

Кинетика бимолекулярного тушения флуоресценции в магнитном поле

Сидоров Сергей Сергеевич

Феськов Сергей Владимирович

Волгоградский государственный университет

Иванов Анатолий Иванович, д.ф.-м.н.

serge.sidorov.s@gmail.com

Перенос заряда, вызванный возбуждением импульсом света химических и биологических систем, является важным этапом естественного и искусственного фотосинтеза. Тем самым, солнечную энергию можно накапливать для дальнейшего использования. Высокая эффективность процесса фотосинтеза обусловлена быстрым и необратимым разделением зарядов в донорно-акцепторных парах. Для управления такими процессами необходимо знание детального микроскопического механизма разделения и рекомбинации зарядов в растворах.

Механизм выявляется в исследованиях кинетики населенностей реагентов и продуктов, формирующихся при фотовозбуждении доноров или акцепторов в жидких растворах. Первичная ионизация протекает при столкновении возбужденного донора (акцептора) с акцептором (донором) в растворе, в последующем ион-радикалы могут рекомбинировать в основное или возбужденное триплетное состояние. На процесс рекомбинации может оказывать влияние внешнее магнитное поле. Исследование влияния магнитного поля дает важную информацию о процессах разделения зарядов и их последующей рекомбинации.

Многие проблемы теории фотовозбуждения жидких растворов удалось разрешить с использованием дифференциальной теории столкновений. В основе этой теории лежит система дифференциальных уравнений для распределения геминальных пар в различных спиновых состояниях. Уравнение распределения геминальных пар имеет вид уравнений диффузии со стоками [1]:

$$\dot{n} = -W_i(r)n(r,t) + \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial n}{\partial r} \quad (1)$$

Это уравнение следует решать с отражающим граничным условием:

$$4\pi D r^2 \left. \frac{\partial n}{\partial r} \right|_{r=\sigma} = 0 \quad (2)$$

И начальным условием:

$$n(r, 0) = 1 \quad (3)$$

Моделирование производилось путем численного решения системы уравнений. Фитинг зависимостей населенности ионных и триплетных нейтральных состояний от времени проводился к экспериментальным данным, полученным недавно в Женевском университете для донорно-акцепторной пары 9,10 деметилантрацена (донор) фталонетрила (акцептор) в растворе ацетонитрила. Измерения проводились в отсутствие внешнего магнитного поля и при наличии насыщающего поля. Результаты фитинга для кинетики ионов и нейтральных триплетов в отсутствие поля представлены на *рис. 1*.

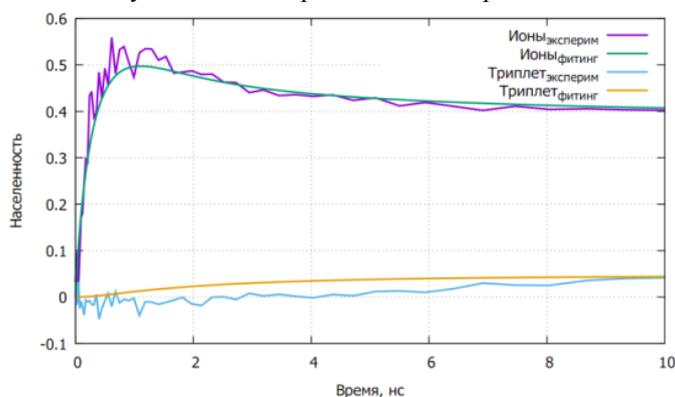


рис. 1. Зависимость населенности электронных состояний от времени

Экспериментальная кинетика хорошо воспроизводится в рамках предложенной модели. В дальнейшем будет получен фитинг кинетики в магнитном поле.

Список публикаций:

[1] A. I. Burshtein, *Adv. Chem. Phys.*, 114, 419, (2000).