

# Комплексный подход к разработке и созданию активных сред перестраиваемых лазеров

В.Я. Артюхов, Т.Н. Копылова, Г.В. Майер\*

Томский государственный университет  
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36

Поступила в редакцию 8.06.2010 г.

Научная и практическая актуальность исследований оптических свойств многоатомных молекул связана с широким использованием органических соединений в качестве компонентов активных сред лазеров. Представленный комплексный подход к разработке и созданию активных сред перестраиваемых лазеров позволяет получать новые фундаментальные данные об особенностях дезактивации энергии электронного возбуждения в органических молекулах, прогнозировать их свойства. На примере замещенных пирана продемонстрированы возможности подхода по исследованию закономерностей и механизмов формирования спектрально-люминесцентных и генерационных свойств этого класса соединений.

**Ключевые слова:** многоатомные органические соединения, электронно-возбужденные состояния, константы скоростей фотопроцессов, динамика заселенности электронных состояний, спектрально-люминесцентные и генерационные свойства; polyatomic organic compounds, electronic excited states, photoprocess rates, population dynamics of electronic states, spectral-luminescent and lasing properties.

Одной из фундаментальных проблем молекулярной оптики является установление связи спектрально-люминесцентных свойств с особенностями внутри- и межмолекулярных взаимодействий и параметров возбуждающего электромагнитного поля. Научная и практическая актуальность исследований оптических свойств многоатомных молекул связана с широким использованием органических соединений в качестве компонент активных сред лазеров, с необходимостью направленного поиска и синтеза новых эффективных в генерационном отношении молекулярных систем для квантовой электроники.

Нами исследования генерационных свойств органических соединений были начаты в конце 1970-х гг. При этом была сформулирована задача разработки лазерных сред, генерирующих в видимой и ближней ультрафиолетовой областях спектра. В качестве источников накачки предполагалось использовать эксимерные лазеры с  $\lambda_{\text{возб}} \geq 308$  нм. Эксимерные лазеры обладают уникальными параметрами излучения: высокой мощностью излучения в широком диапазоне спектра, импульс излучения имеет крутой передний фронт и достаточную длительность. Высокие скорости повторения импульсов, которые могут быть достигнуты в эксимерных лазерах, делают их чрезвычайно перспективными при проведении ряда экспериментов по исследованию атмосферы, моря и пр. Проблема преобразования мощного излучения эксимерных лазеров имеет

два аспекта: создание высокоэффективных и фотостабильных лазерно-активных сред; разработка оптических элементов и оптических схем лазеров на красителях.

## Теоретические методы и методики

При решении поставленной задачи был выработан комплексный (теоретический и экспериментальный) подход к исследованию, который позволил установить фундаментальные закономерности в механизмах протекания фотопроцессов и природе формирования свойств, дал возможность получить результаты эвристического, прогнозного характера.

Хотя еще в 1968 г. [1], исходя из связи электронно-колебательных уровней энергии с химическим строением молекулы и вероятностями переходов между ними, были сформулированы основные принципы создания новых активных сред, возможность реализации этих принципов требовала математического моделирования молекулярных структур.

Теоретическое изучение фотоники многоатомных молекул основано на законах спектроскопии и люминесценции, теории электронных переходов и методах квантовой химии (квантовой механики молекул). Для полного и детального теоретического исследования молекулярных фотопроцессов необходимо знание энергетической схемы электронных состояний и вероятностей (констант скоростей) различных процессов: поглощения и излучения света, внутримолекулярного превращения поглощенной энергии (внутренней и интеркомбинационной конверсий), фотохимических реакций. Практика теоретического исследования физики и химии молекул показывает необходимость создания специализированных

\* Виктор Яковлевич Артюхов (artvic@phys.tsu.ru);  
Татьяна Николаевна Копылова; Георгий Владимирович  
Майер (rector@tsu.ru).

проблемно-ориентированных комплексов программ для изучения определенного круга задач и классов соединений. Только квантово-химические расчеты позволяют определить положение и природу возбужденных электронных состояний, в том числе, и ненаблюдаемых в спектроскопических экспериментах.

Для решения задач спектроскопии, люминесценции и фотохимии нами был создан пакет квантово-химических программ, основой которого является полуэмпирический метод частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием с оригинальной спектроскопической параметризацией [2]. Пакет программ позволяет рассчитать следующие характеристики электронно-возбужденных состояний многоатомных молекул: энергию и природу молекулярных орбиталей, энергию синглетных и триплетных электронно-возбужденных состояний, силу осциллятора и поляризацию электронных переходов, распределение электронной плотности на атомах и связях молекулы, дипольные моменты в основном и возбужденных состояниях, а также спектры поглощения из возбужденных синглетного и триплетного состояний [3].

Главным отличием данного пакета программ от существующих не только на основе полуэмпирических, но и на основе методов *ab initio*, является возможность расчета констант скоростей внутримолекулярных безызлучательных процессов (внутренней и интеркомбинационной конверсий). Пакет программ включает программу расчета молекулярного электростатического потенциала, что позволяет делать оценки протоноакцепторных свойств молекул и способности к специфическим межмолекулярным взаимодействиям как в основном, так и в электронно-возбужденных состояниях [4].

Эффективность и практическая ценность разработки квантово-химических методик и моделей для теоретического исследования фотоники многоатомных органических молекул могут быть достоверно установлены лишь при длительном использовании их для решения конкретных задач фотоники молекул [3]. Отметим, что в ходе выполнения исследований спектрально-люминесцентных и генерационных свойств органических соединений впервые была создана программа расчета матричных элементов спин-орбитального взаимодействия для оценки константы скорости интеркомбинационной конверсии между состояниями  $\pi\pi^*$ -типа ( $S_{\pi\pi^*} \rightarrow T_{\pi\pi^*}$ ).

Из общей теории могут быть сформулированы требования, которым должны удовлетворять молекулярные спектральные параметры органических соединений, потенциально являющихся лазерно-активными средами для различных режимов генерации. Высокий коэффициент усиления и низкий порог генерации свойственны красителям, обладающим: большим значением сечения вынужденного испускания лазерного перехода ( $\geq 5 \cdot 10^{-17} \text{ см}^{-1}$ ); малыми выходами процессов безызлучательной конверсии  $S_1$ -состояния; широкими полосами люминесценции; как можно меньшим перекрыванием спектров поглощения в возбужденных состояниях ( $S_1 \rightarrow S_n$  и  $T_1 \rightarrow T_m$ ) со спектрами генерации и на-

качки; большим стоксовым сдвигом флуоресценции; фотохимической стабильностью [5].

Фотостабильность лазерно-активных сред вообще и при накачке мощным излучением эксимерных лазеров до сих пор является весьма сложной проблемой. Следует различать молекулярную и генерационную фотостабильность лазерно-активных сред. Молекулярная фотостабильность активной среды определяется как квантовый выход фотопревращений и необратимых фотопродуктов и характеризуется совокупностью фотофизических и фотохимических процессов в облучаемой молекуле. Генерационная фотостабильность лазерной среды определяет ресурс работы или «время жизни» генерирующей системы и в значительной степени связана с условиями, в которых генерирует молекула (резонатор, концентрация активной среды, длина волны возбуждения и др.). Количественная мера «времени жизни» – энергия, вкачиваемая в 1 см<sup>3</sup> раствора красителя до падения КПД генерации в 2 раза ( $P_{1/2}$ , Дж/см<sup>3</sup>).

Создание высокоеффективных и фотостабильных лазерно-активных сред достигается следующими путями [6, 7]:

- а) теоретическое прогнозирование и синтез новых хорошо люминесцирующих молекул с низким квантовым выходом фотопревращений;
- б) целенаправленное использование межмолекулярных взаимодействий для повышения фотостабильности молекул (поиск растворителей и добавок в них, уменьшающих выход конечных фотопродуктов и фотопревращений);
- в) разработка и создание системы регенерации красителя на основе различных сорбентов.

Многообразие излучающих форм органических молекул дает возможность получать диапазон перестройки максимума длины волны генерации до 130 нм, а целенаправленное замещение в молекуле позволяет получать соединения, обладающие оптимальными параметрами излучения.

Так как генерация лазерного излучения связана с протеканием нелинейных процессов, важно иметь модели и методики изучения временной динамики населения электронных состояний молекул. Для этого обычно используется вероятностный метод расчета, который был предложен Эйнштейном еще в 1917 г. Его суть состоит в том, что, зная уровни энергии и вероятности перехода между ними, можно определить населенности отдельных уровней в зависимости от интенсивности. Исходные уравнения этого метода, в общем случае, не вытекают из более общих уравнений квантовой электродинамики и имеют определенные границы применимости. Например, вероятностный метод не позволяет решать задачи, связанные с контуром и смещением уровней энергии, нерезонансным взаимодействием и т.д. Тем не менее он позволяет находить правильные выражения для мощностей поглощения и излучения, закономерностей разгорания и затухания люминесценции, квантового выхода люминесценции и ряда других оптических характеристик [1].

В [1] вероятностный метод был предложен для расчета оптических квантовых генераторов на растворах органических красителей. Оценим возмож-

ности метода в рамках электронно-колебательных уровней молекулы (рис. 1).

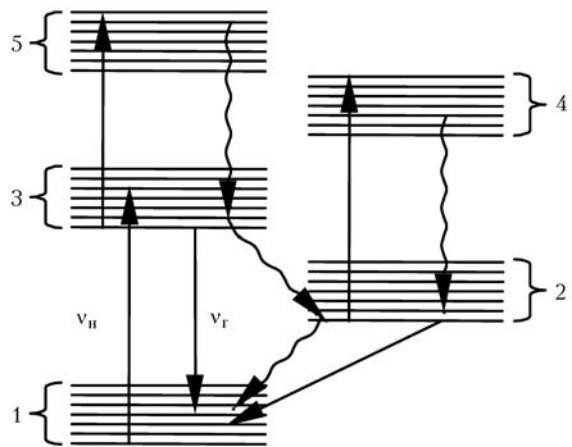


Рис. 1. Схема электронно-колебательных уровней молекулы, участвующих в формировании генерации лазерного излучения. Нечетными цифрами обозначены синглетные, четными — триплетные состояния;  $v_n$  — энергия накачки;  $v_r$  — энергия генерации

Генерация красителей по двухуровневой схеме может усложниться вредным влиянием дополнительных уровней, изображенных на рис. 1.

Накачка и усиление происходят в канале  $1 \leftrightarrow 3$ . При расчетах нужно учитывать переходы  $3 \rightarrow 5$ , дезактивацию уровня 3 при переходах  $3 \rightarrow 2$ , переходы  $2 \rightarrow 4$  и  $2 \rightarrow 1$ . Дезактивация триплетного состояния 2 происходит, как правило, неоптическим путем, причем в некоторых молекулах вероятность дезактивации по этому каналу может быть очень велика.

На основе приведенной схемы была разработана физическая модель [8], описывающая динамику населенностей с помощью системы пяти дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} &= N_3(k_{ic31} + k_{fl31}) + N_2k_{ST21} + \\ &+ \sum_{\lambda}(I(t,\lambda)N_3\sigma_{31}(\lambda) - I(t,\lambda)\sigma_{13}(\lambda)N_1), \\ \frac{dN_2}{dt} &= N_4k_{ic42} - N_2k_{ST21} + N_3k_{ST32} - \sum_{\lambda}(I(t,\lambda)\sigma_{24}(\lambda)N_2), \\ \frac{dN_3}{dt} &= N_5k_{ic53} - N_3(k_{ic31} + k_{fl31}) - N_3k_{ST32} + \\ &+ \sum_{\lambda}(I(t,\lambda)\sigma_{13}(\lambda)N_1 - I(t,\lambda)\sigma_{35}(\lambda)N_3 - I(t,\lambda)N_3\sigma_{31}(\lambda)), \\ \frac{dN_4}{dt} &= -N_4k_{ic42} + \sum_{\lambda}(I(t,\lambda)\sigma_{24}(\lambda)N_2), \\ \frac{dN_5}{dt} &= -N_5k_{ic53} + \sum_{\lambda}(I(t,\lambda)\sigma_{35}(\lambda)N_3), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $N_i$  — населенность уровня  $i$ ;  $k_{icij}$  — внутренняя конверсия;  $k_{STij}$  — синглет-триплетная конверсия;  $k_{fl31}$  — константа флуоресценции;  $\sigma_{ij}$  — сечение поглощения для перехода с уровня  $i$  на  $j$ ;  $I(t, \lambda)$  — интенсивность излучения.

Система уравнений (1) решается методом Рунге–Кутты 4-го порядка, и в результате получаются значения населенностей  $N_i(t)$ . Далее можно получить значение коэффициента поглощения (усиления)

$$K_{\text{погл}}(v) = (\sigma_{13}(v) - \sigma_{31}(v))N_1 + \sigma_{35}(v)N_3 + \sigma_{24}(v)N_2, \quad (2)$$

где  $v$  — энергия перехода, см<sup>-1</sup>.

Сечения поглощения ( $\sigma_{13}$ ,  $\sigma_{35}$ ,  $\sigma_{24}$ ) и сечение предельного усиления  $\sigma_{31}$  являются спектрально-зависимыми параметрами. В (1) одновременно учитываются переходы во всей рассматриваемой области спектра. С учетом излучательных переходов и коэффициента поглощения (2) выражение для интенсивности излучения на выходе из оптически тонкого слоя имеет вид

$$\begin{aligned} I_{\text{вых}}(t, \lambda) &= I_{\text{вх}}(t, \lambda) \times \\ &\times \exp(-K_{\text{погл}}\Delta l) + N_3(t)\Delta l K_{\text{люм}}(\lambda) K_{\text{геом}}, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\Delta l$  — толщина тонкого слоя;  $K_{\text{люм}}(\lambda)$  — коэффициент, показывающий, какая часть излучения люминесценции приходится на заданный диапазон длин волн;  $K_{\text{геом}}$  — геометрический коэффициент, учитывающий, что не все излучение распространяется в заданном направлении.

В результате расчетов вычисляются: значения населенностей  $N_i(t)$  для первого, центрального и последнего слоя; динамика импульса накачки и импульса генерации на заданной длине волны; спектр генерации; геометрическое распределение интенсивности генерируемого излучения по слоям вдоль направления распространения накачки (поперечная схема накачки) [8].

## Комплексное исследование генерационных свойств замещенных пирана

Замещенные пирана демонстрируют большие возможности органической химии в создании полифункциональных материалов: эти соединения эффективно люминесцируют в растворах, полимерных матрицах и пленках, являются эффективными активными средами перестраиваемых лазеров, ограничивают оптическое лазерное излучение 2-й гармоники неодимового лазера, используются в качестве излучающих слоев органических светодиодов и др. Структурные формулы исследованных соединений приведены на рис. 2 [9].

Спектрально-люминесцентные свойства замещенных пирана исследовались в этаноле, этилацетате и диметилсульфоксида (ДМСО). Генерационные свойства замещенных пирана исследовались при поперечной схеме возбуждения, использовался неселективный резонатор, образованный алюминиевым зеркалом и гранью кюветы или твердотельного образца. В качестве источника накачки использовался неодимовый (2-я гармоника) и XeCl-лазеры.

Анализ приведенных данных в табл. 1 показывает, что область длинноволнового поглощения замещенных пирана в зависимости от растворителя несколько изменяется.

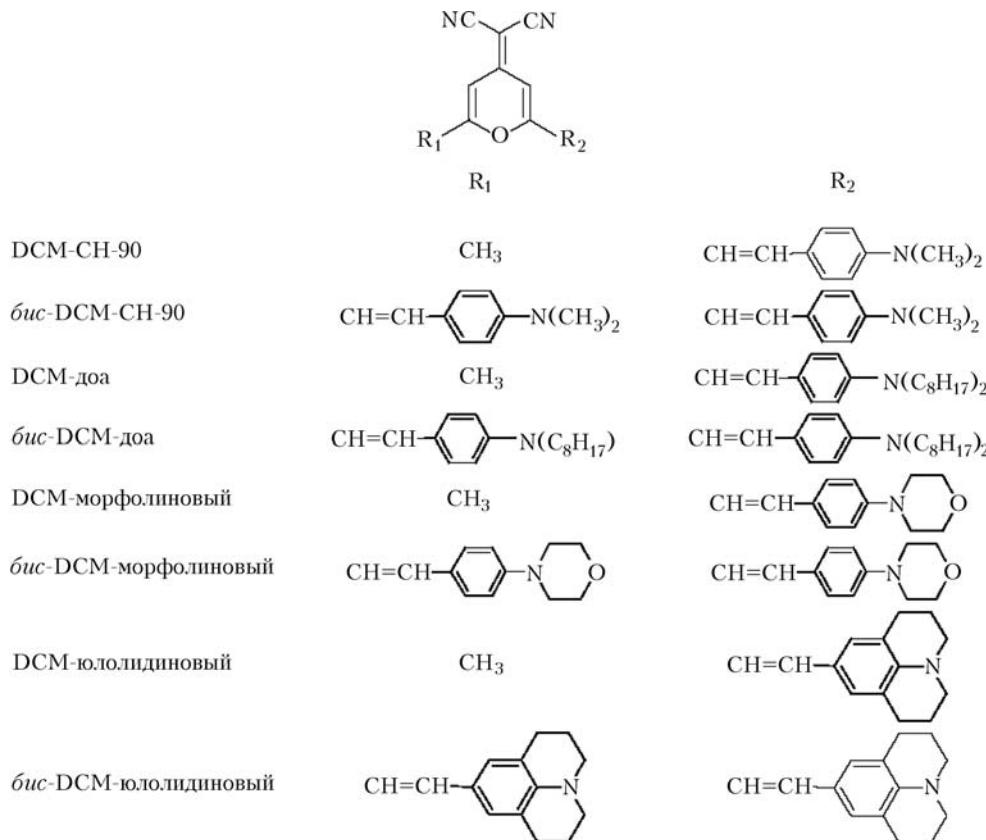


Рис. 2. Структурные формулы замещенных пирана (доа—диактиломин)

Таблица 1  
Значения максимумов длинноволновых полос поглощения, нм

Соединение	Растворитель			Расчет
	DMSO	этанол	этилацетат	
DCM-CH-90	476	472	455	453
<i>bis</i> -DCM-CH-90	488	481	476	466
DCM-морфолиновый	455	441	435	441
<i>bis</i> -DCM-морфолиновый	472	455	453	454
DCM-юолидиновый	493	488	476	468
<i>bis</i> -DCM-юолидиновый	500	498	490	472

Так, длинноволновая полоса поглощения всех исследованных замещенных пирана с уменьшением полярности растворителя сдвигается в коротковолновую область на 15–20 нм. Коэффициент экстинкции длинноволновых полос поглощения исследованных молекул достаточно высок —  $4\text{--}5 \cdot 10^4$  л/(моль·см). При переходе к *бис*-структуркам наблюдается длинноволновый сдвиг полос поглощения и флуоресценции, что связано с увеличением цепи сопряжения в этих молекулах. Для этого класса соединений характерны большой стоксов сдвиг ( $4000\text{--}6000$  см<sup>−1</sup>) и широкие полосы флуоресценции молекул (75–115 нм), свидетельствующие о значительном изменении геометрии молекул в возбужденном состоянии.

Значения расчетных и экспериментальных максимумов полос флуоресценции изученных молекул представлены в табл. 2.

На рис. 3 показаны схемы электронных состояний и константы дезактивации энергии элек-

тронного возбуждения для молекулы DCM-CH-90 и *бис*-DCM-CH-90.

По результатам квантово-химического расчета величина константы синглет-триплетной конверсии для молекулы DCM-CH-90 сравнима с радиационной константой ( $k_{ST} = 9,6 \cdot 10^7$  с<sup>−1</sup>;  $k_r = 1,7 \cdot 10^8$  с<sup>−1</sup>) (рис. 3, а). Для *бис*-DCM-CH-90 значение скорости интерсистемной конверсии превосходит значение скорости радиационного распада более чем на порядок ( $k_{ST} = 9,4 \cdot 10^8$  с<sup>−1</sup>;  $k_r = 7,7 \cdot 10^8$  с<sup>−1</sup>) (рис. 3, б), что приводит к снижению квантового выхода флуоресценции *бис*-DCM-CH-90 до 0,07.

Анализируя представленные результаты, следует отметить, что данные, полученные экспериментально и определенные из квантово-химических расчетов, хорошо согласуются.

Все изученные соединения генерируют лазерное излучение при накачке УФ- и видимым излучением. Пороги генерации составляют 1–40 МВт/см<sup>2</sup>,

Таблица 2

Значения максимумов полос флуоресценции  $\lambda_{\max}$ , нм, и квантовые выходы флуоресценции  $\eta$ 

Соединение	Растворитель			Расчет
	ДМСО	Этанол	Этилацетат	
DCM-CH-90	635 (0,50)	615 (0,50)	580 (0,50)	541 (0,60)
<i>bis</i> -DCM-CH-90	650 (0,01)	620 (0,10)	625 (0,10)	600 (0,07)
DCM-морфолиновый	635 (0,60)	615 (0,50)	580 (0,40)	531 (0,56)
<i>bis</i> -DCM-морфолиновый	650 (0,01)	620 (0,04)	630 (0,10)	607 (0,04)
DCM-юолидиновый	635 (0,60)	620 (0,60)	585 (0,50)	543 (0,57)
<i>bis</i> -DCM-юолидиновый	660 (0,01)	650 (0,04)	625 (0,30)	607 (0,06)

кпд при накачке с  $\lambda = 308$  нм достигает 24% и при  $\lambda = 532$  нм – 45% (табл. 3).

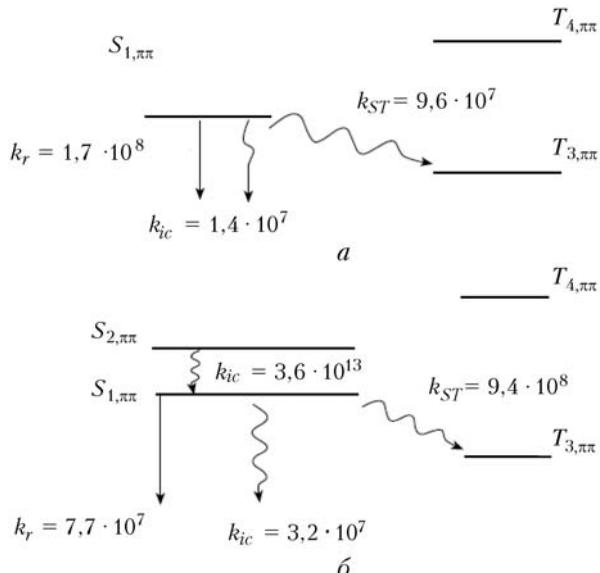


Рис. 3. Схемы электронных состояний и каналы деградации энергии молекул: *a* – DCM-CH-90; *б* – *bis*-DCM-CH-90;  $k_r$ ,  $k_{ST}$ ,  $k_{ic}$  – константы скоростей излучения, синглет-триплетной и внутренней конверсии соответственно,  $\text{с}^{-1}$ .

Подобная ситуация наблюдается для DCM-морфолинового и DCM-юолидинового и их симметрично замещенных аналогов. Описанные выше изменения излучательных свойств в симметрично замещенных структурах вызваны появлением вблизи уровня  $S_1$  уровня  $S_2$ . На спектрах поглощения это практически не оказывается, но при возбуждении близко лежащие друг к другу синглетные состояния  $S_1$  и  $S_2$  меняются местами. Нижним станов-

ится состояние  $S_2$  с меньшей силой осциллятора (см. рис. 3). Это приводит к резкому уменьшению величины константы скорости радиационного распада, а также к значительному увеличению вероятности интеркомбинационного перехода за счет увеличения матричного элемента синглет-триплетного взаимодействия  $\langle H_{ST} \rangle$ . Как следствие, уменьшается квантовый выход флуоресценции  $\eta$ , что и наблюдается в эксперименте.

Диапазон генерации исследованных соединений равен 603–693 нм в зависимости от растворителя. В неселективном резонаторе ширина полосы генерации на полуысоте достигает 20 нм, а по основанию – 100 нм. Это обеспечивает возможность широкой перестройки длины волны генерации.

Ряд замещенных пирана имеет высокую эффективность генерации в этилацетате, что позволило прогнозировать их генерационную способность в полиметилметакрилатных матрицах. Отметим факт получения вынужденного излучения на *bis*-структуратах, имеющих квантовый выход флуоресценции  $\eta = 0,10 \div 0,01$ . Экспериментальные и теоретические исследования показали, что причиной этого является отсутствие наведенного ( $S_1 \rightarrow S_n$ ,  $T_1 \rightarrow T_n$ ) поглощения в области генерации [8, 9].

Оценен квантовый выход фотопревращений исследованных замещенных пирана. Так, для соединений DCM-морфолинового, DCM-доа и DCM-CH-90 при возбуждении излучением  $\lambda = 308$  нм он составляет  $(1,2 \pm 0,2) \cdot 10^{-3}$ , а при  $\lambda = 532$  нм –  $(1,0 \pm 0,2) \cdot 10^{-5}$ . Это значение сравнимо с квантовым выходом фотопревращений известного ксантенового красителя родамина 6Ж при таком же возбуждении. Исследование спектров поглощения растворов замещенных DCM показало, что при облучении не образуются фотопродукты, поглощающие в области генерации, и падение кпд генерации активной

Таблица 3

## Генерационные характеристики замещенных пирана

Соединение	$\lambda_{\text{возб}} = 532$ нм						$\lambda_{\text{возб}} = 308$ нм					
	Этилацетат		Этанол		ДМСО		Этилацетат		Этанол		ДМСО	
	$\lambda_{\text{ген.}}$ , нм	кпд, %	$\lambda_{\text{ген.}}$ , нм	кпд, %	$\lambda_{\text{ген.}}$ , нм	кпд, %	$\lambda_{\text{ген.}}$ , нм	кпд, %	$\lambda_{\text{ген.}}$ , нм	кпд, %	$\lambda_{\text{ген.}}$ , нм	кпд, %
DCM-CH-90	607	35,2	63	39,5	658	44	604	16,5	631	18	655	18
<i>bis</i> -DCM-CH-90	682	25,8	н.р.	–	755	12	672	7,6	н.р.	–	745	0,5
DCM-морфолиновый	н.г.	–	639	13,7	654	36	607	5,2	633	10	654	11,5
<i>bis</i> -DCM-морфолиновый	684	6	н.р.	–	755	7	675	6,3	н.р.	–	748	1,2
DCM-юолидиновый	635	44,5	675	9	695	43,5	635	19,2	675	0,5	694	10
<i>bis</i> -DCM-юолидиновый	635	43,5	675	16	695	43,0	635	14,5	675	1,0	693	15
DCM-доа	611	34,3	635	45,0	656	45	606	18,5	635	24	656	6
<i>bis</i> -DCM-доа	670	13,5	н.р.	–	н.р.	–	657	9,6	н.р.	–	н.р.	–

Примечание. н.р. – не растворяется, н.г. – не генерирует.

среды при фотодеградации красителя связано только с уменьшением концентрации активных молекул. Так как органические красители обычно эффективно генерируют в достаточно широком диапазоне концентраций, незначительное уменьшение концентрации за счет фотораспада не приведет к существенному падению КПД, что обеспечит высокий ресурс работы активной среды. Оцененная генерационная фотостабильность DCM-морфолинового, DCM-доа и DCM-CH-90 при возбуждении излучением XeCl-лазера с концентрацией активных молекул  $10^{-3}$  М составляет 150–200 Дж/см<sup>3</sup> при падении КПД на 20% от начальной величины, что в несколько раз лучше генерационной фотостабильности эффективно генерирующих в красной области спектра родамина 6Ж и феналемина 512.

С использованием методики, описанной выше, были рассчитаны спектры усиления для DCM-CH-90 и генерации для DCM-CH-90 и бис-DCM-CH-90 при накачке излучением Nd-YAG-лазера с  $\lambda = 532$  нм и  $W = 100$  МВт/см<sup>2</sup>.

На рис. 4 приведены спектры коэффициента усиления и генерации DCM-CH-90, полученные численным моделированием, а также спектры поглощения, флуоресценции и генерации, полученные экспериментально [8].

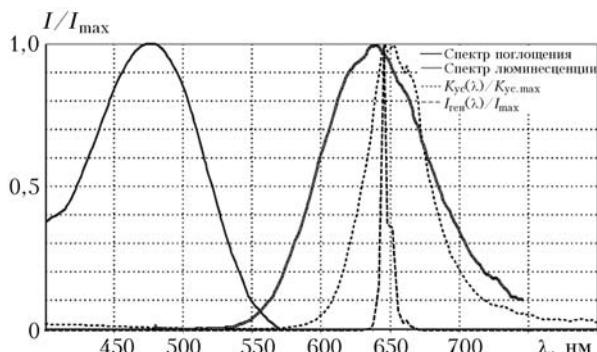


Рис. 4. Экспериментальные (поглощения, флуоресценции и генерации) и теоретические (усиления и генерации) спектры DCM-CH-90. Спектры нормированы.  $K_{yc}$  – коэффициент усиления на длине волны  $\lambda$ ;  $I_{gen}$  – интенсивность генерации

Видно, что максимум коэффициента усиления DCM-CH-90 слегка сдвинут в длинноволновую область относительно максимума спектра флуоресценции ( $\lambda_{yc} \sim 645$  нм). Длина волны генерации совпадает с максимумом спектра коэффициента усиления ( $\lambda_{gen} = 645$  нм).

Таким образом, исследованы фотопроцессы в замещенных пирана при мощном лазерном возбуждении. Выявлены закономерности формирования

вынужденного излучения в DCM-CH-90 и его бис-аналоге. Показана плодотворность использования численного моделирования фотопроцессов в изученных соединениях для понимания особенностей их поглощения излучения в мощных световых полях.

Исследования спектрально-люминесцентных и генерационных свойств нескольких классов органических соединений позволили сформулировать прогностический подход к разработке и созданию новых активных сред на основе многоатомных органических соединений. Последнее оказалось практической помоющей при выборе соединений активных сред лазеров на красителях, способных эффективно генерировать излучение в широком спектральном диапазоне [3, 6–9].

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (госконтракты № П 1128, мероприятие 1.2.1, и № 02.740.11.0444, мероприятие 1.1) и гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ (НШ-4297.2010.2).

- Степанов Б.И., Рубинов А.Н. Оптические квантовые генераторы на растворах органических соединений // Успехи физ. наук. 1968. Т. 95, вып. 1. С. 45–73.
- Артюхов В.Я., Галева А.И. Спектроскопическая параметризация метода ЧПДП // Изв. вузов. Физ. 1986. № 11. С. 96–100.
- Майер Г.В., Базыль О.К., Копылова Т.Н., Кузнецова Р.Т., Риб Н.Р., Соколова И.В. Электронно-возбужденные состояния и фотохимия органических соединений. Новосибирск: Наука, Изд-во СО РАН, 1997. 231 с.
- Артюхов В.Я. Программы расчета молекулярного электростатического потенциала // Ж. структур. химии. 1978. Т. 19, № 3. С. 418–422.
- Майер Г.В. Фотофизические процессы и генерационная способность ароматических молекул. Томск: Изд-во ТГУ, 1992. 268 с.
- Майер Г.В., Артюхов В.Я., Копылова Т.Н., Соколова И.В. Исследование фотопроцессов в сложных органических соединениях // Изв. вузов. Физ. 1998. № 10. С. 84–89.
- Майер Г.В., Копылова Т.Н. Органические материалы для оптических технологий // Изв. вузов. Физ. 2003. № 8. С. 5–13.
- Никонов С.Ю., Артюхов В.Я., Копылова Т.Н. Теоретическое исследование фотопроцессов в сложных органических соединениях при мощном лазерном возбуждении // Изв. вузов. Физ. 2009. № 3. С. 53–60.
- Помогаев В.А., Светличный В.А., Помогаева А.В., Копылова Т.Н. Теоретическое и экспериментальное исследование фотопроцессов в замещенных (дицианометилен)-пирана // Химия высок. энергий. 2005. Т. 39, № 6. С. 403–407.

**V.Ya. Artyukhov, T.N. Kopylova, G.V. Mayer. A combined approach to developing and creating active media of tunable lasers.**

The scientific and practical urgency of studying properties of polyatomic molecules is connected with wide use of organic compounds as a component of active media of lasers. The presented combined approach to developing and creating active media of tunable lasers allows one to obtain new fundamental data about features of energy deactivation of electronic excitation in organic molecules, to predict their properties. By the example of substituted pyrans to the possibilities approach to research of regularities and mechanisms of formation of spectral-luminescent and lasing properties of this class of compounds are shown.