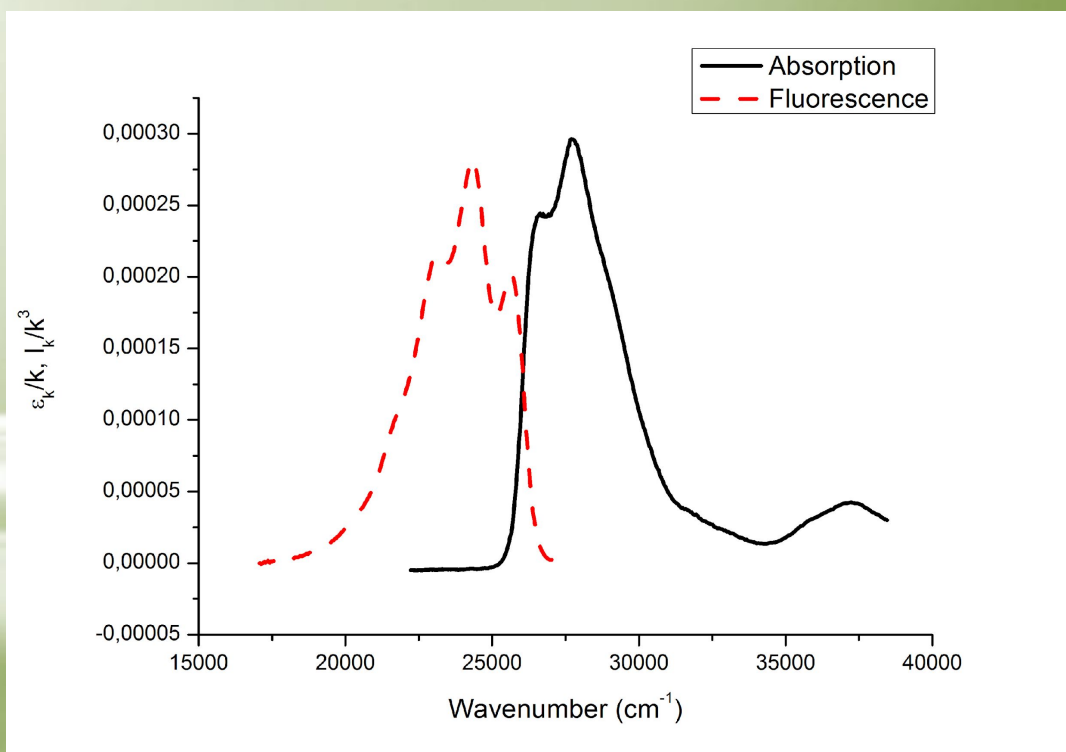
Строение молекулы DBMVF₂



- 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

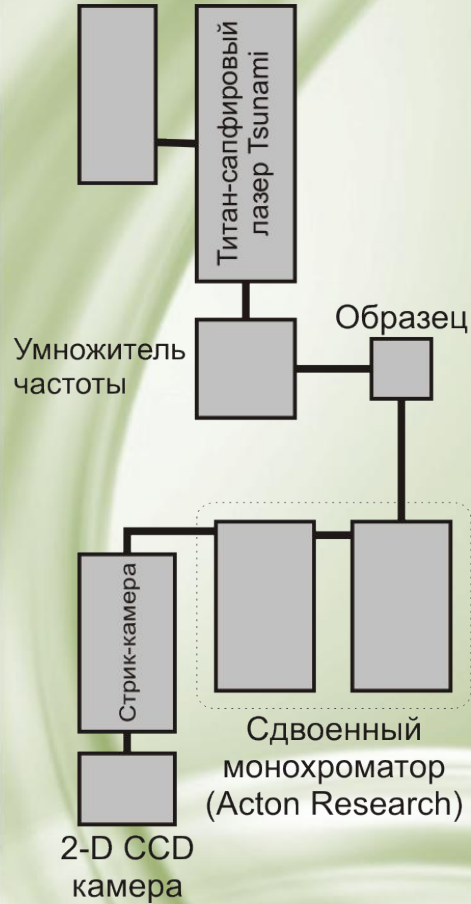


Схема №1

$\lambda_{\text{возб.}} = 370-375$
НМ

Тизм. < 10 нс

Твердотельный лазер накачки Millennia

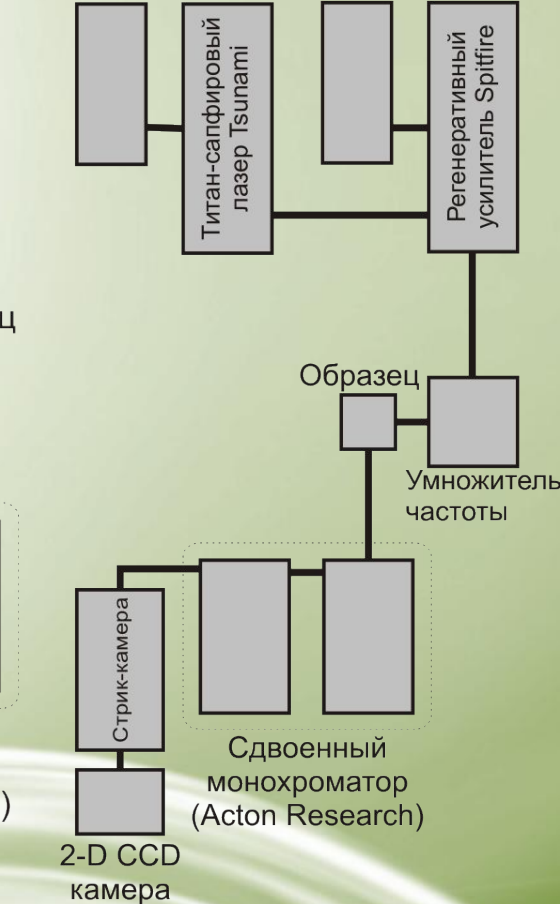
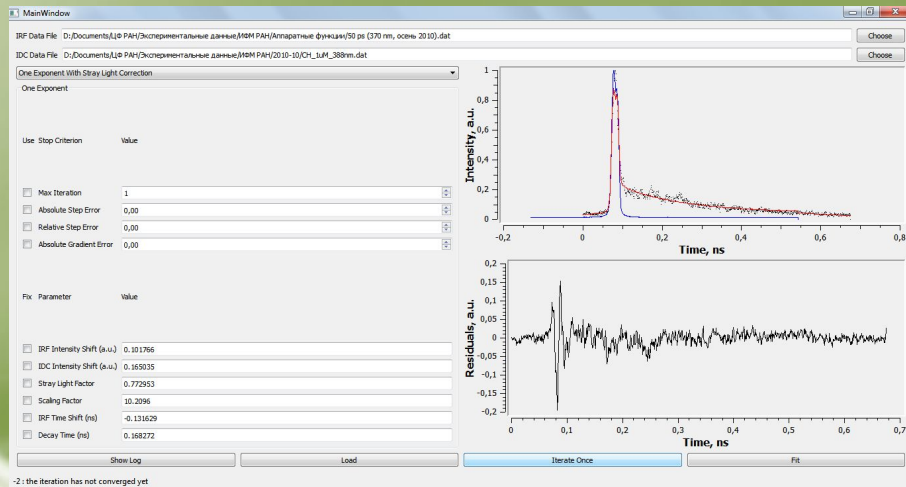
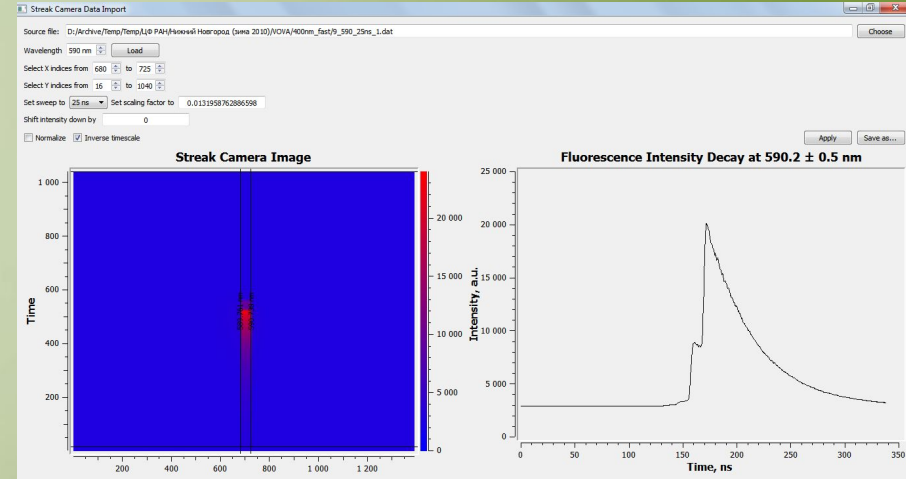


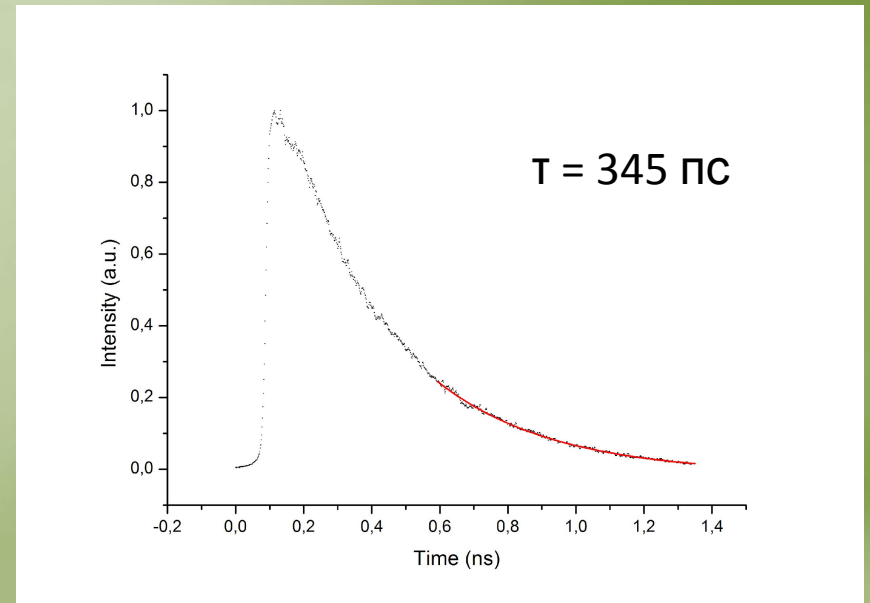
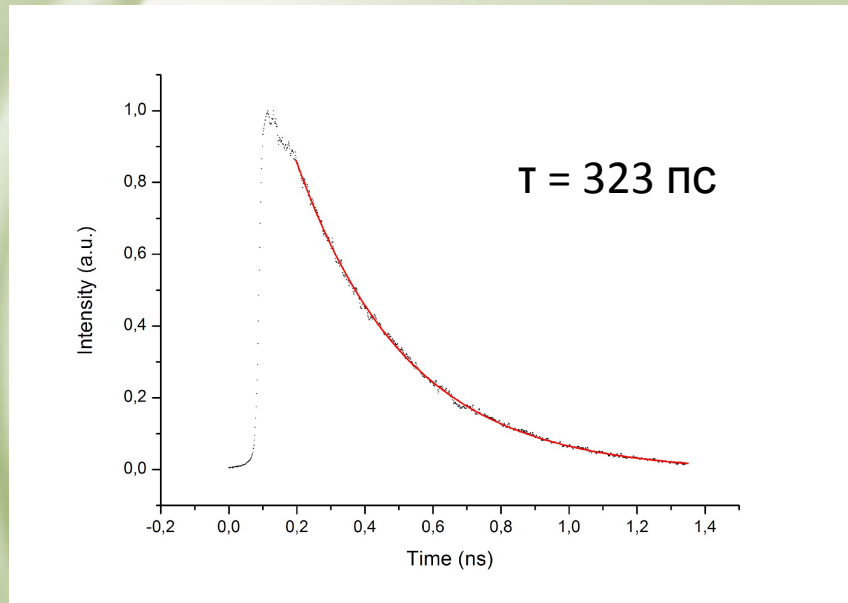
Схема №2

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



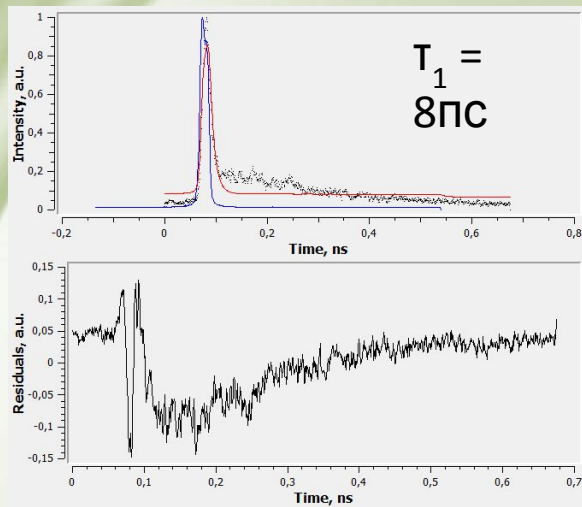
-2: the iteration has not converged yet

Методика деконволюции

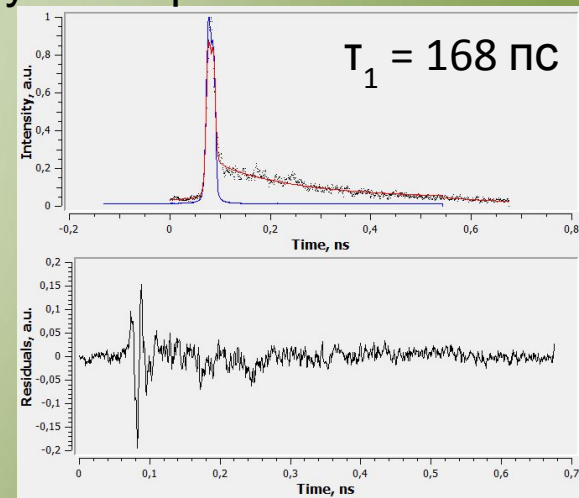


Методика деконволюции

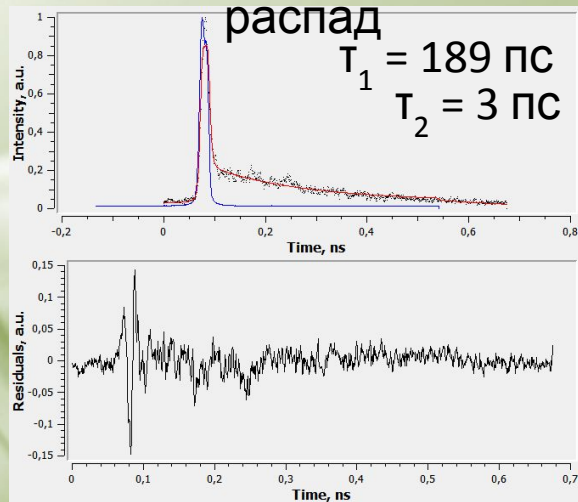
Моноэкспоненциальный распад



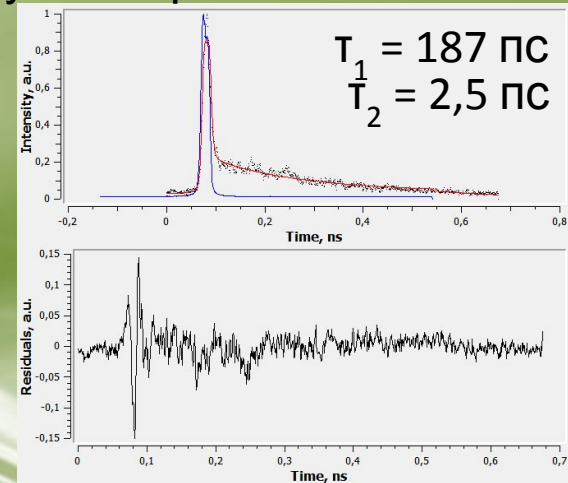
Моноэкспоненциальный распад с
учетом рассеянного света



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

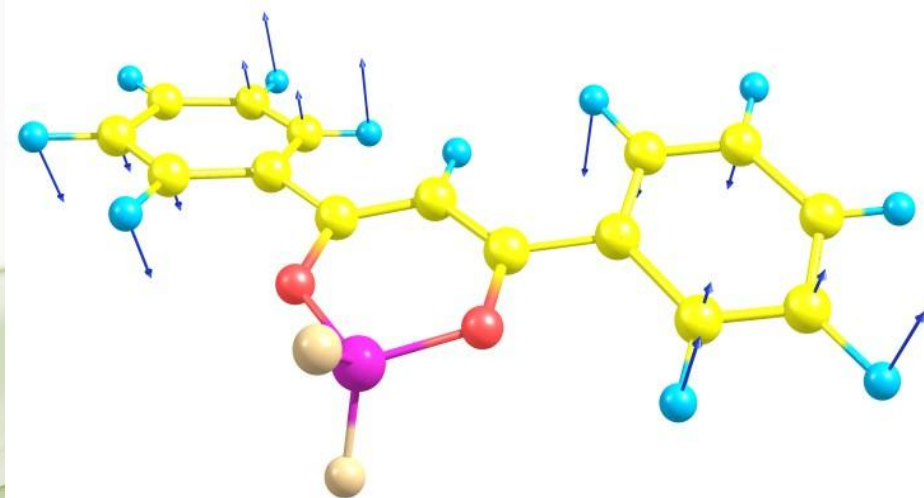
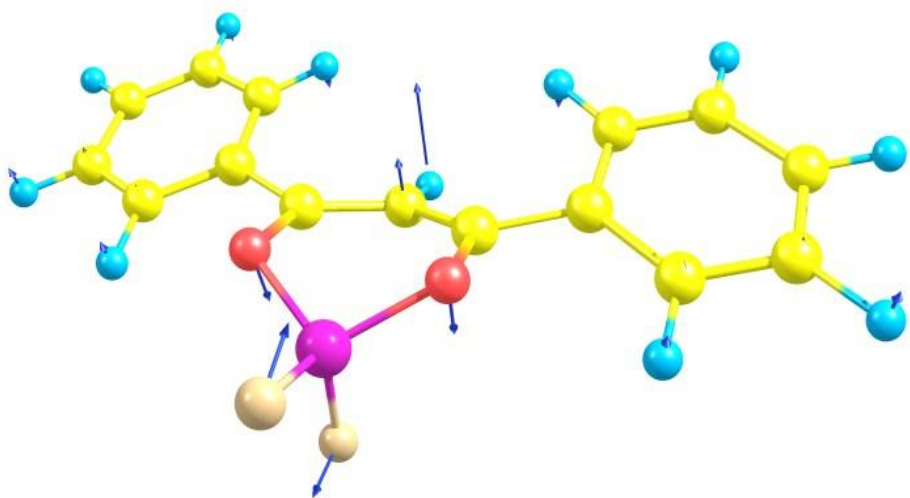
Циклогексан	1 μM	10 μM
388 нм	168 пс	167 пс
410 нм	179 пс	172 пс
434 нм	182 пс	177 пс
462 нм	179 пс	176 пс

Кинетика флуоресценции

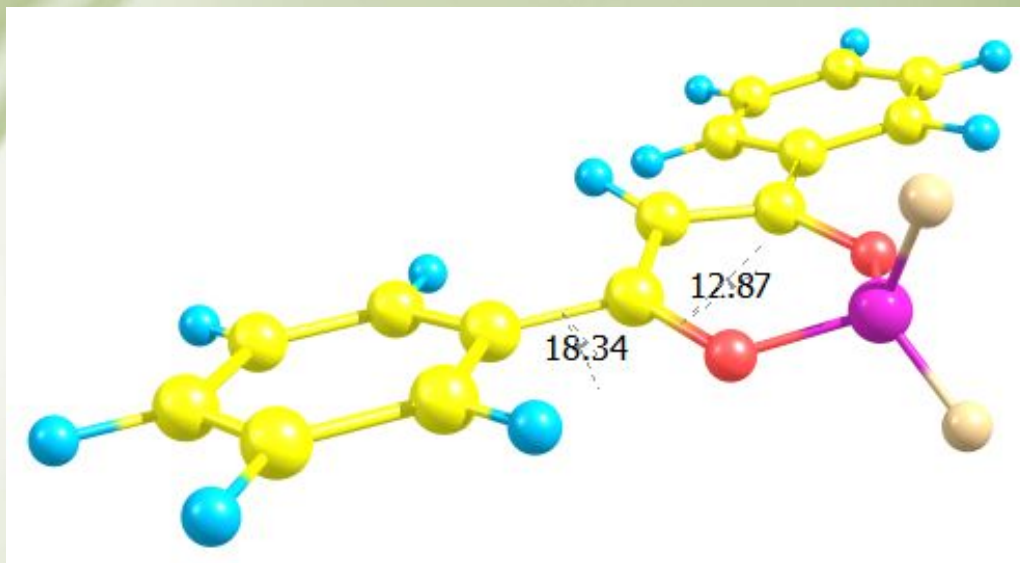
	τ (пс)	Φ	τ_r (нс)	τ_{nr} (пс)
Ацетонитрил	346	0,158	2,19	411
Хлороформ	637	0,28	2,28	885
Циклогексан	179	0,075	2,39	194
Тетрахлорметан	371	0,15	2,47	436
Тетрагидрофуран	316	-	-	-
Ацетон	374	-	-	-

Квантово-химический расчет

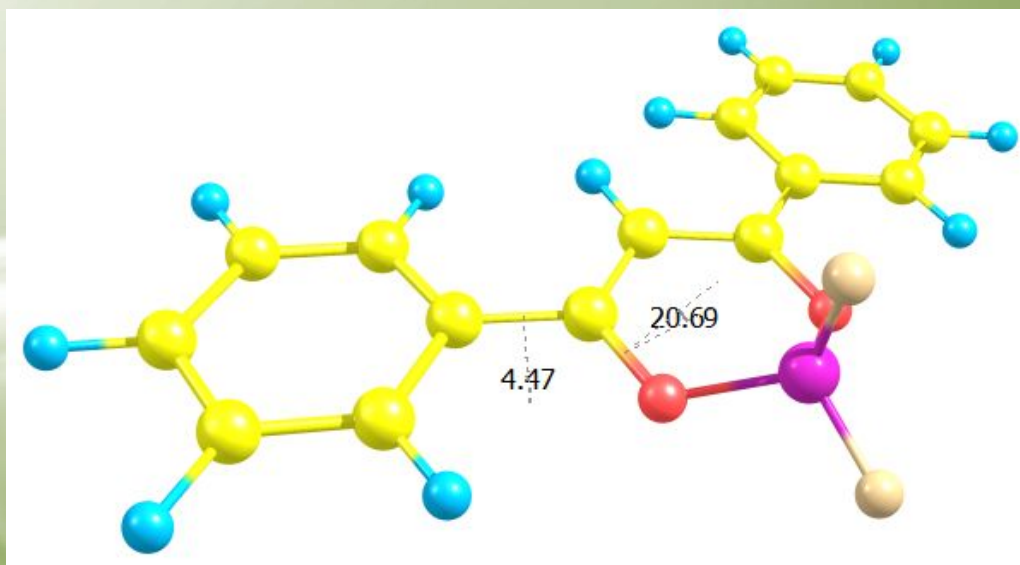
- Gustav et al. *Monatshefte für Chemie*, 120 (1989), 473-489
- Gustav & Storch. *Monatshefte für Chemie*, 121 (1990), 437-446
- Gustav & Storch. *Monatshefte für Chemie*, 121 (1990), 447-454.



Квантово-химический расчет

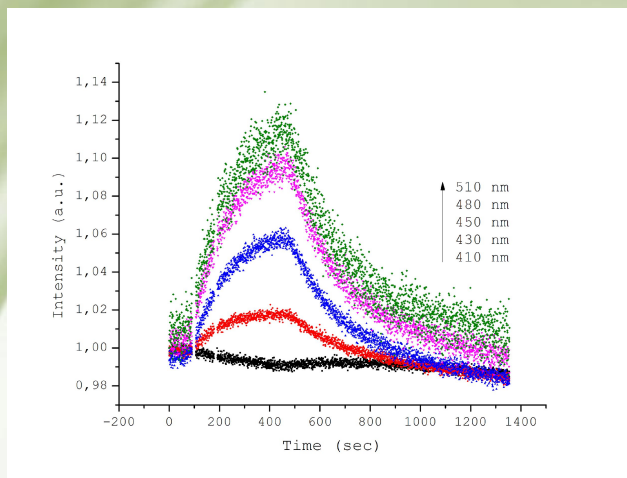


S_0
7,8 D

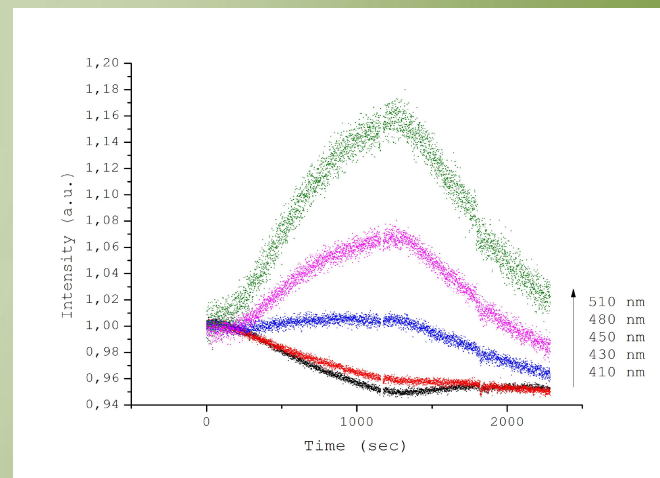


S_1
9,1 D

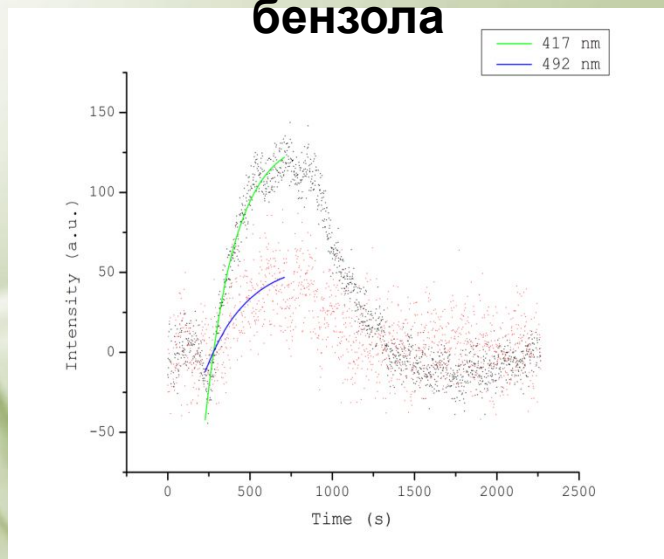
Детектирование паров МАУ



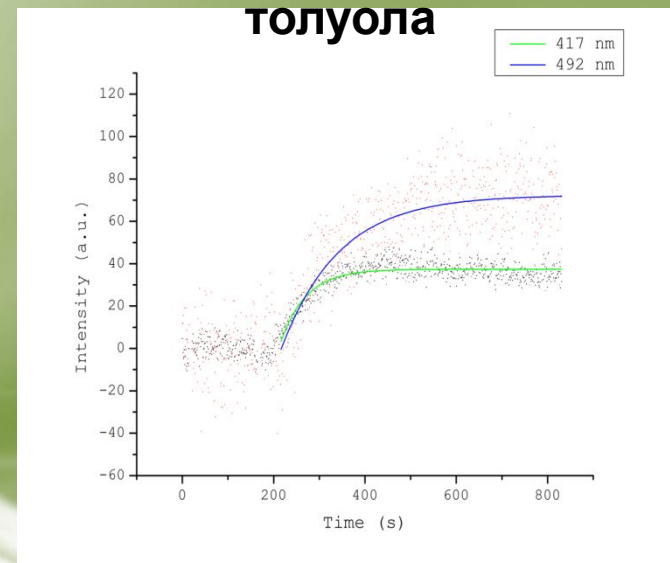
**Отклик на 3000 ppm
бензола**



**Отклик на 100 ppm
толуола**



Отклик на 12 ppm м-



Отклик на 800 ppm п-

Производные DVBVF_2

