

**В. В. Ю ден ков, А. В. Ю ден ков, Л. П. Р им с к я** (Смоленск, ФГОУ ВПО «Смоленская ГСХА»). **Определение параметров в уравнении Декстера для триплет-триплетного переноса энергии по обменно-резонансному механизму.**

Перенос энергии электронного возбуждения по триплетным уровням между органическими молекулами осуществляется по обменно-резонансному механизму. Формула плотности вероятности переноса для обменно-резонансного механизма была получена Декстером:

$$K(R) = \frac{2\pi}{h} Z^2 \int_{\Omega} F(\omega)\sigma(\omega) d\omega, \quad (1)$$

где  $Z$  — параметр;  $F(\omega)$  — нормированная функция, описывающая спектр излучения донора;  $\sigma(\omega)$  — нормированная функция, описывающая спектр излучения акцептора.

Определение параметра  $Z^2$  является актуальной научной задачей. Будем искать параметр  $Z^2$  в следующем виде:

$$Z^2 = \exp \left\{ -2 \frac{\varepsilon_i r}{\varepsilon r_0} \right\},$$

где  $\varepsilon$  — энергия кванта излучения, возбуждающего флуоресценцию донора;  $\varepsilon_i$  — энергия, характеризующая процесс обмена электронами между молекулами донора и акцептора;  $r_0$  — расстояние между молекулами донора и акцептора, при котором интенсивность флуоресценции донора уменьшилась в  $e$  раз.

Учитывая, что  $\varepsilon_i/\varepsilon = \lambda/\lambda_i$ , получим

$$K(R) = \frac{2\pi}{h} \exp \left\{ -2 \frac{\lambda r}{\lambda_i r_0} \right\} J \int_{\Omega} F(\omega)\sigma(\omega) d\omega. \quad (2)$$

Наибольшую сложность для расчета представляет параметр  $r_0$ . Для его определения в работе, представленной данным сообщением, предлагается использовать экспериментальную зависимость

$$\ln \frac{J_0}{J} = \alpha C_A, \quad (3)$$

где  $J_0$  — интенсивность флуоресценции донора в отсутствии акцептора;  $J$  — интенсивность флуоресценции донора в присутствии акцептора;  $C_A$  — концентрация молекулы акцептора в растворе;  $\alpha = V N_A$  ( $V$  — объем эффективной сферы тушения;  $N_A$  — число Авогадро).

Получен следующий результат.

Расстояние  $r_0$  между донором и акцептором линейно связано с математическим ожиданием расстояния между донором и акцептором ( $r_M$ ):  $r_M = 1,28 r_0$ .

В свою очередь,  $r_M$  рассчитывается, исходя из распределения Больцмана.

Результаты расчетов для системы антрацен-дифенилфуран-н-октан при концентрации донора  $C_d = 10^{-3}$  м/с приведены в таблице.

| Область возбуждения донора $\lambda$ (нм) | $r_M$ (А°) | $r_0$ (А°) |
|---|------------|------------|
| 376                                       | 12,58      | 10,00      |
| 360                                       | 13,75      | 10,74      |
| 340                                       | 14,90      | 11,64      |
| 309                                       | 20,80      | 12,25      |