

**МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО  
ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН  
САМАРКАНДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ АЛИШЕРА НАВОИ**

**На правах рукописи**

**УДК 535.37:541.14**

**РАХИМОВ ШЕРЗОД ИСМОИЛОВИЧ**

**СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И ФОТОХИМИЧЕСКИЕ  
СВОЙСТВА ГОМОДИМЕРОВ СТИРИЛОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ И  
РОДСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ В РАСТВОРАХ**

Специальность 01.04.05-Оптика

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

**Самарканд – 2012**

Работа выполнена в Самаркандском государственном университете им.А.Навои

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор **Низомов Негмат Низомович**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор **Отажонов Шавкат Отажонович**

доктор физико-математических наук,  
профессор **Эшпулотов Барот**

Ведущая организация: Отдел Теплофизики АН РУз

---

Защита состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2012 года в \_\_\_ часов на заседании Объединенного специализированного Совета ДК.015.90.01 при Отделе теплофизики Академии наук Республики Узбекистан и Самаркандском государственном университете им. А.Навои по адресу: 140104, Самарканд, Университетский бульвар, 15.

Тел: (+99871) 276-49-07, e-mail: [nnizamov@yandex.ru](mailto:nnizamov@yandex.ru)

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Самаркандского Государственного Университета им А.Навои, а также, на информационно-образовательной сети Ziyonet по адресу: [www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2012 года

**Ученый секретарь  
Специализированного Совета**

**д.ф.-м.н. КОХХАРОВ А.М.**

## 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

**Актуальность работы.** Органические красители широко применяются как активные среды и пассивные затворы в оптических квантовых генераторах, в качестве фотосенсибилизаторов в фотографии, в аналитической химии при определении микроколичеств различных элементов, в качестве люминесцентных зондов и метчиков в медицине, биологии и т.д. Обычно красители используют в виде жидких и твердых растворов в различных органических и неорганических растворителях. Существенной особенностью конденсированных сред является то, что молекулы растворенного вещества в них находятся в окружении других молекул и взаимодействуют с ними, причем эти взаимодействия существенно изменяются в зависимости от природы органического растворителя, рН водной среды, концентрации раствора, температуры, воздействия света и других внешних факторов. Имеющиеся литературные данные по исследованию межмолекулярного взаимодействия (ММВ) и фотопревращений в растворах стироловых красителей не позволяют установить общие закономерности процессов, происходящих в растворах этих соединений. Поэтому подробные спектральные исследования ММВ и фотохимических процессов стироловых красителей с закономерно изменяющейся структурой в растворителях различной природы представляет большой научный и практический интерес, прежде всего для целенаправленного синтеза новых органических люминофоров с заданными спектрально-люминесцентными и фотохимическими свойствами.

**Степень изученности проблемы.** Анализ литературных данных показывает, что имеется мало работ, посвященных изучению влияния концентрации, природы органического растворителя и светового облучения на спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства стироловых красителей. Отсутствуют работы посвященные процессам ММВ молекул-мономеров и молекул-гомодимеров (химически связанных между собой мономеров) в растворителях различной природы. Кроме того, квантово-химические исследования электронного строения и природы электронных переходов для молекул-мономеров стироловых красителей малочисленны, а для молекул-гомодимеров отсутствуют вообще. В настоящее время синтезирован ряд новых красителей этого класса, которые являются гомодимерами. Спектрально-люминесцентные и фотохимические характеристики молекул этих красителей, в растворителях различной природы еще не изучены. Все это определило цели и задачи настоящей диссертационной работы.

### **Связь диссертационной работы с тематическими планами НИР.**

Данная диссертационная работа выполнена по открытому плану НИР Самаркандского государственного университета им.А.Навои. Часть результатов получена при выполнении научно-исследовательского проекта по теме: «Разработка безопасных фотохимических двухфотонно-возбуждаемых флуоресцентных зондов для обнаружения и создания изображения биологических объектов» (грант U3104ц, 01.02.2005-31.01.2008), которая

финансировалась Украинским научно-технологическим центром, и проводилась в лаборатории молекулярной люминесценции СамГУ.

**Цель исследования.** Исследование влияния концентрации, природы растворителя и светового облучения на спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства новых синтезированных<sup>1</sup> гомодимеров стироловых красителей; с применением квантово-химических расчетов для молекул этих красителей находящихся в мономерном состоянии определение: максимумов спектров электронного поглощения, пространственной структуры, теплоты образования, электронной энергии, дипольных моментов и распределения зарядов на атомах, как в основном, так и в возбужденном состояниях; разработка рекомендаций по практическому применению полученных результатов.

**Задачи исследования.** Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Спектрально-люминесцентным методом изучить: влияние концентрации, природы растворителя и светового облучения на спектрально-люминесцентные характеристики гомодимеров стироловых красителей.

2. С применением квантово-химических расчетов для молекул гомодимеров стироловых красителей находящихся в мономерном состоянии определить: максимумы спектров электронного поглощения, пространственную структуру, теплоту образования, электронную энергию молекул, дипольный момент и распределения зарядов на атомах, как в основном, так и в возбужденном состояниях.

3. Разработать рекомендации по практическому использованию полученных результатов в различных областях науки и техники.

**Объект и предмет исследования.** 9 новых стироловых и 2 известных цианиновых красителей. Предметом исследования являлось установление основных спектрально-люминесцентных и фотохимических характеристик стироловых красителей в растворителях различной природы: протонодонорный (ПДР) – этанол, хлороформ, протоноакцепторный (ПАР) – диоксан, амфотерный – диметилформаид (ДМФ), а также максимумы спектров электронного поглощения, пространственной структуры, теплоты образования, электронную энергию молекул, дипольных моментов и распределения зарядов на атомах, как в основном, так и в возбужденном состояниях.

**Методы исследований.** Спектрально-люминесцентный: исследования по электронным спектрам поглощения и флуоресценции. Квантово-химический: полуэмпирический метод AM1 (Austin model 1).

**Основные положения, выносимые на защиту.**

1. Экспериментальные данные измерения спектров поглощения и флуоресценции, новых стироловых красителей, а также определения их основных спектрально-люминесцентных характеристик: коэффициент экстинкции ( $\epsilon$ ), сила осциллятора ( $f_e$ ), радиационное время жизни

---

<sup>1</sup> Автор выражает благодарность д.х.н. С.Н.Ярмолюку из Института молекулярной биологии и генетики НАН Украины за предоставленные соединения.

возбужденного состояния ( $\tau$ ), частота чисто электронного перехода ( $\nu_{0-0}$ ) и величина Стоксового сдвига (SS).

2. Данные квантово-химических расчетов спектров электронного поглощения, пространственной структуры, теплоты образования, электронной энергии, дипольных моментов и распределения зарядов на атомах, как в основном, так и в возбужденном состояниях для новых стироловых красителей.

3. Данные по влиянию концентрации, природы растворителя и светового облучения на спектрально-люминесцентные характеристики новых стироловых красителей.

4. Рекомендации по применению изученных красителей в различных областях науки и техники.

#### **Научная новизна.**

1. Впервые изучено влияние концентрации, природы растворителя на спектрально-люминесцентные характеристики новых стироловых красителей. Определены коэффициенты экстинкции ( $\epsilon$ ), силы осцилляторов ( $f_e$ ), радиационное время жизни возбужденного состояния ( $\tau$ ), частоты чисто электронных переходов ( $\nu_{0-0}$ ) и величина Стоксового сдвига (SS).

2. Впервые обнаружено, что с увеличением концентрации красителей Суан 40 и ТО в воде и в бинарной смеси хлороформ+гексан образуется люминесцирующие ассоциаты из нелюминесцирующих мономерных молекул. При этом в отличие от известных люминесцирующих ассоциатов полоса поглощения ассоциированных молекул расположена с коротковолновой, а флуоресценции с длинноволновой стороны по отношению соответствующих полос мономерных молекул. Установлено, что наблюдается одинаковые явления, как при увеличении концентрации раствора при постоянной бинарной смеси и возрастании содержания неполярной компоненты в бинарном растворителе при постоянной концентрации красителя.

3. Впервые с применением квантово-химических расчетов для молекул изученных красителей определены: максимумы спектров электронного поглощения, пространственная структура, теплота образования, электронная энергия, дипольный момент и распределение зарядов на атомах, как в основном, так и в возбужденных состояниях.

4. Впервые была изучена фотостабильность растворов новых стироловых красителей в зависимости от концентрации раствора и природы растворителя.

**Научная и практическая значимость результатов исследования.** Полученные результаты могут быть использованы, прежде всего, для квантовой электроники, где в качестве рабочего вещества можно использовать растворы люминесцирующих ассоциатов, а также для дальнейшего развития теории межмолекулярных взаимодействий. Установленные спектрально-люминесцентные закономерности позволяют целенаправленно синтезировать новые перспективные стироловые красители с заданными спектрально-люминесцентными и фотохимическими характеристиками для различных областей науки и техники.

**Реализация результатов.** Полученные результаты диссертации могут быть использованы в ГОИ им.С.И.Вавилова (Санкт-Петербург), в Институте

химической физики РАН, в Институтах физики НАН Белоруссии и Украины, в ГНУ НТК «Институт монокристаллов» НАН Украины, в Минском, Московском, Самаркандском, Санкт-Петербургском госуниверситетах, в Национальных университетах Белоруссии, Таджикистана, Узбекистана, Украины и других организациях, ведущих исследования в области молекулярной спектроскопии, квантовой электроники и занимающихся синтезом и применением новых органолюминофоров.

**Апробация работы.** Результаты исследования были доложены: на III Международной конференции по молекулярной спектроскопии (29-31 мая 2006г., Самарканд); международной конференции «Modern Physical Chemistry for Advanced Materials» (26-30 июня, 2007г., Харьков, Украина); XVIII международной школе-семинаре «Спектроскопия молекул и кристаллов» (20-27 сентября 2007г., Береговое, Крым, Украина); республиканской научно-практической конференции «Проблемы интенсификации интеграции науки и производства» (20-22 ноября 2007г., Бухара); международной конференции «Physics of Liquid matter: Modern problems» (23-26 мая 2008г., Киев, Украина); VII международной конференции «Liquid Matter» (27 июня - 1 июля 2008г., Лунд, Швеция); международной конференции «SPIE: Optics+Photonics» (10-14 августа 2008г., Сан-Диего, Калифорния, США); республиканской конференции «Табийи фанларнинг долзарб муаммолари» (14-15 сентябрь 2008й., Самарканд); международной научно-технической конференции «Истиқлол» «Современная техника и технология горно-металлургической отрасли и пути их развития» (29-30 сентября 2008г., Навои); IV республиканской научно-теоретической конференции «Ҳозирги замон физикасининг долзарб муаммолари» (7-8-ноябрь 2008й., Термез); V Международной научно-технической школе-конференции, «Молодые ученые - науке, технологиям и профессиональному образованию» (10-13 ноября 2008г., Москва); республиканской научно-практической конференции «Стратегия и развитие науки и технологии в XXI веке» (14-15 мая 2009г., Бухара); республиканской научно-практической конференции молодых ученых и одаренных студентов «Физика фанининг бугунги ривожиди истеъдодли ёшларнинг ўрни» (17-18 апреля 2009г., Ташкент); республиканской конференции «Современная физика и ее перспективы» (12-13 ноября 2009г., Ташкент); международной конференции «SPIE: Photonics West BIOS» (23-28 января 2010г., Сан-Диего, Калифорния, США); школе-семинаре для одаренных студентов и молодых ученых «Актуальные проблемы современной физики» (28-29 мая, 2010г., Самарканд); международной научно-практической конференции «Прикладные проблемы оптики, информатики, радиофизики и физики конденсированного состояния» (28 февраля 2011г., Минск) и на ежегодных конференциях профессорско-преподавательского состава СамГУ 2007-2011гг.

**Опубликованность результатов.** Основные результаты диссертации изложены в 20 научных работах, в том числе: 5 статьях опубликованных в научных журналах, 8 в материалах и 7 в виде тезисов-докладов международных и республиканских конференций, список которых приведен в конце автореферата.

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка цитированной литературы. Она изложена на 109 страницах машинописного текста, включает 27 рисунков, 7 таблиц и библиографию из 135 названий.

## 2. ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

**Во введении** обоснована актуальность работы, степень изученности проблемы, сформулированы цели и задачи диссертационной работы, приведены основные положения, выносимые на защиту, указана научная новизна и практическая ценность полученных результатов.

**В первой главе** приведен краткий литературный обзор по спектроскопическому исследованию процессов ММВ, квантово-химическому расчету различных параметров и влиянию светового облучения на спектрально-люминесцентные характеристики молекул органических красителей и родственных им соединений в растворах.

**Во второй главе** описаны экспериментальные установки, использованные в работе. Обосновывается выбор объектов исследования, приводятся структурные формулы (таблица 1), названия новых стирлиловых, известных цианиновых красителей и некоторые физические параметры использованных растворителей. Изложена методика приготовления растворов, а также методика обработки экспериментальных результатов, расчета спектрально-люминесцентных характеристик. Обоснован выбор метода квантово-химических расчетов и методики их проведения.

**В третьей главе** диссертации приведены результаты исследования по влиянию концентрации раствора и природы растворителя на процессы ММВ и его спектроскопического проявления в растворах, а также квантово-химического моделирования полуэмпирическим методом AM1, стирлиловых красителей с одним и двумя связанными хромофорами. Квантово-химическое моделирование позволило определить некоторые характеристики, экспериментальное определение которых затруднительно – распределение зарядов, электронная энергия, дипольный момент перехода. Полученные результаты приведены в таблице 1 и 2. Установлено, что у большинства изученных соединений дипольные моменты и электронная энергия в возбужденном состоянии больше, чем в основном (таблица 2). Показано, что рассчитанные максимумы спектров электронного поглощения удовлетворительно согласуются с полученными экспериментальными данными, для соответствующих красителей. Установлено, что для красителей F, S-33, Dst-5, Dst-10, D-184, S-44, S-49, Cyan 40 и TO в интервале концентраций  $10^{-6}$ - $10^{-5}$ М в воде спектры поглощения и флуоресценции остаются постоянными, и они относятся к мономерной форме красителей. На основе экспериментальных данных для изученных красителей находящихся в мономерной форме, определены основные спектрально-люминесцентные характеристики: коэффициент экстинкции ( $\epsilon$ ), сила осциллятора ( $f_e$ ),



**Таблица 2. Параметры изученных красителей, рассчитанные методом AM1**

Краситель	Основное состояние			Возбужденное состояние		
	Дипольный момент (D)	Электронная энергия (эВ)	Теплота образования (Ккал)	Дипольный момент (D)	Электронная энергия (эВ)	Теплота образования (Ккал)
<b>F</b>	10.343	-17370	221.14	8.414	-17359	260.89
<b>S-33</b>	28.171	-29518	409.25	44.774	-29492	448.74
<b>Dst-5</b>	0.006	-48001	465.64	14.882	-48011	503.25
<b>Dst-10</b>	0.029	-58593	408.90	2.119	-58561	471.25
<b>Tol-3</b>	0.004	-64030	394.26	7.933	-64099	475.78
<b>S-13</b>	1.704	-77414	454.96	20.532	-77044	509.39
<b>D-184</b>	0.454	-71804	992.17	29.733	-71691	1011.44
<b>S-44</b>	3.842	-29727	216.26	19.396	-29740	255.37
<b>S-49</b>	9.296	-40592	258.27	9.690	-40525	246.75
<b>Cyan</b>	5.656	-3028	454.83	5.780	-21252	444.56
<b>TO</b>	4.324	-23984	458.45	16.649	-24223	557.89

**Таблица 3. Спектрально-люминесцентные характеристики изученных стирловых красителей в воде ( $c=10^{-5}$  M).**

Краситель	$\lambda_{\text{погл. макс.}}$ , (нм)	$\lambda_{\text{фл. макс.}}$ , (нм)	$\epsilon$ , (л×моль <sup>-1</sup> ×см <sup>-1</sup> )	$f_e$	$\tau$ , (нс)	$\nu_{0-0}$ , (см <sup>-1</sup> )	SS, (см <sup>-1</sup> )
<b>F</b>	448	604	29000	0.85	3.8	19190	5765
<b>S-33</b>	461	615	29400	0.78	4.7	18420	5431
<b>Dst-5</b>	460	613	8000	0.20	0.2	18180	5425
<b>Dst-10</b>	460	610	31500	0.62	5.5	18170	5345
<b>TOL-3</b>	462	607	2000	0.10	0.5	18760	5170
<b>S-13</b>	534	572	2200	0.05	0.8	17600	1244
<b>D-184</b>	475	621	46200	0.92	2.9	17700	4949
<b>S-44</b>	490	579	10300	0.19	0.2	18800	3137
<b>S-49</b>	487	574	15300	0.25	1.5	18800	3112
<b>Cyan 40</b>	435	-	58600	0.95	3.3	-	-
<b>TO</b>	502	545	59000	0.99	4.2	18870	1571

радиационное время жизни возбужденного состояния ( $\tau$ ), частота чисто электронного перехода ( $\nu_{0-0}$ ) и величина Стоксова сдвига (SS) (таблица 3).

С целью изучения влияния природы растворителя на спектрально-люминесцентные характеристики стирловых красителей были исследованы растворы при постоянной концентрации красителя в бинарной смеси: вода+ПДР (этанол), вода+ПАР (диоксан) и вода+амфотерный растворитель (ДМФ). Для исключения процессов агрегации молекул красителей была выбрана концентрация  $c=10^{-5}$  M где молекулы исследуемых веществ находятся в мономерной форме.

Установлено, что в бинарных смесях: вода+этанол, вода+ДМФ и вода+диоксан положение максимумов полос поглощения для всех красителей смещены батохромно, а полосы флуоресценции гипсохромно (кроме смеси вода+ДМФ) относительно максимумов поглощения и флуоресценции их

водных растворов. Существенно отметить, что у красителей Dst-5, Dst-10 и D-184 при переходе от водного раствора к водно-диоксановому раствору в спектрах флуоресценции наблюдается увеличение интенсивности свечения на порядок по сравнению с теми же растворами для других красителей (рис.1).

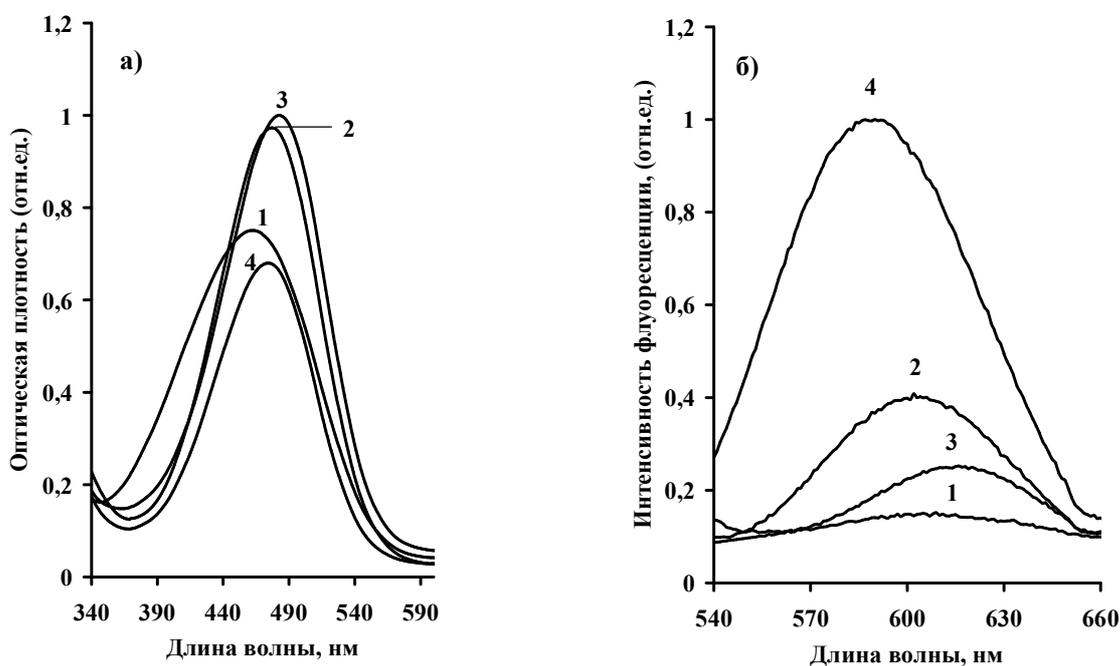


Рис.1.Спектры поглощения (а) и флуоресценции (б) водных растворов красителя Dst-10 ( $c=10^{-5}$  М) по мере добавления различных растворителей: 1-водный раствор, 2-2%воды+98%этанола, 3-2%воды+98%ДМФ, 4-2%воды+98%диоксана.

Из рисунка 1 видно, что для растворов в бинарных растворителях 2%вода+98%этанол, 2%вода+98%ДМФ и 2%вода+98%диоксан наблюдается bathochromic смещение спектров поглощения на 27 нм, 22 нм, 13 нм соответственно по сравнению к водным растворам. При этом интенсивность спектров поглощения незначительно увеличивается, а форма сужается по сравнению со спектром поглощения водного раствора. В спектрах флуоресценции интенсивность свечения растворов возрастает в 8-76 раз, форма уширяется и гипсохромно смещается для растворов 2%вода+98%этанол и 2%вода+98%диоксан на 8 нм и 10 нм соответственно, а для раствора 2%вода+98%ДМФ на 6 нм в длинноволновую сторону. Аналогичная картина в спектрах поглощения и флуоресценции наблюдается при переходе от водного раствора к растворам с бинарными растворителями и для остальных изученных красителей. Наблюдаемые явления в спектрах поглощения и флуоресценции объясняется сольватохромией – изменением сольватных оболочек окружающих молекулы красителей, которая обусловлена взаимодействиями молекул красителей с молекулами растворителя. Полученные экспериментальные данные по спектрально-люминесцентным характеристикам, а также результатам квантово-химических расчетов приведенных в таблицах 1-3 служат основными паспортными данными для новых изученных красителей и могут

быть использованы при применении этих красителей, для решения конкретных научно-прикладных задач.

Изучение влияния концентрации на спектрально-люминесцентные характеристики красителей показало, что их по спектроскопическому проявлению можно делить на три группы. К первой группе относятся красители S-33, Dst-10, D-184, S-44 и S-49. Для красителей этой группы по мере увеличения концентрации характерно: падение поглотительной и флуоресцентной способности при этом форма и положение электронных спектров остаются постоянными, то есть наблюдается концентрационное тушение люминесценции (КТЛ) (рис.2).

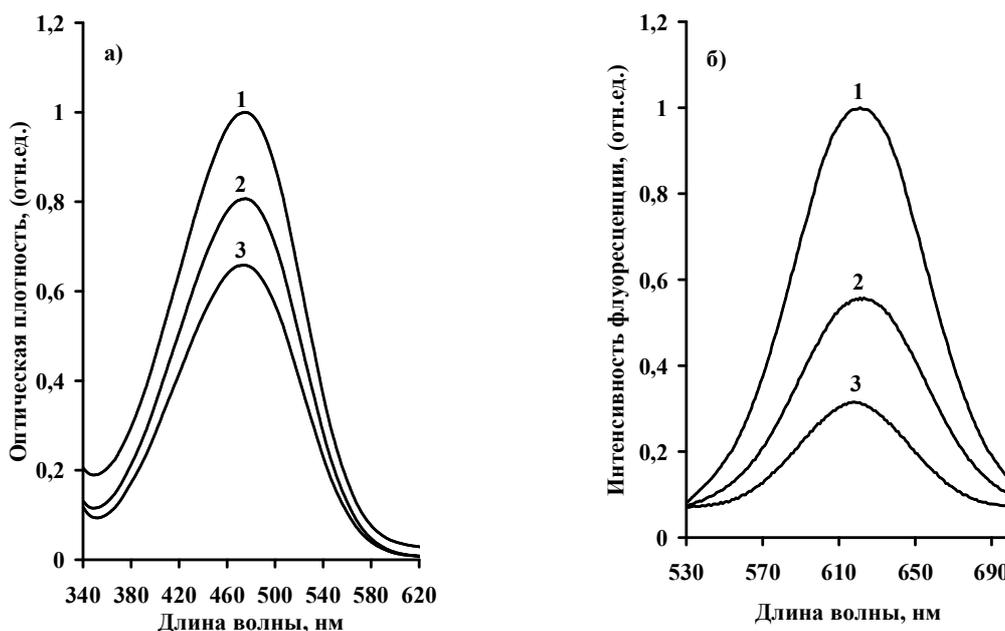


Рис.2. Концентрационная зависимость спектров поглощения (а) и флуоресценции (б) красителя D-184 в воде: 1- $2 \times 10^{-5}$ , 2- $2 \times 10^{-4}$ , 3- $10^{-3}$ М.

Ко второй группе относятся красители Dst-5, Tol-3 и S-13 для которых по мере увеличения концентрации характерно: уширение формы спектра поглощения и падение поглотительной способности раствора. В спектрах флуоресценции наблюдаются новые полосы, расположенные со стороны длинных волн относительно полос флуоресценции мономерных молекул и увеличение интенсивности свечения (рис.3). Из рисунка 3 видно, что по мере увеличения концентрации красителя S-13 интенсивность поглощения с  $\lambda_{\text{макс}}=534$  нм уменьшается и уширяется. Спектр флуоресценции при концентрации  $6 \times 10^{-5}$ М состоит из двух налагающихся полос с  $\lambda_{\text{макс}}=540$  нм относящийся к свечению мономеров и  $\lambda_{\text{макс}}=573$  нм к свечению ассоциатов (рис.3б).

Аналогичные спектральные изменения происходит при увеличении концентрации в водных растворах красителей Dst-5 и Tol-3.

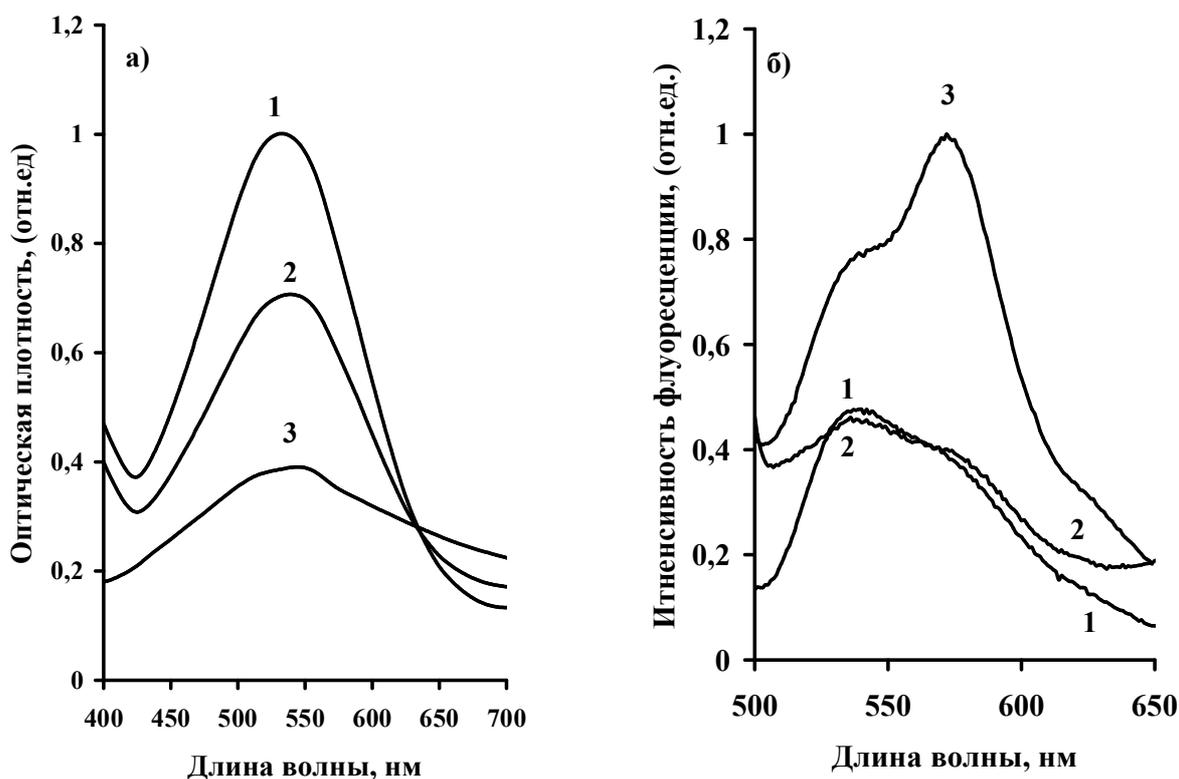


Рис.3. Концентрационная зависимость спектров поглощения (а) и флуоресценции (б) красителя S-13 в воде: 1- $6 \times 10^{-5}$ , 2- $10^{-4}$ , 3- $10^{-3}$ М.

К третьей группе относится красители Суан 40 и ТО. Изучение концентрационной зависимости электронных спектров красителей Суан 40, ТО в воде показало что: до концентрации  $c=5 \times 10^{-6}$ М и  $c=10^{-5}$ М соответственно, форма спектров поглощения остается постоянной, и она относится к мономерной форме красителей. В качестве примера на рисунке 4 приведены спектры поглощения красителя Суан 40 из которого, видно что для него при  $c=5 \times 10^{-6}$ М наблюдается полоса с  $\lambda_{\text{макс}}=435$  нм. Раствор красителя Суан 40 при комнатной температуре обладает слабой флуоресцентной способностью. При увеличении концентрации красителя Суан 40 происходит небольшое падение поглощательной способности раствора, спектр несколько уширяется (Рис.4а, кривые 1-3) и раствор становится люминесцирующим (Рис.4б, кривая 3). Дальнейшее увеличение концентрации приводит к усилению интенсивности свечения полосы с  $\lambda_{\text{макс}}=589$  нм (Рис.4б, кривые 4 и 5). Аналогичная картина наблюдается при увеличении концентрации красителя ТО в воде. При этом по отношению к полосе поглощения мономерных молекул с коротковолновой стороны появляется новая полоса поглощения с  $\lambda_{\text{макс}}=405$  нм. Наблюдаемое явление можно объяснить следующим образом: в разбавленных водных растворах молекулы красителя Суан 40 находятся в диссоциированной форме в виде катиона и аниона ( $K^+A^-$ ). В основном состоянии в молекулах изученных красителей порядки связей близки к полуторным. Поэтому повороты вокруг них затруднены и красители находятся в одной пространственно наиболее выгодной плоской трансконформации. При электронном возбуждении порядки связей в цепи существенно уменьшаются и приближаются к простым. Это в значительной степени облегчает вращения тетраметилпиридиновой части вокруг простых ординарных связей и поглощенная электронная энергия

расходуется на безызлучательную дезактивацию возбужденного состояния красителя, поэтому эти растворы практически не люминесцирует.

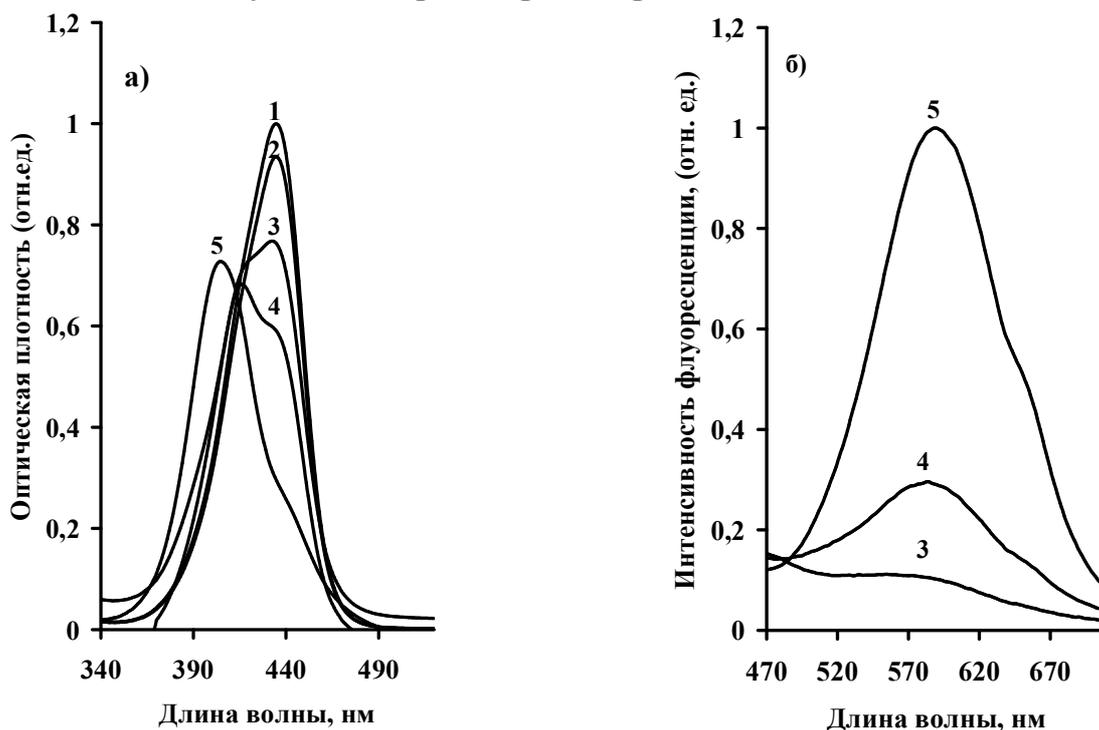


Рис.4 Концентрационная зависимость спектров поглощения (а) и флуоресценции (б) красителя Суан 40: 1- $5 \times 10^{-6}$ , 2- $10^{-5}$ , 3- $2 \times 10^{-5}$ , 4- $2 \times 10^{-4}$ , 5- $2 \times 10^{-3}$  М.

По мере увеличения концентрации раствора, молекулы растворенного вещества объединяются в ассоциат. Эти образывавшиеся ассоциаты обладают флуоресцентной способностью. Образование люминесцирующих ассоциатов из нелюминесцирующих мономерных молекул в литературе известно под названием полимеров Шайбе. Существенно отметить, что во всех этих случаях образовались люминесцирующие ассоциаты, полоса свечения которых резонансно совпадала с полосой поглощения ассоциированных молекул, новые полосы располагаются с длинноволновой стороны по отношению к полосе мономерных молекул и характеризуется значительно узкой шириной полос. Обнаруженные люминесцирующие ассоциаты на примере водных растворов красителей Суан 40 и ТО характеризуется другими спектральными изменениями, а именно: полоса поглощения люминесцирующих ассоциатов при комнатной температуре расположена с коротковолновой стороны, по отношению к полосе мономерных молекул, а полоса флуоресценции с длинноволновой стороны. Полосы поглощения и флуоресценции растворов красителей Суан 40 и ТО широкие и резонансно не совпадают между собой. Нами были зарегистрированы люминесцирующие ассоциаты красителей Суан 40 и ТО при комнатной температуре и в малополярных бинарных растворителях. В спектрах поглощения и флуоресценции наблюдаются одинаковые изменения как при увеличении концентрации красителя при постоянной бинарной смеси, так и при различном соотношении бинарного растворителя при постоянной концентрации раствора. Поэтому ограничимся рассмотрением одного из этих процессов. В качестве примера на рисунке 5 приведены изменения спектров поглощения хлороформовых растворов

красителя ТО ( $c=10^{-5}M$ ) при добавлении к ним различных количеств гексана. Растворы готовились так, что концентрация красителя оставалась постоянной, а соотношение бинарного растворителя менялось. Кривая 1 на рис. 5 характеризует полосы поглощения мономерных молекул этого красителя.

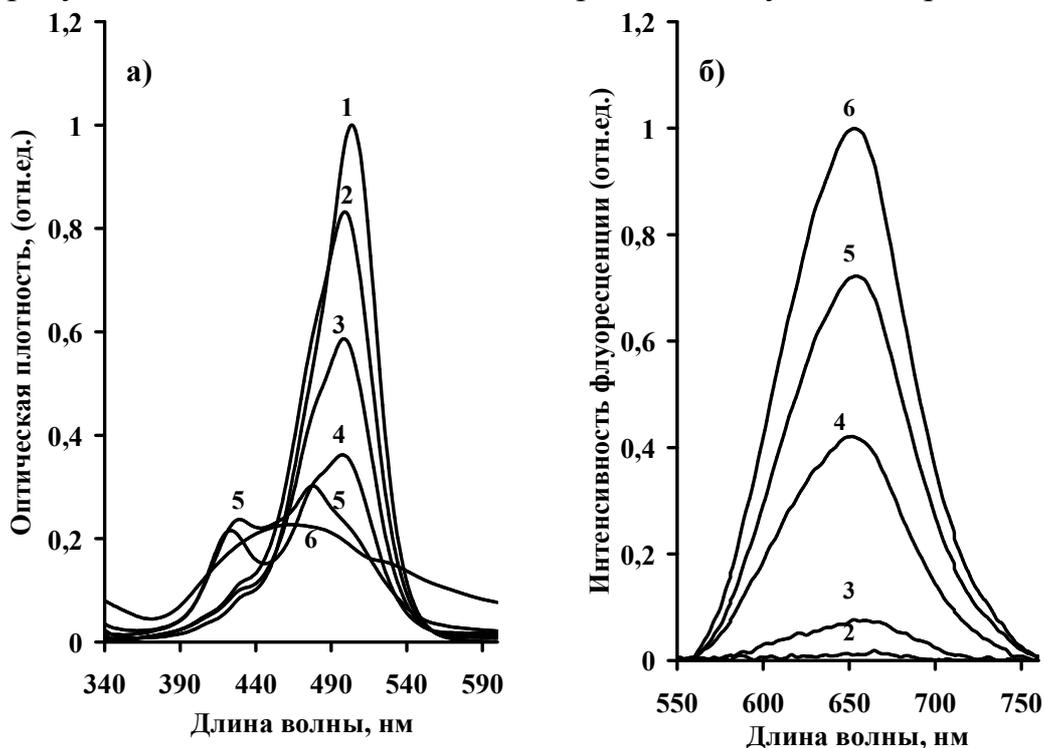


Рис. 5. Спектры поглощения (а) и флуоресценции (б) красителя ТО ( $c=10^{-5}M$ ) в хлороформе по мере добавления гексана: 1-0, 2-40%, 3-60%, 4-70, 5-80%, 6-96% гексана.

Как видно из рисунка 5 по мере добавления гексана сначала происходит падение интенсивности полосы поглощения ТО с  $\lambda_{\text{макс.}}=504$  нм (рис.5, кривая 2). При дальнейшем добавлении гексана наряду с уменьшением интенсивности полосы мономерных молекул сначала происходит ее небольшое уширение (рис.5, кривая 3), а затем возникает полоса поглощения с  $\lambda_{\text{макс.}}=428$  нм. Существенно отметить, что разбавленный раствор ТО ( $c=10^{-5}M$ ) в хлороформе обладает очень слабой флуоресцентной способностью. Интенсивность полосы флуоресценции с  $\lambda_{\text{макс.}}=653$  нм пропорционально возрастает по мере увеличения доли гексана в бинарном растворителе. Аналогичное явление происходит и для красителя Суап 40. Указанные изменения спектра поглощения связаны с образованием ассоциированных молекул ТО и Суап 40 об этом свидетельствуют появление коллоидных частиц в исследованных растворах по мере их стояния; причем их образование заметно ускоряется при увеличении концентрации раствора и при возрастании содержания неполярной компоненты в бинарном растворителе. Следует отметить, что максимум полосы флуоресценции красителей Суап 40 и ТО как в воде, так и в смеси хлороформ-гексан, почти совпадают между собой. Максимум спектра флуоресценции для красителя ТО в воде равен  $\lambda_{\text{макс.}}=648$  нм, а для красителя Суап 40 равен  $\lambda_{\text{макс.}}=589$  нм. В смеси хлороформ-гексан для красителя Суап 40 максимум флуоресценции равен  $\lambda_{\text{макс.}}=583$  нм, а для ТО равен  $\lambda_{\text{макс.}}=653$  нм.

Зарегистрированные новые полосы поглощения и флуоресценции, люминесцирующих ассоциатов красителей Суан 40 и ТО объяснены на основе экситонной теории Давыдова расщеплением электронных возбужденных уровней при агрегации молекул красителей.

В четвертой главе приведены результаты исследования влияния светового облучения<sup>2</sup> на спектрально-люминесцентные характеристики стироловых красителей в зависимости от природы растворителя. Показано, что по мере светового облучения водных растворов красителей F, S-33, Dst-5, Dst-10, S-13, Tol-3, D-184 и S-49 наблюдается падение интенсивности основной полосы поглощения и появление новой полосы со стороны коротких длин волн с  $\lambda_{\text{макс}}=350$  нм, которая усиливается с увеличением времени экспозиции (рис.6а). При этом заметных изменений в форме спектров флуоресценции не происходит и наблюдается уменьшение интенсивности свечения (рис. 6б). Аналогичные спектральные изменения происходят и при световом облучении растворов изученных красителей в бинарном растворителе вода+этанол, где новая полоса поглощения смещается гипсохромно на 5-10 нм, относительно полосы с  $\lambda_{\text{макс}}=350$  нм. При световом облучении в бинарных растворителях (2%вода+98%ДМФ и 2%вода+98%диоксана) происходит процесс обесцвечивания растворов красителей.

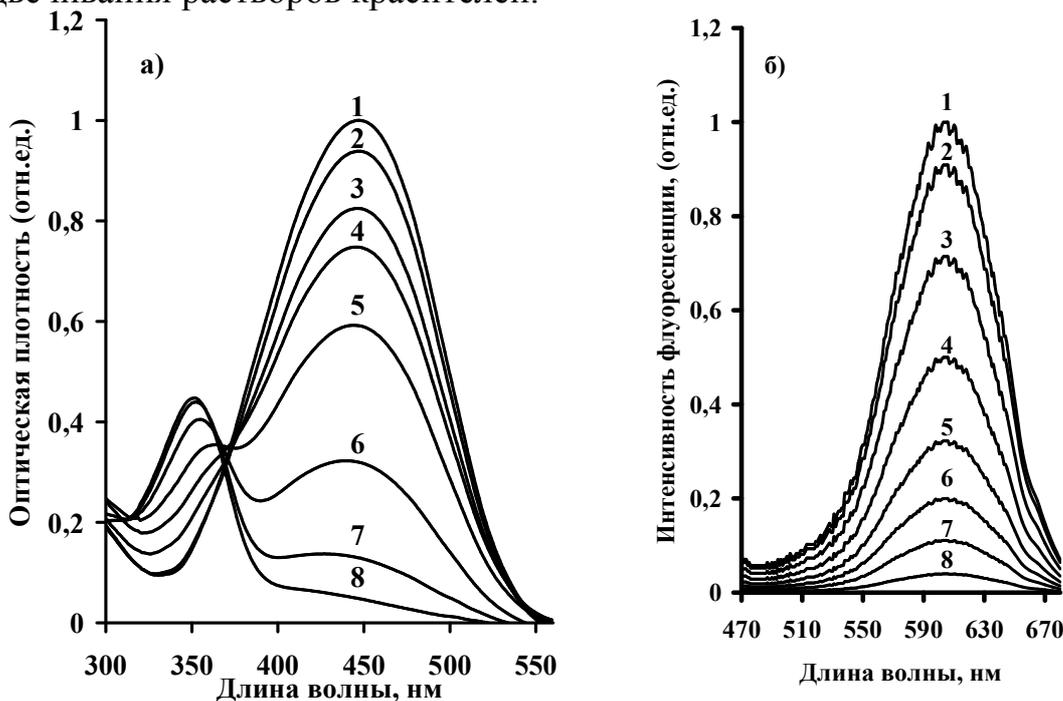


Рис.6. Спектры поглощения (а) и флуоресценции (б) красителя F в воде ( $c=5 \times 10^{-6} \text{M}$ ) по мере светового облучения:

1-0, 2-60, 3-300, 4-600, 5-1200, 6-2400, 7-4200, 8-6000 секунд.

При этом форма электронных спектров не изменяется, наблюдается падение поглощательной и флуоресцентной способности. Время экспозиции необходимое для полного фотообесцвечивания растворов зависит от природы растворителя и концентрации раствора. Так для бинарных растворителей:

<sup>2</sup> Облучение растворов проводилось нефилтрованным светом ртутно-кварцевой лампы ПРК-2, мощность которой составляла 60 мВт. Расстояние между лампой и объектом составляло 15 см. Облучаемая площадь кюветы (диафрагмы)  $15.2 \text{cm}^2$ .

2%вода+98%этанол, 2%вода+98%ДМФ, 2%вода+98%диоксан время необходимое для полного обесцвечивания раствора увеличивается в 2-8 раза по отношению к водным растворам (таблица 4). Как видно из таблицы 4 время необходимое для полного обесцвечивания водных растворов и растворов с бинарными растворителями для гомодимерных красителей Dst-5 и Dst-10 в 3-4 раза больше, чем для их красителя-аналога F при тех же условиях.

**Таблица 4. Влияние светового облучения на процесс фотообесцвечивания изученных красителей ( $c=10^{-5}$  М) (в секундах).**

Краситель	Вода	2%вода+98%этанол	2%вода+98%ДМФ	2%вода+98%диоксан
F	6000	5100	6300	8100
S-33	4200	6000	28800	8100
Dst-5	9600	18000	22800	12000
Dst-10	11400	19200	20400	14100
Tol-3	1800	12900	13200	3300
S-13	900	5400	6900	1500
D-184	5700	15100	13800	3300
S-44	2400	стабилен	3600	4500
S-49	2400	3000	300	3000
Сyan 40	1800	стабилен	3000	2700
ТО	2400	3600	4800	4200

Введение в структуру хромофора бензольного кольца (S-13) или метиленовой группы (Tol-3) наоборот приводит к уменьшению времени облучения. Следует отметить, что процесс фотообесцвечивания усиливается по мере разбавления раствора. Фотообесцвечивание изученных красителей является необратимым, то есть растворы не окрашиваются и соответственно спектры поглощения и флуоресценции со временем не восстанавливаются. Это означает, что при фотолизе происходит распад молекулы красителя на отдельные части. Природу процесса фотообесцвечивания изученных растворов, по-видимому, можно объяснить тем, что сначала под действием кванта света происходит фоторазложение молекул растворителя. Далее образовавшиеся радикалы взаимодействует с активной частью молекул красителя, при этом цепь сопряжения молекул красителя нарушается, что и приводит к деструкции красителя, т.е. обесцвечиванию раствора. Фотолиз водных и водно-этанольных растворов, можно представить в виде схемы:  $H_2O + h\nu \longrightarrow H + \dot{O}H$  для воды и  $C_2H_5OH + h\nu \longrightarrow C_2H_4 + H + \dot{O}H$  для этанола. Из приведенной схемы видно, что в обоих случаях при фотолизе образуются ОН группа и свободный атом водорода, который может присоединиться к диметиламинной группе хромофора красителей F, S-33, Dst-5, Dst-10, S-13, Tol-3, D-184 и S-49. Поэтому можно предположить, что наблюдаемая полоса с  $\lambda_{\text{макс}}=350$  нм, относится к протонированной форме красителей. Природу фоторазложения использованных органических растворителей можно представить в следующем

виде: в случае ДМФ:  $NCON(C H_3)_2 + h\nu \longrightarrow C H_3 + CH + CH_2O + \dot{N}H$ , в случае диоксана:  $C_2H_4OOC_2H_4 + h\nu \longrightarrow C_2H_4(CH_2O + CH) + \dot{O}H$ . Следует принимать во внимание, что диоксан является неустойчивым соединением и может легко образовывать перекиси, которые являются сильными окислителями:  $(CH_2)_4O_2 \longrightarrow (CH_2)_3 + O_2CHOH$ . Этим можно объяснить ускоренную кинетику обесцвечивания водно-диоксановых растворов изученных красителей по сравнению с другими бинарными растворителями (таблица 4). Из схемы фоторазложения ДМФ и диоксана видно, что здесь в отличие от водных и водно-этанольных растворов образование протонированной формы красителей не происходит, поэтому новых полос поглощения не наблюдается. Это подтверждает ранее предложенный механизм фотообесцвечивания водных и водно-этанольных растворов.

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Впервые изучены электронные спектры поглощения и флуоресценции 9 новых и 2 известных стирлиловых красителей в воде и в растворителях различной природы: ПДР – этанол, хлороформ, ПАР – диоксан, амфотерном – ДМФ, а также в бинарной смеси воды с этанолом, ДМФ, диоксаном и хлороформа с гексаном. На основе полученных экспериментальных данных для молекул, находящихся в мономерном состоянии, определены: коэффициент экстинкции ( $\epsilon$ ), сила осциллятора ( $f_e$ ), радиационное время жизни возбужденного состояния ( $\tau$ ), частота чисто электронного перехода ( $\nu_{0-0}$ ) и величина Стоксового сдвига (SS).

2. С применением квантово-химических расчетов для молекул изученных красителей находящихся в мономерном состоянии рассчитаны и определены: пространственная структура, теплота образования, электронная энергия, дипольный момент и распределения зарядов на атомах, как для основного, так и для возбужденного состояния. Рассчитанные максимумы спектров электронного поглощения удовлетворительно согласуются с полученными экспериментальными данными, для соответствующих красителей.

3. Установлено, что при переходе от водных растворов стирлиловых красителей к растворам в бинарных растворителях: вода+этанол, вода+ДМФ, вода+диоксан в спектрах поглощения наблюдается батохромное смещение полос, а в спектрах флуоресценции гипсохромное, кроме смеси бинарного растворителя вода+ДМФ, спектры флуоресценции которого смещены батохромно. Наблюдаемые спектральные изменения объяснены образованием различных сольватных оболочек молекул красителей.

4. Обнаружено, что по мере увеличения концентрации красителей Dst-5 Tol-3, S-13 в водном растворе образуются люминесцирующие ассоциаты, полосы свечения, которых расположены со стороны больших длин волн, по отношению к полосе мономерных молекул, а форма спектров поглощения уширяется и наблюдается падение поглощательной способности раствора. При этих же условиях у красителей S-33, Dst-10, D-184, S-44 и S-49 образуются

нелюминесцирующие ассоциаты, которые приводят к КТЛ.

**5.** Впервые обнаружено, что с увеличением концентрации красителей Суан 40 и ТО в воде образуется люминесцирующие ассоциаты из нелюминесцирующих мономерных молекул. При этом полоса поглощения ассоциированных молекул расположена с коротковолновой, а флуоресценции с длинноволновой стороны по отношению соответствующих полос мономерных молекул.

**6.** Зарегистрированы люминесцирующие ассоциаты красителей Суан 40 и ТО в бинарной смеси хлороформ+гексан. Установлено, что наблюдается одинаковые явления, как при увеличении концентрации красителя при постоянной бинарной смеси растворителя, так и при различном соотношении бинарного растворителя при постоянной концентрации красителя. Существенно отметить, что при образовании люминесцирующих ассоциатов в бинарных растворителях наблюдается аналогичные спектральные изменения, как и в случае с образованием люминесцирующих ассоциатов этих красителей в воде.

**7.** Наблюдаемые спектральные изменения при образовании люминесцирующих ассоциатов красителей Суан 40 и ТО и других изученных красителях, как в воде, так и в бинарных растворителях объяснены на основе экситонной теории Давыдова расщеплением электронно-возбужденных уровней при агрегации молекул красителей.

**8.** Обнаружено что, по мере светового облучения водных и водно-этанольных растворов красителей F, S-33, Dst-5, Dst-10, S-13, Tol-3, D-184 и S-49, появляются новые полосы поглощения, расположенные со стороны коротких длин волн по отношению к основной полосе поглощения. При этом форма спектра флуоресценции не меняется, а происходит уменьшение интенсивности свечения. Показано, что описанное явление связано с образованием нелюминесцирующей протонированной формы молекул красителей.

**9.** Показано, что с увеличением длительности светового облучения и уменьшением концентрации растворов стирильных красителей процесс фотообесцвечивания усиливается. Обнаружено, что добавление этанола или ДМФ к водным растворам красителей F, S-33, Dst-5, Dst-10, S-13, Суан 40, ТО и Tol-3 приводит к замедлению процесса обесцвечивания, а для красителей D-184 и S-44 фотостабильность увеличивается в 8 раз. Установлено, что под действием кванта света сначала происходит диссоциация молекул растворителя. Далее образовавшиеся радикалы, взаимодействуют с молекулами красителя, которые приводят к их деструкции. Выявлены условия, при которых изученные красители могут быть более или менее фотостабильными.

**10.** Полученные сведения о спектрально-люминесцентных и фотохимических характеристиках изученных красителей являются их паспортными данными и могут быть применены для целенаправленного синтеза новых органических красителей с заданными спектрально-люминесцентными и фотохимическими свойствами. Обнаруженные люминесцирующие ассоциаты красителей Суан 40 и ТО могут найти применение в качестве рабочего вещества в перестраиваемых лазерах на красителях.

#### 4. СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Рахимов Ш.И., Исмаилов З.Ф., Османов С.А., Холов А.У., Ходжаев Г., Ярмолук С.М. Изучение взаимодействия стироловых красителей с бычьим сывороточным альбумином // “III международная конференция по молекулярной спектроскопии” Тез. докл. Межд. конф. – Самарканд, 2006. - С.87-88.
2. Rahimov Sh.I., Kryvorotenko D.V., Yarmoluk S.M., Yashchuk V.M., Losytskyy M.Yu., Kudrya V.Yu., Tokar V.P., Gusak V.V., Prokopets V.M., Kovalska V.B., Balanda A.O. The high-effective two-photon excited luminescent styryl dyes for imaging and detection of nucleic acids “III международная конференция по молекулярной спектроскопии” Тез. докл. Межд. конф. – Самарканд, 2006. -С. 91.
3. Rahimov Sh.I., Nizomov N.N., Ismailov Z.I., Kurtaliev E.N., Osmanov S.A., Khaydarova F.U., Garasevich S.G., Kholov A.U., Yashchuk V.N., Khodjaev G. The investigation of some distyryl dyes interaction with bovine serum albumin // “Modern Physical Chemistry for Advanced Materials” International conf. Book of abstracts. – Kharkiv-Ukraine, 2007. - P.298.
4. Rahimov Sh.I., Nizomov N., Ismailov Z.F., Nizamov Sh., Osmanov S.A., Kurtaliev E., Khodjayev G., Yashchuk V.N. Study of dependence between structure and affinity of styryl dyes to protein // «Spectroscopy of molecules and crystals»: 18<sup>th</sup> school-seminar. Book of Abstract. Beregove-Crimea-Ukraine. 2007. - P.208.
5. Рахимов Ш.И., Низомов Н., Исмаилов З.Ф., Низамов Ш.Н., Ходжаев Г., Курталиев Э.Н. Спектрально-люминесцентное исследование взаимодействия стироловых красителей с сывороточным альбумином // «Проблемы интенсификации интеграции науки и производства», Мат. респ. науч. практ. конф. - Бухара. 2007. - С.44.
6. Rahimov Sh.I., Nizomov N.N., Barakaeva M., Kurtaliev E.N., Nizamov Sh., Salakhitdinova M.K., Kholov A.U., Khodjaev G., Yashchuk V.N. Spectral-luminescent study of styryl dyes interaction with serum albumin // “Physics of Liquid matter: Modern problems”: 4<sup>th</sup> International conf., Book of abstracts. - Kyiv-Ukraine 2008. - P.197.
7. Rahimov Sh.I., Nizomov N., Nizamov Sh., Khodjayev G., Barakaeva M., Yashchuk V.N. The influence of solvent nature on spectral-luminescent characteristics of styryl dyes // “Liquid Matter”: 7<sup>th</sup> Inter. Conf., - Lund-Sweden. 2008. - P.PB:28.
8. Rahimov Sh., Nizomov N., Barakaeva M., Kurtaliev E.N., Khakimova D.P., Khodjayev G., Yashchuk V.N. Influence of styryl dyes on blood erythrocytes // Proceedings of the Inter. Conf. “SPIE: Optics+Photonics”: - San Diego, California-USA., 2008. - V. 7049.
9. Рахимов Ш.И., Курталиев Э.Н., Низамов Ш.Н., Баракаева М. Спектрально-люминесцентные характеристики стироловых красителей в растворителях различной природы. // «Табийий фанларнинг долзарб муаммолари» Респ. сборник мат. - Самарканд, 2008. - С.100-101.
10. Рахимов Ш.И., Курталиев Э.Н., Баракаева М., Низомов Н., Ящук В.Н. Спектрально-люминесцентные характеристики гомодимеров стироловых красителей в растворителях различной природы // «Современная техника и

технология горно-металлургической отрасли и пути их развития», Мат. междунауч. техн. конф. «Истиқлол» - Навои, 2008. - С.112-113.

11. Курталиев Э.Н., Рахимов Ш.И., Низомов Н. Влияние природы растворителя и светового облучения на спектрально-люминесцентные характеристики стироловых красителей // «Ҳозирги замон физикасининг долзарб муаммолари» IV-Республика илмий-назарий конференцияси. - Термез, 2008. - С.84-85.

12. Курталиев Э.Н., Рахимов Ш.И., Низомов Н. Влияние природы растворителя на спектрально-люминесцентные характеристики тиозолового оранжевого и Суан 40 // “Молодые ученые-науке, технологиям и профессиональному образованию” Мат. междунауч. техн. школы-конф. - Москва, 2008. - С.46-49.

13. Курталиев Э.Н., Рахимов Ш.И., Низомов Н. Влияние природы растворителя на фотостабильность гомодимеров стироловых красителей. // “Современная физика и ее перспективы” Мат. респ. конф. - Ташкент, 2009. - С. 52-54.

14. Курталиев Э.Н., Рахимов Ш.И. Влияние природы растворителя на фотостабильность тиозолового оранжевого и Суан 40. // «Физика фанининг бугунги ривожиди истеъдодли ёшларнинг ўрни» Республика ёш олимлар ва иқтидорли талабаларнинг илмий-амалий анжумани материаллари. - Ташкент, 2009. - С.156-159.

15. Курталиев Э.Н., Рахимов Ш.И., Низомов Н. Влияние природы растворителя на спектрально-люминесцентные характеристики стироловых красителей. // Доклады Академии наук РУз - Ташкент, 2009, №1, - С.50-53.

16. Рахимов Ш.И. Влияние природы растворителя на спектрально-люминесцентные характеристики и фотостабильность красителей S-44 и S-49 // СамДУ илмий тадқиқотлар ахборотномаси, 2009, №1, С. 28-32.

17. Nizomov N.N., Rahimov Sh.I., Khodjaev G., Khakimova D.P. The spectroscopic manifestation of the interaction some cyanine dyes with BSA and DNA // Proceedings of the Inter. Conf. “SPIE: Photonics West BIOS”. San Diego, California-USA. 2010. - V.7571.

18. Рахимов Ш.И. Спектрально-люминесцентные и фотохимические характеристики стирилцианинового красителя F и его некоторых производных. // «Актуальные проблемы современной физики», Мат. школы-семинара для одаренных студентов и молодых ученых. - Самарканд. 2010. - С.158-163.

19. E.N.Kurtaliev, N.Nizomov, Sh.I. Rahimov. The spectral-luminescent and photochemical characteristics of several styrylcyanine dyes in solution // Journal of Molecular liquids. 2011. V.158. №1, P.43-49.

20. Низомов Н., Курталиев Э.Н., Рахимов Ш.И. Спектрально-люминесцентное изучение взаимодействия некоторых стироловых красителей с бычьим сывороточным альбумином // «Прикладные проблемы оптики, информатики, радиофизики и физики конденсированного состояния». Мат. междунауч. науч. практ. конф., - Минск-Белоруссия, 2011г. - С.55-56.

## РЕЗЮМЕ

диссертации Рахимова Шерзода Исмоиловича на тему:

### **«Спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства гомодимеров стироловых красителей и родственных соединений в растворах»**

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
по специальности 01.04.05 - Оптика

**Ключевые слова:** спектры поглощения и флуоресценции, стироловые красители, световое облучение, квантово-химический расчёт.

**Объекты исследования:** 9 новых стироловых красителей и 2 известных цианиновых красителя.

**Цель работы:** Исследование влияния концентрации, природы растворителя и светового облучения на спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства новых синтезированных гомодимеров стироловых красителей; с применением квантово-химических расчетов для молекул этих красителей находящихся в мономерном состоянии определение: максимумов спектров электронного поглощения, пространственной структуры, теплоты образования, электронной энергии, дипольных моментов и распределения зарядов на атомах, как в основном, так и в возбужденном состояниях; разработка рекомендаций по практическому применению полученных результатов.

**Методы исследования:** Спектрально-люминесцентные методы исследования: по электронным спектрам поглощения и флуоресценции; квантово-химический: полуэмпирический метод AM1.

**Полученные результаты и их новизна:** Определены спектрально-люминесцентные характеристики новых стироловых красителей в растворителях различной природы и их изменения в зависимости от концентрации раствора и под действием светового облучения. Обнаружено новый вид люминесцирующих ассоциатов красителей Суан 40 и ТО в воде и в малополярном бинарном растворителе. Квантово-химическим методом для изученных красителей определены: максимумы спектров электронного поглощения, пространственная структура, теплота образования, электронная энергия, распределение зарядов и дипольный момент как в основном так и в возбужденном состояниях.

**Практическая значимость:** Даны рекомендации по практическому использованию полученных результатов в различных областях науки и техники, в частности обнаруженные люминесцирующие ассоциаты красителей Суан 40 и ТО могут найти применение в качестве рабочего вещества в перестраиваемых лазерах на красителях. Полученные сведения о спектрально-люминесцентных и фотохимических характеристиках, а также результаты квантово-химических расчетов являются паспортными данными для новых стироловых красителей и дают ценные сведения для целенаправленного синтеза новых органических люминофоров с заданными спектрально-люминесцентными свойствами.

**Степень внедрения и экономическая эффективность:** научные статьи, тезисы докладов на конференциях и симпозиумах, курсы лекций и практические занятия для бакалавров и магистров.

**Область применения:** Квантовая электроника, синтез и применение новых органических люминофоров.

Физика-математика фанлари номзоди илмий даражасига талабгор  
Рахимов Шерзод Исмоиловичнинг 01.04.05 - Оптика ихтисослиги бўйича  
«Гомодимер стирил ва унга турдош бўлган бўёқларнинг эритмалардаги  
спектрал-люминесцент ва фотохимё хоссалари»

мавзусидаги диссертациясининг

### РЕЗЮМЕСИ

**Таянч сўзлар:** ютилиш ва флуоресценция спектрлари, стирил бўёқлар, фото нурланиш, кванто-химик ҳисоблашлар.

**Тадқиқот объектлари:** 9 та янги стирил бўёқлари ва 2 та маълум цианин бўёқлари.

**Ишнинг мақсади:** янги синтез қилинган гомодимер стирил бўёқларнинг спектрал-люминесцент ва фотохимё хусусиятларига эритма концентрацияси, эритувчи табиатини ҳамда ёруғлик таъсирини ўрганиш; Бўёқ молекулаларининг мономер ҳолати учун кванто-химик ҳисоблашлар ёрдамида қуйидаги асосий параметрларини аниқлаш: ютилиш спектрининг максимумлари, уйғонган ҳамда асосий ҳолатлар учун фазодаги структураси, ҳосил бўлиш иссиқлиги, электроннинг энергияси, зарядлар тақсимоти ва дипол моменти; олинган натижалар бўйича амалиётда тадбиқ қилиш учун тавсиялар ишлаб чиқиш.

**Тадқиқот усуллари:** Спектрал-люминесцент: электрон ютилиш ва флуоресценция спектрлари ёрдамида, кванто-химик: АМ1 полуэмпирик усули.

**Олинган натижалар ва уларнинг янгилиги:** Янги стирил бўёқларнинг эритмалардаги спектрал-люминесцент хоссалари ва уларга эритма концентрацияси, эритувчи табиати ҳамда ёруғлик таъсири аниқланди. Суан 40 ва ТО бўёқларнинг сувда ҳамда кичик кутбли бинар эритувчида янги типдаги люминесценция берувчи ассоциатлар ҳосил бўлиши биринчи мартаба аниқланди. Кванто-химик ҳисоблашлар ёрдамида стирил бўёқлар учун: ютилиш спектрининг максимумлари, уйғонган ҳамда асосий ҳолатлар учун фазодаги структураси, ҳосил бўлиш иссиқлиги, электроннинг энергияси, зарядлар тақсимоти, дипол моменти аниқланди.

**Амалий аҳамияти:** Олинган натижалар фан ва техниканинг турли соҳаларида қўлланилиши учун тавсиялар берилди, жумладан, Суан 40 ва ТО бўёқларда кузатилган люминесценция берувчи ассоциатлар бўёқли лазерларда ишчи мода сифатида ишлатилиши мумкин. Спектрал-люминесцент ва фотохимё хоссалари ҳамда кванто-химик ҳисоблашлардан олинган натижалар: янги стирил бўёқлари учун паспорт маълумотлари ҳисобланади ва аниқ спектрал-люминесцент хоссаларга эга бўлган янги люминофорларни мақсадли синтез қилишда қимматли маълумотлар манбаи бўлиб ҳисобланади.

**Тадбиқ этиш даражаси ва иқтисодий самарадорлиги:** илмий мақолалар, конференция ва симпозиумларнинг маъруза тезислари, бакалавр ҳамда магистрлар учун маъруза ва амалий машғулотида.

**Қўлланиш соҳаси:** Квант электроникасида, янги органик люминофорларни синтез қилишда ва қўллашда.

## RESUME

Of the Sherzod Ismoilovich Rahimov's dissertation, submitted according to the requirements for the degree of Doctor of Philosophy in physical-mathematical sciences (specialty 01.04.05 – Optics). Subject: **«Spectral-luminescent and photochemical properties of the homodimer styryl dyes and related compounds in solutions»**

**Key words:** absorption and fluorescence spectra, styryl dyes, homogeneous aggregations, light irradiation, quantum chemical calculation.

**Subjects of research:** 9 new styryl dyes and 2 known cyanine dyes.

**Purpose of work:** Study on the effects of concentration, solvent's nature and the light irradiation on the spectral-luminescent and photochemical properties of the new synthesized homodimer styryl dyes; the determination of the spatial structure of dye molecules by quantum-chemical calculations; elaboration of recommendations for practical applications of obtained results.

**Methods of research:** Spectral-luminescent methods: electronic absorption and fluorescence spectra; quantum-chemical semi-empirical method AM1.

**The obtained results and their novelty:** Spectral-luminescent characteristics of the new styryl dyes in different kind solvents and their changes depending on the solution concentration and light irradiation were studied. A new kind of luminescent associates of Cyan-40 and TO dyes in water and weakly polar solvent was discovered. Using quantum-chemical methods for studied dye molecules the followings were determined: maxima of electronic absorption, spatial structure, heat of formation, electronic energy, charge distribution and dipole moment in ground and excited states.

**Practical value:** Recommendations on practical application of obtained results in various fields of science and technology were elaborated. In particular, discovered luminescent associates of Cyan-40 and TO dyes might be usable as working media in tunable dye lasers. Determined spectral-luminescent and photochemical properties and results of quantum-chemical calculations serve as the main characteristic data of the new styryl dyes. These are valuable information for targeted synthesis of a new organic luminophores with defined spectral-luminescent properties.

**Degree of embed and economic efficiency:** scientific articles, abstracts of papers at conferences and symposiums, lectures and practical lessons for bachelors and masters.

**Field of application:** Quantum Electronics, synthesis and application of new organic luminophores.

Соискатель

Босишга \_\_. \_\_.2012 йилда рухсат этилди.  
Қоғоз бичими 60x84 1/16. Буюртма №\_\_. Адади 100 нусха.

---

Самарқанд давлат университетининг кичик босмахонасида  
Компьютерда терилган нусхасидан чоп этилди.  
140104, Самарқанд ш., Университет хиёбони, 15.