

УДК 544.35

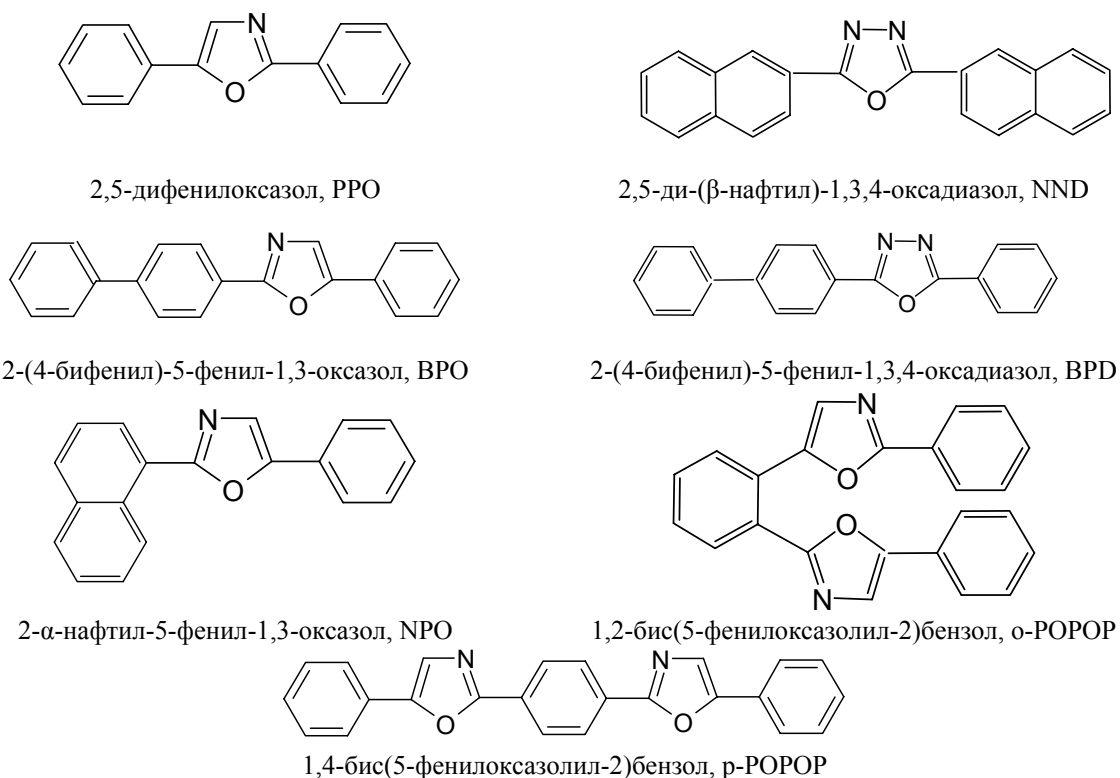
ВРЕМЯ ЖИЗНИ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАЗОЛА И ОКСАДИАЗОЛА В СИСТЕМАХ ВОДА-ЭТАНОЛ И ВОДА-АЦЕТОН**О. Н. Лукавенко, С. В. Ельцов**

Определены времена жизни возбужденного состояния люминофоров: 2,5 дифенил-1,3-оксазола (PPO), 2 (4 бифенил)-5-фенил-1,3,4-оксадиазола (BPD), 2,5 ди-(β-нафтил)-1,3,4 оксадиазола (NND), 2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3-оксазола (BPO), 2-α-нафтил-5-фенил-1,3-оксазола (NPO), 1,4 бис(5-фенилоксазолил-2)бензола (p-POPOP) и 1,2-бис(5-фенилоксазолил-2)бензола (o-POPOP) в бинарных смесях вода-этанол и вода-ацетон при 298.15 К. Установлено, что для большинства из исследованных люминофоров времена жизни возбужденного состояния меняются незначительно при переходе от органического растворителя к воде. Проведен многопараметрический корреляционный анализ зависимости времён жизни возбужденного состояния люминофоров от параметров полярности среды в смешанных растворителях. Установлено, что существует корреляция только между зависимостями времени жизни орто- и пара POPOP, а также BPO, с параметром растворимости Гильдебранда или параметром Райхардта.

Ключевые слова: время жизни возбужденного состояния, оксазол, оксадиазол, смешанные бинарные растворители, сольватация, параметры полярности, энергия образования полости, параметр Райхардта.

Введение

Соединения ряда оксазола и оксадиазола зарекомендовали себя как эффективные люминофоры, которые находят широкое применение в жидких и пластмассовых сцинтилляторах, в лазерах на красителях, а также в качестве флуоресцентных зондов и меток в медицине и биологии [1-3]. Изучение спектральных свойств, а также сольватации подобных люминофоров в растворителях различной природы представляет большой интерес.

**Рис. 1.** Формулы исследованных соединений.

Настоящая работа посвящена изучению времён жизни возбужденного состояния люминофоров: 2,5-дифенил-1,3-оксазола (PPO), 2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3,4-оксадиазола (BPD), 2,5-ди-(β-нафтил)-1,3,4-оксадиазола (NND), 2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3-оксазола (BPO), 2-α-нафтил-5-фенил-1,3-оксазола (NPO), 1,4-бис(5-фенилоксазолил-2)бензола (p-POPOP) и 1,2-бис(5-фенилоксазолил-2)бензола (o-POPOP) в системах вода-этанол и вода-ацетон.

Целью исследования является выявление закономерностей влияния природы и состава смешанных растворителей вода-этанол и вода-ацетон на времена жизни возбужденного состояния данных люминофоров.

Настоящая работа является продолжением работ, опубликованных нами ранее [4, 5], и посвящена изучению зависимости времени жизни возбужденного состояния производных оксазола и оксадиазола от параметров полярности растворителя в системах вода-этанол и вода-ацетон. Формулы исследованных соединений приведены на рис. 1.

Экспериментальная часть

Этиловый спирт и ацетон очищали по стандартным методикам [6]. Чистоту полученных растворителей определяли денсиметрически и спектрофотометрически, она составляла $x \geq 0.995$.

Для приготовления водно-органических смесей использовали бидистиллированную воду, растворы готовили весовым методом.

PPO (2,5-дифенил-1,3-оксазол), использованный в работе, был синтезирован и очищен в НИИ химии при ХНУ имени В.Н.Каразина. BPO (2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3-оксазол), BPD (2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3,4-оксадиазол), NPO (2-α-нафтил-5-фенил-1,3-оксазол), NND (2,5-ди-(β-нафтил)-1,3,4-оксадиазол), и o-POPOP (1,2-бис(5-фенилоксазолил-2)бензол) были синтезированы и очищены в институте Монокристаллов НАНУ. Эти реактивы мы использовали без последующей очистки.

p-POPOP (1,4-бис(5-фенилоксазолил-2)бензол) квалификации ХЧ был очищен перекристаллизацией из дихлорэтана [7].

Для определения времени жизни возбужденного состояния проводилось измерение затухания флуоресценции на наносекундном импульсном флуориметре [8]. Эксперимент проведен в кювете с толщиной поглощающего слоя 1 см, концентрация люминофора была выбрана таким образом, чтобы оптическое поглощение в точках возбуждения (310, 335, 357 нм) не превышало 0.3.

Обработка экспериментальных данных проводилась по программам, входящим в пакет SDL, разработанный проф. А.О.Дорошенко.

Связь времени жизни возбужденного состояния люминофоров с энергией сольватации

Время жизни возбужденного состояния (τ) – это среднее время, в течение которого молекула находилась в возбужденном состоянии до того как вернуться в основное состояние. Величина τ определяется уравнением

$$\tau = 1/k, \quad (1)$$

где k – константа скорости дезактивации возбужденного состояния, которая в общем случае является интегральной величиной, зависящей как от строения молекулы флуорофора, так и внешних условий, в том числе растворителя [9].

Влияние растворителя на время жизни возбужденного состояния определяется величиной межмолекулярных взаимодействий флуорофора, находящегося в возбужденном состоянии, с растворителем. Чем сильнее взаимодействие растворителя с флуорофором в возбужденном состоянии, тем больше время возбужденного состояния. Это справедливо в случае больших квантовых выходов. Если же значение квантового выхода флуоресценции меньше 0.5, то влияние растворителя на значение τ не столь однозначно [9].

В таблице 1 приведены литературные данные по квантовым выходам ряда исследованных люминофоров в различных средах. В таблице 2 приведены определенные нами значения квантового выхода флуоресценции PPO в смесях вода-этанол. Анализ данных таблиц 1 и 2 свиде-

тельствуют о том, что исследованные люминофоры в целом характеризуются весьма высоким значением квантового выхода.

Влияние растворителя на константу скорости химического процесса (k) описывается следующим уравнением [12]:

$$\ln k = \ln k_o - \frac{\Delta G_{solv,i} - \Delta G_{solv,\#}}{RT}, \quad (2)$$

где k_o – константа скорости процесса в газовой фазе или стандартном растворителе, $\Delta G_{solv,i}$ – сумма энергий Гиббса сольватации исходных веществ, $\Delta G_{solv,\#}$ – энергия Гиббса сольватации переходного состояния.

Таблица 1. Литературные данные по квантовым выходам люминофоров в различных растворителях.

Растворитель	Люминофор				
	РРО	ВРО	ВРД	РОРОР	о-РОРОР
Этанол	0.55 ^[10]	—	—	—	—
Толуол	0.50 ^[10] , 0.51 ^[11] , 0.754 ^[2]	0.6 ^[10]	0.36 ^[10]	0.41 ^[10] , 0.796 ^[2]	0.492 ^[2]
Циклогексан	—	—	—	0.97 ^[3]	—
Метанол	—	—	—	0.94 ^[3]	—
Бензол	—	—	—	0.86 ^[3]	—
Хлороформ	—	—	—	1 ^[3]	—
Октан	0.607 ^[2]	—	—	0.854 ^[2]	0.550 ^[2]
Диметилформамид	—	—	—	—	0.558 ^[2]
Изопропанол	—	—	—	—	0.566 ^[2]
Глицерин	—	—	—	—	0.319 ^[2]

Таблица 2. Квантовые выходы флуоресценции РРО в смесях вода-этанол.

Мольная доля этанола в смеси	1.0	0.9	0.8	0.7	0.6	0.5	0.4	0.3	0.2	0.1	0
Квантовый выход флуоресценции	0.49	0.69	0.95	≈ 1	≈ 1	≈ 1	≈ 1	≈ 1	≈ 1	≈ 1	≈ 1

Если считать, что переход из возбужденного состояния в основное происходит в одну стадию без образования активированного комплекса, то уравнение (2) можно записать в виде:

$$\ln k = \ln k_o - \frac{1}{RT} \Delta G_{solv,e}, \quad (3)$$

где $\Delta G_{solv,e}$ – энергия Гиббса сольватации молекулы в возбужденном состоянии.

Так как, согласно уравнению (1), время жизни возбужденного состояния исследованных люминофоров обратно пропорционально константе скорости процесса перехода из возбужденного состояния в основное, то

$$\ln \frac{1}{\tau} = \ln \frac{1}{\tau_o} - \frac{1}{RT} \Delta G_{solv,e}. \quad (4)$$

где $\tau_o = 1/k_o$ – время жизни возбужденного состояния люминофора в инертном растворителе.

Величина энергии сольватации, входящая в уравнение (4), является суммой нескольких составляющих и при рассмотрении большинства процессов в растворах может быть представлена уравнением [13]:

$$\Delta G_{solv} \approx \Delta G_{el} + \Delta G_{cav} + \Delta G_{disp}. \quad (5)$$

где ΔG_{el} – электростатическая составляющая взаимодействия растворенного вещества с растворителем; ΔG_{cav} – энергия образования полости в растворителе для размещения в ней молекулы растворенного вещества; ΔG_{disp} – энергия дисперсионного взаимодействия.

Расчет энергии сольватации по точным уравнениям является весьма сложной задачей, а его результаты не всегда согласуются с экспериментальными данными. Поэтому для описания влияния растворителя на физико-химические процессы широкое применение нашли различные эмпирические параметры полярности, которые являются количественной мерой сольватирующей способности растворителей.

В соответствии с принципом линейности свободных энергий [14, 15], энергия сольватации растворенного вещества может быть представлена как сумма произведений значений параметров полярности растворителя на коэффициенты пропорциональности, показывающие вклад данного свойства. Для учета влияния как общих, так и специфических эффектов растворителя на спектральные свойства веществ наиболее часто используются уравнения Камлета–Тафта и Коппеля–Пальма [16-20]. В общей форме эту концепцию можно представить следующим уравнением:

$$Y = Y_0 + A_1\delta_H^2 + A_2E_T^N + A_3\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} + A_4\frac{\varepsilon - 1}{2\varepsilon + 1} + A_5B, \quad (6)$$

где Y – значение исследуемого свойства, зависящее от растворителя; Y_0 – значение исследуемого свойства Y в инертном растворителе; δ_H^2 – квадрат параметра растворимости Гильдебранда; E_T^N – нормализованный параметр Райхардта; B – параметр, характеризующий нуклеофильность растворителя; n и ε – показатель преломления и диэлектрическая проницаемость растворителя, соответственно; $A_1 \dots A_5$ – коэффициенты пропорциональности.

Так как оксазолы и оксадиазолы не являются акцепторами электронной пары при образовании координационных связей с молекулами растворителя, то параметр нуклеофильности растворителя в корреляционные расчеты не включался. В качестве параметра, характеризующего электрофильность растворителя, нами был использован нормализованный параметр Райхардта (E_T^N). Этот параметр учитывает как электрофильную сольватирующую способность растворителя, так и сольватационный вклад полярности/поляризуемости, причем для растворителей, являющихся донорами протона при образовании межмолекулярных водородных связей (в рассматриваемых системах – вода и этанол), первый из указанных вкладов является преобладающим [12].

Так как время жизни возбужденного состояния связано с энергией сольватации по уравнению (4) то, уравнение (6) можно представить в виде:

$$\ln(1/\tau) = \ln(1/\tau_0) + A'_1\delta_H^2 + A'_2E_1 + A'_3\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} + A'_4\frac{\varepsilon - 1}{2\varepsilon + 1}. \quad (7)$$

Уравнение (7) в ряде частных случаев достаточно хорошо описывает зависимость времени жизни возбужденного состояния некоторых молекул [4, 5, 21], а анализ величин вкладов параметров полярности растворителя позволяет делать выводы о процессах, протекающих в растворе.

В данной работе уравнение (7) было использовано для выявления параметров полярности растворителя, определяющих зависимость величины $\ln(1/\tau)$ исследуемых люминофоров от состава смешанного растворителя. В ходе расчетов по уравнению (7) проводилось изменение числа параметров полярности растворителя, используемых для описания зависимости времени жизни возбужденного состояния. Это достигалось приравнением одного или нескольких коэффициентов пропорциональности ($A'_1 - A'_4$) нулю, что приводило к исключению из рассмотрения вклада в изменение исследуемой величины соответствующего свойства растворителя. Физико-химические параметры смесей вода-этанол при $T = 298.15$ К, необходимые для проведения корреляционного анализа, взяты из работы [4].

Результаты и их обсуждение

Зависимость времени жизни возбужденного состояния люминофоров

Таблица 3. Времена жизни возбужденного состояния и спектральные свойства люминофоров в системах вода-этанол и вода-ацетон при 298.15 К*.

x	вода-этанол; τ_{et} , нс							вода-ацетон; τ_{ac} , нс						
	PPO	BPO	NPO	BPD	NND	POPOP	o-POPOP	PPO	BPO	NPO	BPD	NND	POPOP	o-POPOP
0	1.7	1.37	1.7	1.1	1.56	1.7	–	1.7	1.37	1.7	1.1	1.56	1.7	–
0.05	–	1.28	1.92	1.52	1.65	–	–	–	1.21	1.98	1.49	1.25	–	–
0.1	1.71	1.26	2.01	1.1	1.54	1.42	5.17	1.58	1.16	2	0.97	3.38	1.2	5.22
0.2	1.63	1.19	2.01	0.91	4.05	1.21	5.14	1.53	1.1	2.02	0.9	3.87	1.18	4.97
0.3	1.61	1.16	2.00	0.86	3.85	1.17	4.9	1.39	1.08	1.99	0.89	3.66	1.17	4.65
0.4	1.57	1.13	1.97	0.91	3.86	1.11	4.59	1.47	1.05	1.92	0.89	3.51	1.09	4.39
0.5	1.59	1.16	1.96	0.83	3.85	1.15	4.66	1.43	0.98	1.89	0.82	3.35	1.08	4.17
0.6	1.45	1.09	1.94	0.9	3.73	1.12	4.53	1.26	0.99	1.94	0.86	3.31	1.09	3.92
0.7	1.5	1.12	1.95	0.82	3.70	1.10	4.33	1.25	0.96	1.86	0.74	3.18	1.08	3.79
0.8	1.47	1.1	1.96	0.85	3.64	1.11	4.12	1.30	0.95	1.85	0.75	2.99	1.01	3.62
0.9	1.45	1.07	1.97	0.88	3.55	1.12	4.25	1.28	0.95	1.83	0.76	2.79	1.04	3.44
1.0	1.42	1.03	1.90	0.8	3.53	1.08	4.15	1.17	1	1.78	0.72	2.65	1.03	3.27

* x – мольная доля органического растворителя.

Для многих из исследованных люминофоров времена жизни возбужденного состояния меняются незначительно при переходе от органического растворителя к воде, это видно из данных таблицы 3:

– для PPO в системе вода-этанол $\tau_{et} = 1.4-1.7$ нс, для PPO в системе вода- ацетон $\tau_{ac} = 1.2-1.7$ нс;

– для NPO в системе вода-этанол $\tau_{et} = 1.9-2.0$ нс, для NPO в системе вода- ацетон $\tau_{ac} = 1.7-2.0$ нс;

– для BPO τ_{et} и $\tau_{ac} = 1.0-1.4$ нс;

– для BPD время жизни возбужденного состояния в водно-органических смесях меняется незначительно τ_{et} и $\tau_{ac} = 0.7-0.9$ нс вплоть до растворов, содержащих большое количество воды ($x_{орг} = 0.2$), и только в области, близкой по составу к воде, изменяются сильнее, достигая значений в этаноле и ацетоне 1.0 и 1.5 соответственно;

– для NND время жизни возбужденного состояния в водно-органических смесях также меняется незначительно: $\tau_{et} = 3.5-4$ нс и $\tau_{ac} = 2.6-3.9$ нс, и только в области близкой к воде ($x_{орг} = 0.1$) происходит резкий скачек до $\tau_{et} = 1.5$ нс и $\tau_{ac} = 1.2-1.5$ нс.

Для объяснения установленного для большинства люминофоров резкого изменения времени жизни возбужденного состояния в области состава смешанного растворителя близкого к воде ($x_{орг} \leq 0.1$), можно предположить наличие избирательной сольватации молекул люминофоров органическим компонентом смешанного растворителя.

Ранее нами было установлено, что для орто- и пара-POPOP существует корреляция между временем жизни возбужденного состояния как от параметра растворимости Гильдебранда, так и от нормализованного параметра Райхардта [4, 5], при этом значение коэффициента корреляции R составляет $0.93 \div 0.98$ для o-POPOP и 0.95 для p-POPOP.

Анализ данных по зависимости времен жизни возбужденного состояния других люминофоров (PPO, BPD, NND, BPO, NPO) от параметров полярности растворителя, проведенный на основании уравнения (7), показал, что удовлетворительная корреляция существует только для зависимости времени жизни BPO от параметров полярности δ_H^2 и E_T^N с коэффициентом корреляции от 0.93 до 0.96.

Графики зависимостей времени жизни возбужденного состояния люминофоров от квадрата параметра растворимости Гильдебранда и нормализованного параметра Райхардта в смешанных водно-органических растворителях представлены на рисунках 2 и 3.

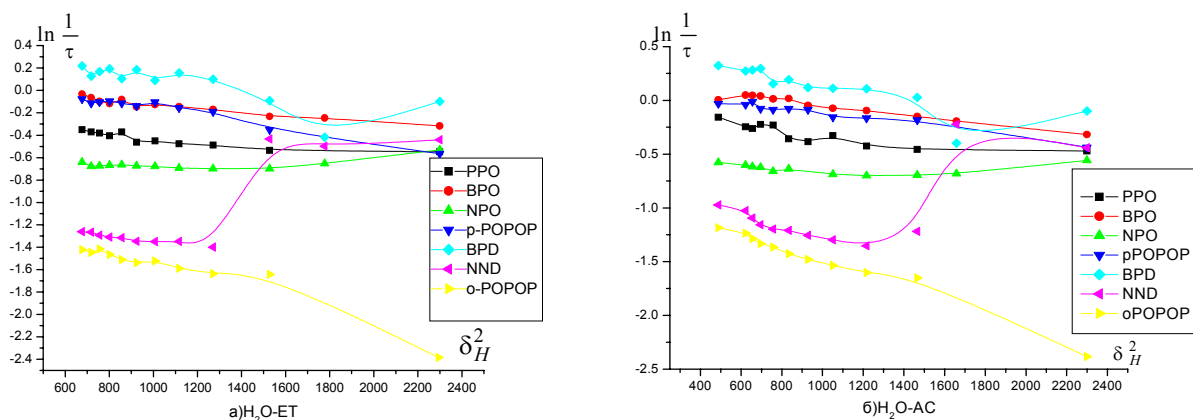


Рис. 2. Зависимость времени жизни возбужденного состояния люминофоров от квадрата параметра растворимости Гильдебранда смешанного растворителя а) - вода-этанол и б) - вода-ацетон.

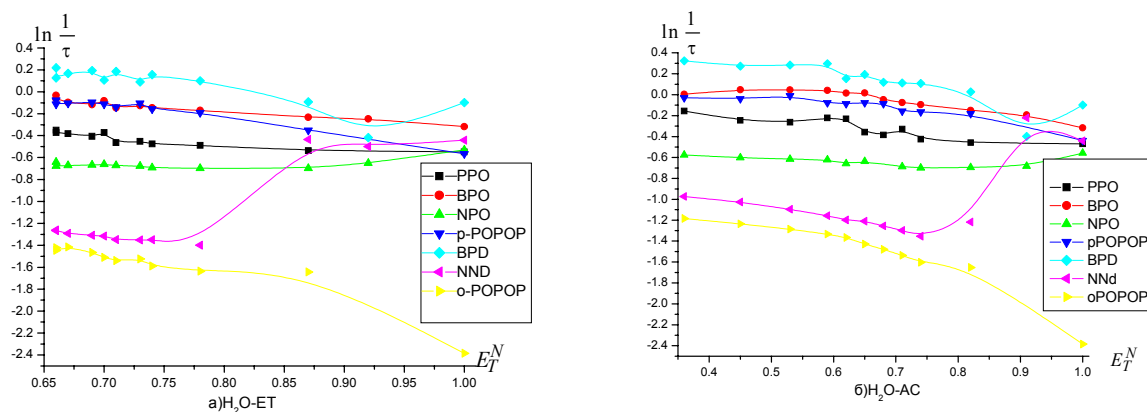


Рис. 3. Зависимость времени жизни возбужденного состояния люминофоров от нормализованного параметра Райхардта смешанного растворителя а) - вода-этанол и б) - вода-ацетон.

Из графиков, приведенных на рис. 2 и 3, видно, что зависимости времени жизни возбужденного состояния молекул PPO, BPD, BPO, NPO и p-POPOP от параметра растворимости Гильдебранда и от параметра Райхардта имеют сходный характер, в то время как вид зависимостей для NND и o-POPOP резко отличается. Для объяснения установленных различий в поведении исследованных люминофоров необходимо привлечение квантово-химических расчетов для изучения электронного строения их молекул.

Литература

1. Pavlopoulos T.G., Hammond P.R. J. Am. Chem. Soc. 1974. Vol.96. No.21. P.6568-6579.
2. Doroshenko A.O., Kirichenko A.V., Mitina V.G., Ponomaryov O.A. J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry. 1996. Vol.94. P.15-26.
3. Васильева И.А., Киселева Н.А., Нурмухаметов Р.Н., Чижикова З.А. Оптика и спектроскопия. 2006. Т.101. №2. С.239-246.
4. Lukavenko O.N., Eltsov S.V., Grigorovich A.V., Mchedlov-Petrosyan N.O. J. Mol. Liq., 2009. Vol.145, No.3. P.167-172.
5. Лукавенко О.Н., Ельцов С.В., Марченко И.Л. Вісник ХНУ. 2011. Хімія. Вип.20(43). №976. С.163-170.

6. Вайсбергер А., Проскауэр Э., Риддик Дж., Тупс Э. Органические растворители: физические свойства и методы очистки. / Под ред. А. Вайсбергера. М. 1958. 519 с.
7. Красовицкий Б.М., Афанасиади Л.М. Препаративная химия органических люминофоров, Харьков, 1997. 185 с.
8. Григорович А.В. Комплексообразование органических краунсодержащих люминофоров с ионами щелочноземельных металлов в основном и возбужденном состоянии. Дисс... канд. хим. наук. Харьков, 2000. 155 с.
9. Теренин А.Н. Фотоника молекул красителей и родственных органических соединений. Л.: Наука, 1967. 616 с.
10. Красовицкий Б.М., Гринев Б.В., Винецкая Ю.М., Богданова Л.И. Спектры органических люминофоров. Атлас. Вып.1. Харьков, 2001. 142 с.
11. Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. Органические люминофоры. Харьков, 1984. 334 с.
12. Reichardt Chr. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 2003. 629 p.
13. Tomasi J., Persico M. Chem. Rev. 1994. Vol.94, No.7. P.2027-2094.
14. Фиалков Ю.Я. Растворитель как средство управления химическим процессом. Л.: Химия. 1990. 240 с.
15. Katritzky A.R., Fara D.C., Yang H., Tamm K. Chem. Rev. 2004. Vol.104. No.1. P.175-198.
16. Beck S.C., Cramb D.T. J. Phys. Chem. B. 2000. Vol.104, No.12. P.2767-2774.
17. Guzow K., Milewska M., Wiczak W. Spectrochimica Acta Part A. 2005. Vol.61, No.6. P.1133-1140.
18. Бахшиев Н.Г., Гуларян С.К., Добрецов Г.Е., Кириллова А.Ю., Светличный В.Ю. Оптика и Спектроскопия. 2006. Т.100, №5. С.762-770.
19. Gustavsson T., Cassara L., Gulbinas V., Gurzadyan G., Mialocq J.-C., Pommeret S., Sorgius M. J. Phys. Chem. A. 1998. Vol.102, No.23. P.4229-4245.
20. Ren B., Gao F., Tong Z., Yan Y. Chem. Phys. Lett. 1999. Vol.307. P.55-61.
21. Макитра Р.Г., Пириг Я.Н. Журнал общей химии. 1986. Т.56, Вып.3. С.657-665.

References

1. Pavlopoulos T.G., Hammond P.R. J. Am. Chem. Soc. 1974. Vol.96. No.21. P.6568-6579.
2. Doroshenko A.O., Kirichenko A.V., Mitina V.G., Ponomaryov O.A. J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry. 1996. Vol.94. P.15-26.
3. Vasilyeva I.A., Kiseleva N.A., Nurmuhametov R.N., Chizhikova Z.A. V. J. Opt. Spektrosk. 2006. V.101. №2. P.239-246.
4. Lukavenko O.N., Eltsov S.V., Grigorovich A.V., Mchedlov-Petrosyan N.O. J. Mol. Liq., 2009. Vol.145, No.3. P.167-172.
5. Lukavenko O.N., Eltsov S.V., Marchenko I.L. Visn. Hark. nac. univ. 2011. Ser. Him. issue 20(43). №976. P. 163-170. [in Russian]
6. Weissberger A., Proskawer E., Riddick J., Toops E. Organic solvents: physical properties and purification methods. / A. Weissberger, Ed. Moscow. 1958. [in Russian]
7. B.M. Krasovitskiy, L.M. Afanaciadi. Preparative chemistry of organic luminophores, Kharkov, Folio, 1997. (in Russian)
8. Grigorovich A.V. Complexation of crown-containing organic phosphors with ions of alkaline earth metals in the ground and excited states. Dis ... Candidate. Chem. Sciences. Kharkiv, 2000. 155 p.
9. Terenin A.N. Photonics of dye molecules and related organic compounds. LA Science, 1967. 616 p.
10. Krasovitskiy B.M., Grinev B.V., Vinetskii J.M., Bogdanov L.I. Spectra of organic luminophores Atlas, Volume 1. Kharkiv, 2001. 142 p.
11. Krasovitskiy B.M., Bolotin B.M. Organic luminophores. Kharkiv, 1984. 334 p. [in Russian]
12. Reichardt Chr. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 2003. 629 p.
13. Tomasi J., Persico M. Chem. Rev. 1994. Vol.94, No.7. P.2027-2094.
14. Fialkov Yu.Ya. Solvent as a tool for chemical process control, Khimiya, Lenin-grad, 1990. 240 p. [in Russian]
15. Katritzky A.R., Fara D.C., Yang H., Tamm K. Chem. Rev. 2004. Vol.104. No.1. P.175-198.
16. Beck S.C., Cramb D.T. J. Phys. Chem. B. 2000. Vol.104, No.12. P.2767-2774.

17. Guzow K., Milewska M., Wiczak W. *Spectrochimica Acta Part A*. 2005. Vol.61, No.6. P.1133-1140.
18. Bakhshiev N.G., Gularjan S.K., Dobrecov G.E., Kirillova A.Ju., Svetlichnyj V. *J. Opt. Spektrosk.* 2006. Vol.100, № 5. P.762-770. [in Russian]
19. Gustavsson T., Cassara L., Gulbinas V., Gurzadyan G., Mialocq J.-C., Pommeret S., Sorgius M. *J. Phys. Chem. A*. 1998. Vol.102, No.23. P.4229-4245.
20. Ren B., Gao F., Tong Z., Yan Y. *Chem. Phys. Lett.* 1999. Vol.307. P.55-61.
21. Makitra R.G., Pirig Ya.N., Zh. Obsh. Khim. 1986. Vol.56, №3. P.657-665. [in Russian]

Поступила в редакцию 17 июня 2012 г.

О. М. Лукавенко, С. В. Ельцов. Час життя збудженого стану похідних оксазолу та оксадіазолу у системах вода-етанол та вода-ацетон.

Визначено час життя збудженого стану люмінофорів: 2,5-діфеніл-1,3-оксазолу (PPO), 2-(4-біфеніл)-5-феніл-1,3,4-оксадіазолу (BPD), 2,5-ді-(β -нафтіл)-1,3,4-оксадіазолу (NND), 2-(4-біфеніл)-5-феніл-1,3-оксазолу (BPO), 2- α -нафтіл-5-феніл-1,3-оксазолу (NPO), 1,4-біс(5-фенілоксазоліл-2)бензолу (p-POPOP) та 1,2-біс(5-фенілоксазоліл-2)бензолу (o-POPOP) у бінарних сумішах вода-етанол та вода-ацетон при 298.15 К. Встановлено, що для більшості з вивчених люмінофорів час життя збудженого стану змінюється не значно при переході від органічного розчинника до води. Проведено багатопараметричний кореляційний аналіз залежності часу життя збудженого стану люмінофорів від параметрів полярності змішаних розчинників. Знайдено, що існує тільки кореляція між залежностями часу життя орто- та пара-POPOP, а також BPO, та параметром розчинності Гільдебранда або параметром Райхардта.

Ключові слова: час життя збудженого стану, оксазол, оксадіазол, змішані бінарні розчинники, сольватація, параметри полярності, енергія утворення порожнини, параметр Райхардта.

O. N. Lukavenko, S. V. Eltsov. Lifetimes of the excited state of oxazole and oxadiazole derivatives in mixed water-ethanol and water-acetone solvent systems.

The lifetimes of the excited state of seven luminophores, 2,5-diphenyl-1,3-oxazole (PPO), 2-(4-diphenyl)-5-phenyl-1,3,4-oxadiazole (BPD), 2,5-di-(β -naphthyl)-1,3,4-oxadiazole (NND), 2-(4-diphenyl)-5-phenyl-1,3-oxazole (BPO), 2- α -naphthyl-5-phenyl-1,3-oxazole (NPO), 1,4-bis(5-phenyl-oxazolyl 2)benzene (p-POPOP), and 1,2 bis(5-phenyl-oxazolyl-2)benzene (o-POPOP), have been determined in mixed water-ethanol and water-acetone solvents at 298.15 K. It has been found that for the majority of investigated luminophores lifetimes of the excited state change insignificantly with the transition from organic solvents to water. The multipleparameter correlation analysis of lifetimes of the excited state of luminophores dependence on solvent polarity parameters has been carried out. It has been found that the correlation between the life-time of the excited state of luminophores and parameters of solvent polarity exists only for o-POPOP and p-POPOP, BPO; these parameters are normalized Reichardt parameter and Hildebrand solubility parameter.

Key words: lifetime of excited state, oxazole, oxadiazole, mixed binary solvent, solvation, solvent polarity parameters, energy of cavity formation, Reichardt parameter.

Kharkov University Bulletin. 2012. № 1026. Chemical Series. Issue 21 (44).