

# Perilenu fluorescencijos kvantinių našumų priklausomybė nuo jų cheminės struktūros

## The Influence of Molecular Structure on Fluorescence Quantum Yields of Perylene Compounds

Austėja Bukauskytė<sup>1,2</sup>, Romualdas Striela<sup>2</sup>, Renata Karpicz<sup>2</sup>, Linas Labanauskas<sup>2</sup>, Alytis Gruodis<sup>1</sup>, Domantas Peckus<sup>3</sup>,  
Ramūnas Augulis<sup>2</sup>, Vidmantas Gulbinas<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

<sup>3</sup>Kauno technologijos universitetas, Medžiagų mokslo institutas, K. Baršausko g. 59, LT-51426 Kaunas  
[bukauskyte.austeja@gmail.lt](mailto:bukauskyte.austeja@gmail.lt)

Perilendiimido (PDI) dariniai – įvairiose srityse tiriama organiniai dariniai, kurių panaudojimas gali būti labai platus. Šie dariniai yra termiškai ir foto- stabilūs, pasižymi cheminiu inertiškumu bei aukštu fluorescencijos kvantiniu našumu. Pirmieji perilendiimidai pasižymėjo prastu tirpumu, todėl buvo plačiai naudojami kaip aukštos kokybės pramoniniai dažai, ypač automobilių kėbulams [1]. Pradėjus sintetinti perilendiimidus su tirpumą gerinančiais pakaitais, jų taikymo galimybės stipriai išplito. Dėl aukšto fluorescencijos kvantinio našumo, didelio foto- ir terminio stabilumo, PDI dariniai naudojami liuminescenciniuose saulės koncentratoriuose, plati sugertis regimojoje srityje leidžia šiuos darinius naudoti dažais sensibilizuotuose saulės elementuose [2]. PDI dariniai pasižymi *n*-tipo laidumu, todėl gali būti naudojami organiniuose saulės elementuose, organiniuose lauko tranzistoriuose bei organiniuose šviestukuose [3].

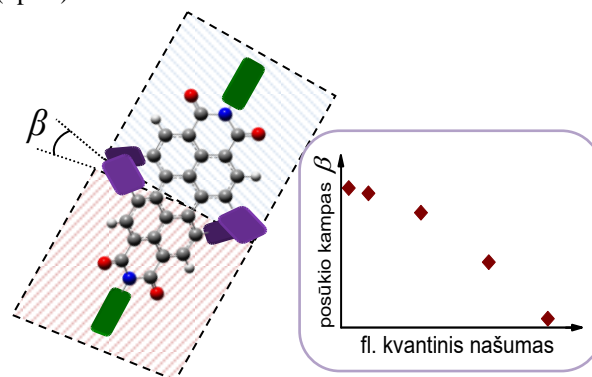
Medžiagos fluorescencinės savybės gali būti charakterizuojamos jos fluorescencijos spektru, fluorescencijos gyvavimo trukme bei kvantiniu našumu. Iš šių parametrų sudėtingiausia yra nustatyti fluorescencijos kvantinį našumą. Vienas iš paprasčiausių fluorescencijos kvantinio našumo nustatymo metodų – palyginamasis [4]. Šio metodo esmė yra žinomo kvantinio našumo medžiagos bei tiriamos medžiagos sugerties ir fluorescencijos spektrų palyginimas.

Šiame darbe buvo tiriami devyni naujai susintetinti PDI junginiai. Jų struktūra pavaizduota 1 pav. Išmatuoti šių medžiagų chloroforme tirpalų sugerties ir fluorescencijos spektrai, fluorescencijos gesimo kinetika. Išmatuoti kai kurių junginių žadinimo – zondavimo spektrai bei atlikti kvantmechaniniai skaičiavimai. Palyginamuoju metodu, naudojant du standartus, buvo nustatyti visų perilendiimidų fluorescencijos kvantiniai našumai.

Darbo metu nustatyta, jog pakaitai prie centrinių perileno žiedų lemia PDI junginių sugerties ir fluorescencijos spektrinių juostų išplatėjimą bei priklausomai nuo pakaitų tipo, stebimas spektrinių juostų poslinkis. PDI junginiai, turintys keturis 4-tert-butilfenolio pakaitus prie centrinių perileno žiedų, pasižymi aukščiausiu kvantiniu našumu. PDI junginiai su šešiais 4-tert-butilfenolio pakaitais pasižymi žemesniu fluorescencijos kvantiniu našumu. PDI

junginiai, turintys bromo pakaitus, pasižymi labai žemu fluorescencijos kvantiniu našumu.

Žadinimo – zondavimo spektrų duomenys bei kvantmechaninių skaičiavimų rezultatai atskleidė, jog bromo pakaitai stipriai sumažina fluorescencijos kvantinį našumą dėl vykstančios interkombinacinės konversijos. Taip pat nustatyta, jog pakaitai prie centrinių perileno žiedų deformuoja PDI molekules plokštumą. PDI molekulių fluorescencijos kvantinis našumas atvirkščiai proporcingas šiam posūkio kampui (1 pav.).



1 pav. Tirtų PDI molekulių schematinis atvaizdavimas bei fluorescencijos kvantinio našumo priklausomybė nuo posūkio kampo

*Reikšminiai žodžiai:* fluorescencijos kvantinis našumas, perileno diimidai, kvantmechaniniai skaičiavimai.

Šis darbas buvo dalinai finansuotas LMT projekto Nr. LAT-07/2016

### Literatūra

- [1] W. Herbst, K. Hunger, *Industrial Organic Pigments Production, Properties, Applications*, (Weinheim, 2004).
- [2] E. M. Calzado, J. M. Villalvilla, P. G. Boj, J. A. Quintana, R. Gomez, J. L. Segura, M. A. Diaz-Garcia, *J. Phys. Chem. C*, **111**, 13595-13605 (2007).
- [3] D. Kotowski, S. Luzzati, G. Scavia, M. Cavazzini, A. Bossi, M. Catellani, E. Kozma *Dyes and Pigments* **120**, 57-64 (2015)
- [4] H. Langhals, J. Karolin, L. BA. Johansson, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, **94**, 2919-2922, (1998)