

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ :: 2018

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 05–09 лютого 2018 року)



Суми
Сумський державний університет
2018

Застосування теоретико-групового аналізу для дослідження флуоресценції поліметинових барвників

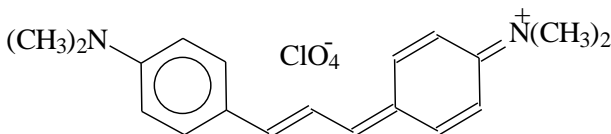
Шевченко Ю.О.¹, студент; Лопаткін Ю.М.¹, професор;

Кондратенко П.О.², професор

¹Сумський державний університет, м. Суми

²Національний авіаційний університет, м. Київ

Для виявлення природи флуоресценції барвника при переходах з вищих збуджених станів в дослідженнях енергетичної структури молекул використовувався теоретико-груповий аналіз. Катіони поліметинових барвників (ПМБ) в транс-конфігурації описуються групою симетрії C_{2v} .



Отримано дані щодо кількості та симетрії молекулярних орбіталей (МО) σ - і π - типу. Як впливає з результатів, в групі C_{2v} σ -МО і π -МО відносяться до різних уявлень.

Таблиця 1 – Дозволені за симетрією групи C_{2v} квантові переходи з поглинанням або випромінюванням світла

МО	$\sigma-A_1$	$\pi-A_2$	$\sigma-B_1$	$\pi-B_2$
$\sigma-A_1$	$y-A_1$	$-A_2$	$x-B_1$	$z-B_2$
$\pi-A_2$	$-A_2$	$y-A_1$	$z-B_2$	$x-B_1$
$\sigma-B_1$	$x-B_1$	$z-B_2$	$y-A_1$	$-A_2$
$\pi-B_2$	$z-B_2$	$x-B_1$	$-A_2$	$y-A_1$

Як впливає з табл.1, квантові переходи між двома π -МО завжди дозволені і поляризовані в площині молекули вздовж осі x або y . Аналогічно між двома σ -МО. А вже квантові переходи $\pi \leftrightarrow \sigma$ можуть бути поляризованими уздовж осі z , або заборонені по симетрії.

Звичайно, крім заборони квантових переходів за симетрією може існувати просторова заборона. Вона проявляється в тому випадку, коли МО, між якими розраховується квантовий перехід електрона, просторово розділені і не перекриваються.