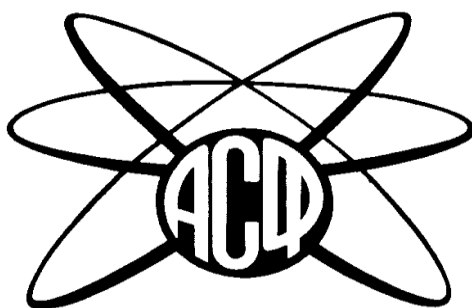


**Ассоциация студентов-физиков и молодых учёных России**  
**Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского**  
**Институт электрофизики УрО РАН**  
при поддержке и участии:  
**Омского научно-исследовательского института приборостроения**  
при участии:  
**Омского государственного педагогического университета**

**В Н К С Ф – 21**

**Двадцать первая Всероссийская**  
**научная конференция студентов-физиков и молодых учёных**



**Россия**

**Материалы конференции**  
**Информационный бюллетень**

**Омск**  
**2015**

Анализ взаимосвязи появления высоких концентраций газов с направлением ветра приводит к выводу о том, что определяющим источником, обуславливающим вариации концентраций, являются фотохимические и окислительные процессы с участием выхлопных газов автотранспорта [3].

Проведенные длительные синхронные измерения показали, что ДОАС газоанализатор может с успехом использоваться в дистанционном мониторинге малых газовых составляющих в приземном воздухе.

Список публикаций:

[1] Platt U., Stutz J. *Differential optical absorption spectroscopy*. Springer-Verlag, New-York, Berlin, Heidelberg, 593p. (2008).

[2] Смирнов С.С., Гейко П.П., Самохвалов И.В. и др. Измерения атмосферных загрязнений трассовым газоанализатором УФ диапазона // *Известия ВУЗов «Физика»* Т. 56 № 8/3. С. 272-274, (2013).

[3] Белан Б.Д. *Озон в тропосфере*. – Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 488 с. (2010).

## Рассмотрение спектральных характеристик молекулы лаурдан в растворителях различной химической природы

*Титова Татьяна Юрьевна*

*Жаркова Оксана Михайловна, Морозова Юлия Петровна, Королев Борис Владимирович*

*Национальный исследовательский Томский государственный университет*

*Артюхов Виктор Яковлевич*

*[tatyana.yu.titova@gmail.com](mailto:tatyana.yu.titova@gmail.com)*

Одним из фундаментальных исследований органических молекул в области оптики и спектроскопии является установление взаимосвязи их фотофизических свойств с особенностями их электронного и структурного строения, межмолекулярных взаимодействий. Флуоресцентные зонды – обширный класс органических соединений. Молекулярные зонды очень широко используются в различных научных исследованиях и имеют большое прикладное значение. Метод флуоресцентных зондов широко используется при решении ряда специфических задач, а также при исследовании нефлуоресцирующих или слабо флуоресцирующих веществ.

В работе экспериментально исследованы спектры поглощения и флуоресценции молекулы лаурдан (6-додеканоил-2-диметиламинонафталин) в гомогенных растворителях различной химической природы. Проведены квантово-химические расчеты методом TDDFT (в газовой фазе и в рамках модели поляризованного континуума IEFPCM).

Выбранная для исследования молекула лаурдан является флуоресцентным зондом, который чувствителен к природе растворителя и тем самым широко используется в биохимических и биофизических исследованиях. В роли фрагмента донора у молекулы выступает диметиламино группа ( $\text{CH}_3\text{-N-CH}_3$ ), а акцептором является карбонильная группа ( $\text{C=O}$ ).

Работа выполнялась с использованием экспериментальных и теоретических (ab initio и полуэмпирических) методов исследования. В экспериментальном подходе применялась флуоресцентная и абсорбционная спектроскопия. Электронные спектры поглощения регистрировались с помощью двухлучевого спектрофотометра Cary 5000 (производитель Varian, Австралия). Спектры флуоресценции регистрировались на установке для снятия спектров люминесценции СДЛ-2. Теоретическая база состояла из нестационарной теории функционала плотности (TDDFT), модели поляризованного континуума (IEFPCM) (пакет программ GAMESS US). Ab initio расчеты выполнялись на базе вычислительного кластера СКИФ Cyberia в межрегиональном суперкомпьютерном центре Томского госуниверситета.

В работе использовались растворители, обладающие как основными свойствами (параметр кислотности  $\text{SA}=0$ ), так и кислотными (параметр  $\text{SB}$  близок к нулевому значению), либо одновременно кислотными и основными (ненулевые значения параметров  $\text{SA}$  и  $\text{SB}$ ) [1]. Данные по электронным спектрам поглощения и флуоресценции лаурдана приведены в таблице -1.

Используемые концентрации молекулы варьировались в пределах  $10^{-3}$ – $10^{-5}$  М. Данные по спектрам поглощения и испускания лаурдана в ацетонитриле и тетрагидрофуране заимствованы из [2]. По положению полос для лаурдана в глицерине наблюдается полное соответствие с результатами авторов [3].

Значение параметров кислотности  $\text{SA}$ , основности  $\text{SB}$  и полярности  $E_T^N$  (отражает суммарный эффект всех осуществляющихся в растворе межмолекулярных взаимодействий) для растворителя Тритон X-100 ранее не были известны, поэтому на основании экспериментальных исследований построены зависимости максимумов полос флуоресценции от параметра  $\text{SA}$ ,  $\text{SB}$  и  $E_T^N$ . Получено, что значение параметра  $\text{SA}$  для

Тритона X-100 составляет  $0.073 \pm 0.019$ , параметр SB попадает в интервал  $0.222 \pm 0.096$  и величина параметра  $E_T^N$  составила  $0.434 \pm 0.003$ .

Таблица-1

растворитель	$\lambda_{\max}^{ab}$ (нм/см <sup>-1</sup> )	$\lambda_{\max}^{\pi}$ (нм/см <sup>-1</sup> )	$\nu_{\text{Stokes}}$ , см <sup>-1</sup>	сдвиг относительно гексана (фл), см <sup>-1</sup>
гексан	343 / 29150	396 / 25200	3950	0
изопропанол	366 / 27320	474 / 21100	6220	4100
ацетон	351 / 28490	447 / 22370	6120	2830
Тритон X-100	354 / 28250	459 / 21740	6510	3460
диоксан	349 / 28650	426 / 23470	5180	1730
метанол	368 / 27170	498 / 20080	7090	5120
этанол	366 / 27320	488 / 20500	6820	4920
этилацетат	348 / 28730	431 / 23200	5530	2000
ацетонитрил	255 / 28090	453 / 22070	6020	3130
глицерин	365 / 27400	505 / 19800	7600	5320
тетрагидрофуран	351 / 28490	432 / 23150	5340	2050

Проведен квантово-химический расчет электронного спектра поглощения и флуоресценции с учетом растворителя для плоской структуры в геометрии основного и возбужденного состояний молекулы в рамках поляризационного континуума (в циклогексане, ацетоне, тетрагидрофуране, метаноле и этаноле). При проведении сопоставления результатов расчета и эксперимента проявилось несоответствие, поскольку в программе учитывается значение диэлектрической постоянной и не учитываются параметры растворителя.

Исследована зависимость величины дипольного момента лаурдана от диэлектрической проницаемости растворителя, полученного в расчете методом TDDFT/B3LYP. Для  $S_0$ -состояния лаурдана в различных растворителях величина дипольного момента изменяется примерно в 1.2 раза относительно циклогексана и в 2.6 – относительно газовой фазы. При переходе  $S_0 \rightarrow S_1$  значение дипольного момента увеличивается примерно в два раза, как для газовой фазы, так и с учетом растворителей. С помощью метода спектральных сдвигов полученное значение дипольного момента во флуоресцентном состоянии лаурдана в циклогексане соответствует 16 D.

Список публикаций:

- [1] Catalan J. // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2009. № 113. P. 5951–5960.  
 [2] Jozefowicz M., Kozyra K. A., Heldt J. R., Heldt J. // *Chemical Physics*. 2005. V. 320. P. 45–53.  
 [3] Брозис М., Томин В. И. // *Журнал прикладной спектроскопии*. 2003. Т. 70, № 4. С. 465–468.

## Исследование оптических свойств кристаллов алюмокалиевых квасцов, легированных хромом

**Ткаченко Кристина Геннадьевна**

**Иванов Юрий Степанович**

*Новосибирский государственный университет*

*Гец Виктор Анатольевич*

*[kristina\\_tkachenko1996@mail.ru](mailto:kristina_tkachenko1996@mail.ru)*

Получение новых функциональных материалов для фотоники требует изучения возможности вхождения различных активаторов в матрицу лазерного кристалла. Спектральные характеристики кристалла определяют возможную область его применения.

Постановка задачи. Вырастить кристаллы алюмокалиевых  $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  и хромокалиевых  $\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  квасцов, а также алюмокалиевых квасцов с небольшими добавками хромокалиевых (в весовом отношении 10:1 и 5:1). По спектрам пропускания электромагнитного излучения установить причину изменения цвета смешанных кристаллов в зависимости от типа освещения.

Методика выращивания. 45 грамм порошка  $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  заливали 300 мл дистиллированной воды и нагревали с легким перемешиванием до полного растворения. Для выращивания хромокалиевых квасцов брали 112 грамм порошка на 300 мл воды. При выращивании алюмокалиевых квасцов с ионами хрома на 45 грамм  $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  брали 4,5 грамма (10:1) и 9 грамм (5:1) порошка  $\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ . После фильтрования стаканы с растворами помещались в безопасное место. Через несколько дней на дне стаканов-кристаллизаторов