

УДК 535.373+541.572.53

СЕНСИБИЛИЗИРОВАННАЯ БЕНЗОФЕНОНОМ ДОЛГОЖИВУЩАЯ ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ ПРИ КОМНАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ НАФТАЛИНА-d₈ В КОМПЛЕКСЕ С БЕТА-ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ И ЦИКЛОГЕКСАНОМ

© 2019 г. В. Б. Назаров^{a, *}, В. Г. Авакян^{b, c, **}, М. В. Алфимов^{b, c}^aФедеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики РАН
Россия 142432 Черноголовка, просп. Акад. Семенова, 1^bЦентр фотохимии РАН, ФГУ ФНИЦ “Кристаллография и фотоника РАН”
Россия 119421, Москва, ул. Новаторов, 7а, кор. 1^cФедеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Московский физико-технический институт” (Государственный университет)
Россия 141700, Долгопрудный, Институтский пер. 9

*E-mail: vnazarov@icp.ac.ru

**E-mail: avak@photonics.ru

Поступила в редакцию 27.06.2018 г.

После доработки 22.10.2018 г.

Принята к публикации 26.10.2018 г.

Сенсибилизированная фосфоресценция нафталина-d₈ с временем жизни 14.7 с при 22°C получена в супрамолекулярном комплексе “нафталин-d₈-β-циклодекстрин-циклогексан-бензофенон” за счет Т-Т переноса энергии при возбуждении на 365 нм бензофенона. Геометрическая структура этого комплекса, энергии синглетных переходов и силы осцилляторов рассчитаны методами квантовой химии.

Ключевые слова: триплет-триплетный перенос энергии, фосфоресценция при комнатной температуре, комплексы β-циклодекстрина, нафталин-d₈, бензофенон

DOI: 10.1134/S0023119319020116

ВВЕДЕНИЕ

Долгоживущая фосфоресценция аренов при комнатной температуре (ФКТ) привлекает внимание исследователей [1] благодаря возможностям применения в фотовольтаике [2], для создания органических светодиодов (OLEDs) [3] и в хемосенсорике [4, 5]. Максимальное время жизни фосфоресценции аренов наблюдается обычно для замороженных до 77 К растворов аренов, в которых за счет жесткости системы подавляются безызлучательные процессы и тушение кислородом. Однако в последнее время для наблюдения долгоживущей ФКТ с $\tau_{\text{phos}} > 1$ с все чаще прибегают к использованию комплексов типа “гость–хозяин”, в которых излучающая молекула арена, выступающая в качестве “гостя”, имплементирована в полость молекулы “хозяина”. В таком комплексе безызлучательные процессы оказываются в значительной степени подавлены за счет жесткости матрицы “хозяина”. Примером таких матриц являются циклодекстрины (ЦД) и цеолиты. Использование комплексов аренов (нафталин, фенантрен, флуорен) с β- и γ-ЦД позволило получить долгоживущую ФКТ ($\tau_{\text{phos}} > 1$ –10 с). Повышение жесткости матрицы достигалось путем добавления к водному раствору комплекса арен–ЦД насыщенного углеводорода (циклогексан, гексан и др.), что приводит

ло к образованию агрегированного трехкомпонентного комплекса, существовавшего в виде водной суспензии, а связывание растворенного кислорода осуществлялось добавкой сульфата натрия [6–8]. При добавлении адамантана [9] и его производных [10] к комплексу нафталин-d₈–βЦД удалось получить долгоживущую ФКТ ($\tau_{\text{phos}} > 10$ с) даже в присутствии кислорода. Удаление кислорода из образца комплекса нафталин-d₈-βЦД-адамантан привело к росту τ_{phos} до 15 с [9]. Для системы коронен-d₁₂–цеолит ZIF-8 была получена ФКТ со временем $\tau_{\text{phos}} = 22.4$ с при 300 К [11]. В этих работах генерирование ФКТ осуществлялось за счет возбуждения арена на S₁ уровень с последующим заселением триплетного уровня T₁ путем интеркомбинационной конверсии.

Другим путем заселения уровня T₁ является триплет-триплетный (Т-Т) перенос возбуждения по нижним триплетным уровням двух аренов, из которых один является донором (Д) энергии и другой акцептором (А) [11–13]. Последнее, в принципе, возможно при соблюдении следующих соотношений между уровнями энергии Д и А: S₁^Д < S₁^А и T₁^Д > T₁^А. Для полиароматических соединений (нафталин, фенантрен и др.), которые являются акцепторами триплетной энергии, наиболее под-

ходящими донорами энергии являются ароматические кетоны (бензофенон, бензальдегид и др.), обладающие $n-\pi^*$ поглощением в длинноволновой области, где синглет-синглетное поглощение акцепторов энергии отсутствует. Для этих доноров выполняется приведенное выше условие по уровням энергии, причем возбуждение Д приводит к 100% заселению его нижнего триплетного уровня. Ранее Т-Т перенос между бензофеноном и нафталином наблюдался в замороженных растворах при 77 К [12], в примесных кристаллах бензофенон-нафталин [13], а также вследствие внутримолекулярного переноса возбуждения в специально синтезированном линейном углеводороде, содержащем в α -положении бензофеноновый Д, а в ω -положении – нафталиновый А. Д и А заместители были разделены от одной до трех молекул флуорена, которые за счет $\pi-\pi$ стекинг-взаимодействия обеспечивали перенос возбуждения от Д к А [14]. Однако триплет-триплетный перенос энергии в супрамолекулярных системах, в которых возможно образование долгоживущего триплетного состояния аренов при комнатной температуре, остается мало изученным [6].

В настоящей работе, используя добавку бензофенона в качестве донора триплетной энергии, мы попытались осуществить сенсibilизированное генерирование долгоживущей ФКТ нафталина- d_8 , в изученной ранее супрамолекулярной системе нафталин- d_8 - β ЦД. Кроме того, нами были выполнены квантово-химические расчеты на разных уровнях теории структурных моделей предполагаемых комплексов, а также рассчитаны энергии возбуждения и орбитальная структура комплексов.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Вещества и образцы. Нафталин- d_8 (“Изотоп”) очищали возгонкой. Для приготовления комплексов использовали дважды дистиллированную воду, без дополнительной очистки использовали β ЦД (“Aeros organics”), бензофенон (“Реахим” марки ХЧ) и циклогексан “Sigma-Aldrich”. Комплекс нафталин- d_8 - β ЦД готовили путем добавления β ЦД к разбавленному вдвое насыщенному водному раствору нафталина- d_8 . После добавления к этому комплексу циклогексана кювету с образцом помещали на 1 ч в термостат при 50°C с одновременным ультразвуковым облучением. Для приготовления комплекса с бензофеноном навеску последнего добавляли в кювету с водной суспензией комплекса нафталин- d_8 - β ЦД–циклогексан и подвергали воздействию описанной выше процедуры в термостате. Концентрации β ЦД, бензофенона и циклогексана в образцах составляли 10^{-2} М и концентрация нафталина- d_8 10^{-4} М.

Измерения. Спектры электронного поглощения растворов измерены на спектрофотометре Specord M40. Для ограничения светорассеяния при измерении спектров образцы с суспензиями трехкомпо-

нентных комплексов размещали в держателе рядом с ФЭУ. Экспериментальная установка для измерения времени жизни долгоживущей ФКТ [7, 8] была модернизирована добавлением подключенного к ФЭУ усилителя У7-1 и АЦП L-CARD в компьютер. Облучение образцов осуществляли ртутной лампой ДРШ-500 со светофильтрами БС7 + УФС6 для выделения линии 365 нм. Все измерения выполнены при 22°C. Поскольку цель работы состояла в обнаружении сенсibilизированной бензофеноном долгоживущей ФКТ нафталина- d_8 , а сам спектр ФКТ нафталина- d_8 хорошо известен (см. [9, 10]), то для увеличения чувствительности установки регистрировалось время жизни интегральной фосфоресцентной эмиссии нафталина- d_8 .

Квантово-химические расчеты. Оптимизацию геометрии многокомпонентных комплексов циклодекстрина с нафталином, циклогексаном и бензофеноном проводили полуэмпирическим методом РМ6-DH+, параметризованным для получения разумных значений теплот образования (ΔH_f), вклада энергии ван-дер-Ваальсового взаимодействия и водородных связей в полную энергию комплексообразования по программе OpenMopac 2016 [17]. Расчет энергии переходов $S_0 \rightarrow S_1$ для структур комплексов нафталина, циклогексана и бензофенона разного типа, во взаимных расположениях, предварительно зафиксированных расчетом комплексов с циклодекстрином, проводили методом *ab initio* CIS 6-31** с учетом всех однократно возбужденных конфигураций по программе Firefly [18].

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Измерения ФКТ. На первом этапе была предпринята попытка наблюдать Т-Т перенос энергии от бензофенона на нафталин- d_8 непосредственно в комплексе нафталин- d_8 - β ЦД–бензофенон, в котором Д и А находились в непосредственном контакте. Однако в таком комплексе даже при возбуждении нафталина- d_8 в области электронного поглощения вообще не была обнаружена ФКТ, хотя он был приготовлен так же, как и обладающий долгоживущей ФКТ комплекс нафталин- d_8 - β ЦД–циклогексан. Вероятной причиной этого является существование в бензофеноне π -системы, способной к стекинг-взаимодействию с молекулой нафталина- d_8 , что, по-видимому, приводит к увеличению константы скорости перехода. Подтверждением этого, по нашему мнению, является тот факт, что при замене в комплексе бензофенона толуолом ФКТ также отсутствовала, а при замене на *nara*-третбутилтолуол, обладающий объемным заместителем с насыщенными связями, появилась долгоживущая ФКТ комплекса нафталин- d_8 - β ЦД–*nara*-третбутилтолуол.

Поэтому на следующем этапе бензофенон был добавлен к комплексу нафталин- d_8 - β ЦД–циклогексан (I), который всегда демонстрирует долгоживущую ФКТ при возбуждении нафталина- d_8 $S_0 \rightarrow S_1 \sim T_1 \sim \rightarrow$

→ ФКТ [6–8]. Первоначально критерием существования Т–Т переноса энергии с бензофенона на нафталин- d_8 в комплексе нафталин- d_8 – β ЦД–циклогексан–бензофенон (II) считалось наличие длительного свечения в течение нескольких секунд после возбуждения образца в области 330–370 нм, где поглощает бензофенон и нет поглощения $S_0 \rightarrow S_1$ нафталина- d_8 . Длительное свечение могло принадлежать только ФКТ нафталина- d_8 , поскольку время жизни фосфоресценции нафталина- d_8 ($\tau_{\text{phos}} > 10$ с) на три порядка больше τ_{phos} бензофенона (6 мс). Поэтому проверка существования такого переноса осуществлялась на экспериментальной установке измерения времени жизни ФКТ и не требовала измерения спектров фосфоресценции бензофенона и нафталина. Однако неожиданно выяснилось, что при возбуждении светом с $\lambda = 365$ нм долгоживущая ФКТ наблюдается в образце и без добавленного бензофенона, т.е. за счет прямого возбуждения нафталина- d_8 в полосе синглет-триплетного перехода. Поэтому для доказательства существования Т–Т переноса энергии потребовалось сравнение ФКТ, измеренной в одинаковых условиях до и после добавления бензофенона к комплексу I. Такой метод доказательства не использовался раньше [6].

На рис. 1 показана кривая деактивации 1 ФКТ нафталина- d_8 после возбуждения комплекса I светом с $\lambda = 365$ нм. Наиболее вероятной причиной существования ФКТ этого комплекса является слабое поглощение $S_0 \rightarrow T_1$ нафталина- d_8 , поскольку другого пути заселения триплетного уровня нафталина- d_8 при таком возбуждении не существует. Действительно, спектры синглет-триплетного поглощения ароматических кетонов [15] и ароматических углеводородных соединений [16] регистрировались по спектрам возбуждения фосфоресценции в растворах при 77 К.

При возбуждении образца только через светофильтр УФС6, который недостаточно ослабляет свет в области 300–311 нм поглощения нафталина- d_8 , сигнал ФКТ возрастает в 360 раз (спад 2). Поскольку сигнал ФКТ вызван возбуждением на 365 нм через запрещенный переход $S_0 \rightarrow T_1$, необходимо было проверить отсутствие возбуждения ртутными линиями в области синглет-синглетного поглощения нафталина- d_8 при использовании светофильтров БС7 + УФС6.

Спектры поглощения использованных в экспериментах соединений, светофильтров и комплексов приведены на рис. 2. Добавление к светофильтрам БС7 и УФС6 светофильтра на основе водного раствора NiSO_4 , который ослабляет излучение на $\lambda = 365$ нм в 1000 раз, а в области синглет-синглетного поглощения нафталина- d_8 всего в 1.6 раза, приводит к полному подавлению ФКТ. Следовательно, ФКТ комплекса I вызвана не наблюдавшимся ранее возбуждением светом с $\lambda = 365$ нм вне в области синглет-синглетного поглощения нафталина- d_8 .

Добавление бензофенона к комплексу I приводит к образованию комплекса II и увеличению поглощения на 365 нм за счет бензофенона (рис. 2, спектры 6 и 7). Если предположить, что бензофенон не является сенсibilизатором, то вероятность возбуждения нафталина- d_8 на 365 нм должна снизиться за счет поглощения бензофенона, и, следовательно, интенсивность ФКТ в комплексе II должна уменьшиться. Наоборот, увеличенная интенсивность ФКТ комплекса II укажет на то, что бензофенон в нем является сенсibilизатором.

В табл. 1 приведены времена жизни ФКТ комплексов и амплитуды спадов. Из таблицы (первый столбец) видно, что при возбуждении ФКТ с использованием только фильтра УФС6 добавление поглощающего бензофенона приводит к ослаблению амплитуды спада в 1.6 раза. При использовании комбинации фильтров УФС6 + БС7 амплитуда спада ФКТ в комплексе I составляет 0.3 отн. ед., но после добавления бензофенона и образования комплекса II амплитуда ФКТ возрастает в 6 раз. Такой рост свидетельствует о существовании сенсibilизированной бензофеноном фосфоресценции нафталина- d_8 за счет Т–Т переноса энергии в супрамолекулярном комплексе нафталин- d_8 – β ЦД–циклогексан–бензофенон.

Квантово-химические расчеты. С целью выяснения вопроса о механизме передачи возбуждения между Д и А нами был предпринят квантово-химический расчет предполагаемой структуры комплекса II, поскольку только для него наблюдается сенсibilизированная ФКТ. Второй важной задачей было выяснение структуры молекулярных орбиталей, расчет энергий первых синглетных переходов и силы осцилляторов для теоретической оценки вероятности первичного возбуждения инкорпорированного в комплекс бензофенона, являющегося сенсibilизатором ФКТ нафталина.

Расчеты полностью оптимизированных структур (программа MORAC 2016, [17]) показали, что в водном растворе β CD в присутствии указанных органических субстратов могут существовать комплексы двух типов бензофенон–циклогексан–нафталин- d_8 – 2β ЦД ($\text{Bnp}-\text{CH}-\text{NPh}@2\beta\text{CD}$) (IIa) и бензофенон–нафталин- d_8 –циклогексан– 2β ЦД ($\text{Bnp}-\text{NPh}-\text{CH}@2\beta\text{CD}$) (IIб), в которых максимальное расстояние между Д и А не превышает 8 Å. Так как оценка [12] показала, что радиус Т–Т переноса энергии по нижним триплетным уровням составляет 11–13 Å, взаимное расположение Д и А в комплексах IIa и IIб не должно препятствовать переносу триплетной энергии. Заметим, что комплекс IIб (рис. 3б), в котором осуществляется непосредственный контакт нафталина и бензофенона при расстоянии между ними 3.4 Å, термодинамически выгоднее на 12.5 ккал/моль комплекса IIa, где Д и А разделены молекулой циклогексана (рис. 3а).

Поскольку в образцах, где наблюдалась сенсibilизированная ФКТ нафталина- d_8 , бензофенон добавлялся к уже образовавшемуся комплексу I, то

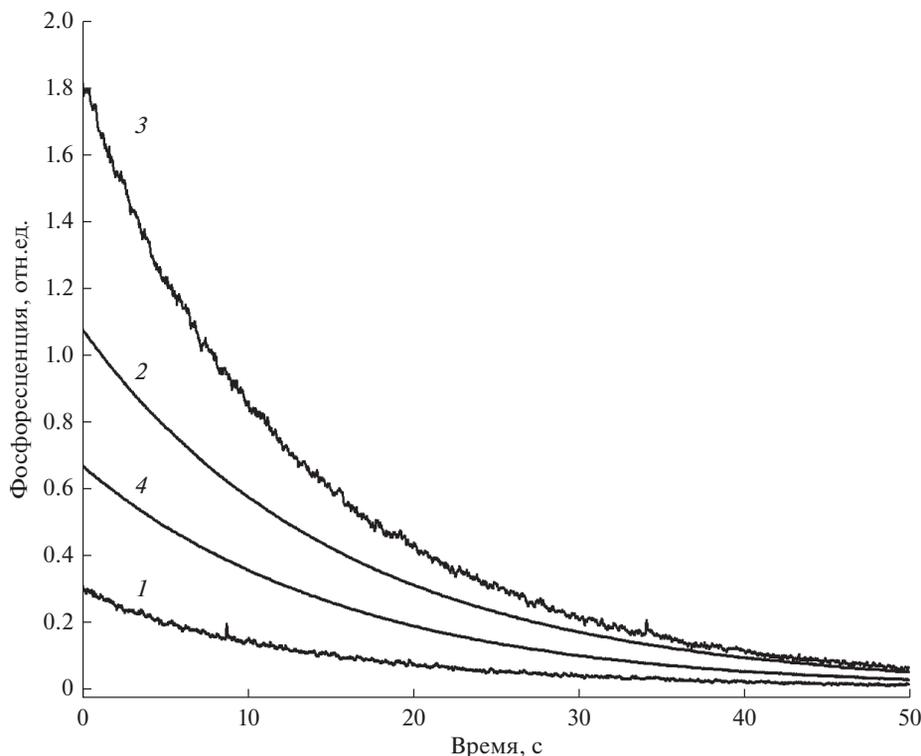


Рис. 1. Кривые деактивации ФКТ нафталина- d_8 после возбуждения светом с $\lambda = 365$ нм комплексов **I** (1) и **II** (3); комплексов **I** (2) и **II** (4) при возбуждении в области синглет-синглетного поглощения нафталина- d_8 и снижении чувствительности регистрации в 100 раз.

более вероятной структурой, в которой осуществляется Т-Т перенос, является комплекс **IIa** (рис. 3а). В нем расстояние между разделенными циклогексаном **D** и **A** составляет 7.6 Å. Как было показано в работе [14], Т-Т перенос энергии осуществляется либо за счет сильно зависящего от расстояния туннельного перехода между молекулами **D** и **A**, либо вследствие слабо зависящего от расстояния многостадийного “прыжкового” процесса. Поскольку в нашем комплексе циклогексан, разделяющий донор и акцептор, не содержит π -связей, то возможность “прыжкового” процесса исключается. Поэтому следует принять, что в комплексе **IIa** Т-Т перенос возбуждения осуществляется по туннельному механизму.

Расчет энергии переходов $S_0 \rightarrow S_n$ ($n = 1-3$) для комплексов $Vn\pi-CH-NPh$ (**IIa'**) и $CH-Vn\pi-NPh$ (**IIб'**) со структурой, которую они имеют в димере βCD (комплексы **IIa** и **IIб**, рис. 3), проведен методом *ab initio* CIS 6-31** с учетом всех однократно

возбужденных конфигураций (программа Firefly [18]). Энергии первых трех переходов, отнесения и силы осцилляторов приведены в табл. 2.

Из табл. 2 видно, что возбуждение $S_0 \rightarrow S_1$ в **IIa'** и **IIб'** соответствует переходам типа $n-\pi^*$ с участием НОМО и LUMO бензофенона (λ_{max} 366 и 364 нм, соответственно), что согласуется с экспериментом (рис. 2). Переходы $S_0 \rightarrow S_2$ и $S_0 \rightarrow S_3$ в **IIa'** и **IIб'** связаны с возбуждением типа $\pi-\pi^*$ нафталина- d_8 . Для первого – это возбуждение НОМО \rightarrow LUMO, для второго НОМО-1 \rightarrow LUMO ($\lambda_{max} = 325$ нм), что близко к первой полосе поглощения нафталина (320 нм [20]). В то же время переход $S_0 \rightarrow S_3$ для **IIб'**, помимо участия $\pi-1-\pi^*$ орбиталей нафталина включает также участие связывающей π^* -орбитали $NPh-Vn\pi$, возникновение которой обусловлено наличием π -стекинга. Все рассчитанные энергии переходов характеризуются очень малыми значениями

Таблица 1. Времена жизни (с) и амплитуды ФКТ спадов (отн. ед.) нафталина- d_8 в комплексах **I** и **II** на рис. 1

КОМПЛЕКС	Время жизни ФКТ, амплитуда/100	Время жизни ФКТ, амплитуда
Нафталин- d_8 - βCD -циклогексан (I)	16.5 ^a , 1.08	16 ^b , 0.3
Нафталин- d_8 - βCD -циклогексан-бензофенон (II)	15.9 ^a , 0.68	14.7 ^b , 1.8

^a возбуждение через один светофильтр УФС6. ^b возбуждение на 365 нм через светофильтры БС7 + УФС6.

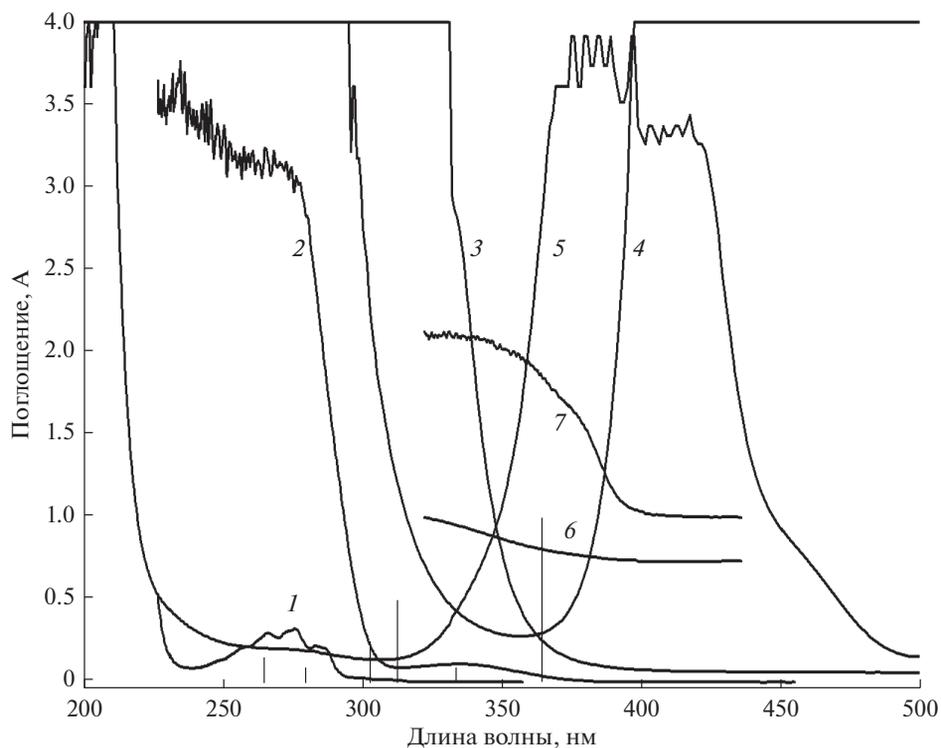


Рис. 2. Спектры поглощения нафталина- d_8 (1) и бензофенона (2) в этанольных растворах, светофильтров BC7-3мм (3), УФС6-5мм (4), водного раствора $NiSO_4$ (5), водной суспензии комплексов I (6) и II (7). Ртутные линии показаны в виде вертикальных линий.

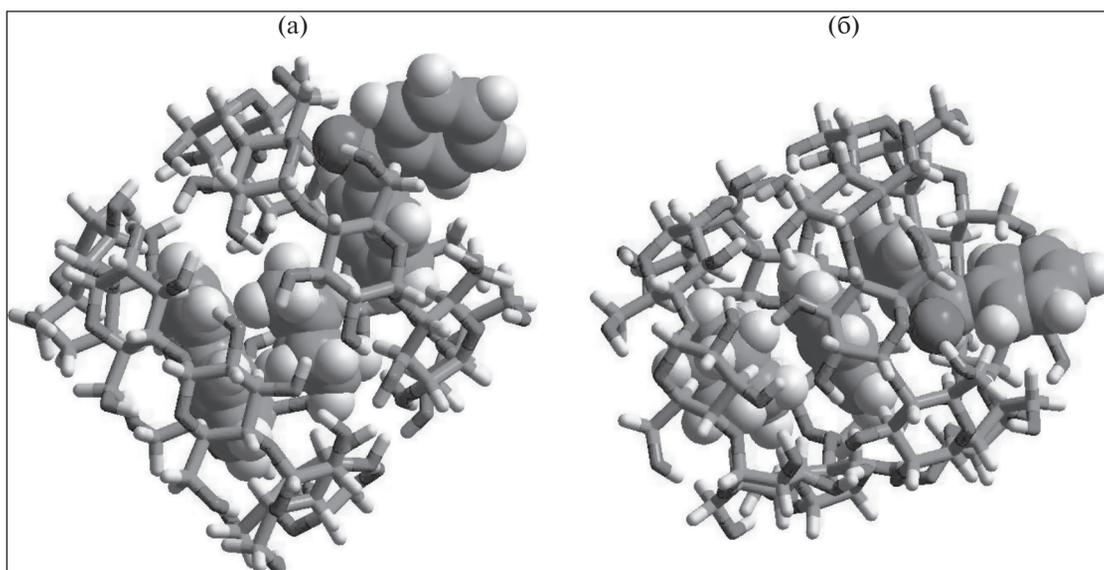


Рис. 3. (а) Структура комплекса $Vnr-CH-NPh@2\beta CD$ (IIа). Расчет PM6-DH+. (б) Структура комплекса $Vnr-NPh-CH@2\beta CD$ (IIб). Расчет PM6-DH+.

сил осцилляторов, что также соответствует эксперименту.

π -Стекинг между нафталином- d_8 и бензофеноном в IIб' влияет следующим образом на характеристики переходов. Хотя максимум первого перехода в IIб' смещен всего на 2 нм в синюю область спектра по сравнению с IIа', более существенным

является снижение на порядок силы осциллятора т.е. вероятности $S_0 \rightarrow S_1$ перехода. Вторым переходом, связанным с возбуждением нафталина, претерпевает красное смещение на 7 нм, величина f этого перехода снижается не существенно. В то же время третий переход претерпевает значительное синее смещение на 23 нм и резко возрастает значение f .

Таблица 2. Рассчитанные методом *ab initio* 6-31** CIS значения максимумов поглощения λ_{\max} , и сил осцилляторов f , $S_0 \rightarrow S_n$ ($n = 1-3$) переходов для тройных комплексов Внр-СН-NPh (IIa') и СН-Внр-NPh (IIб')

Комплекс, n перехода	λ_{\max} , нм ^a	f	Отнесения по орбиталям компонентов и типам переходов
IIa', S_1	366	0.00166	НОМО \rightarrow LUMO, Внр ($n-\pi^*$)
IIб', S_1	364	0.00028	НОМО \rightarrow LUMO, Внр ($n-\pi^*$)
IIa', S_2	333	0.06688	НОМО \rightarrow LUMO, NPh ($\pi-\pi^*$)
IIб', S_2	340	0.04721	НОМО \rightarrow LUMO, NPh ($\pi-\pi^*$)
IIa', S_3	325	0.00049	НОМО \rightarrow LUMO, NPh ($\pi_{-1}-\pi^*$)
IIб', S_3	330	0.00187	НОМО \rightarrow LUMO, NPh ($\pi_{-1}-\pi^*$), NPh + Внр ($\pi_{\text{NPh}} - \pi^* + \pi^*_{\text{NPh} + \text{Внр}}$)

^a Рассчитанные значения λ_{\max} разделены на стандартный масштабирующий коэффициент 0.7 [19].

Таким образом, влияние π -стекинга приводит к перераспределению вероятностей переходов между двумя парами НОМО на LUMO бензофенона: падает вероятность первого $S_0 \rightarrow S_1$ перехода бензофенона, наиболее значимого для запуска процесса Т-Т переноса возбуждения, и растет вероятность высокоэнергетического $S_0 \rightarrow S_3$ перехода при возбуждении нафталина- d_8 , чье влияние на сенсibilизацию не так очевидно. Поэтому отсутствие ФКТ для комплекса нафталин- d_8 - β ЦД-бензофенон связано, в первую очередь, со снижением вероятности поглощения света с $\lambda_{\max} = 365$ нм, инициирующего Т-Т перенос.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сенсibilизированная фосфоресценция нафталина- d_8 с временем жизни 14.7 с при 22°C получена в супрамолекулярном комплексе нафталин- d_8 - β -циклодекстрин-циклогексан-бензофенон за счет Т-Т переноса энергии при возбуждении бензофенона на $\lambda = 365$ нм. Возможная структура этого комплекса рассчитана квантово-химическим методом. Показано, что комплекс нафталин- d_8 -циклогексан-бензофенон, образующийся в водном растворе после добавления бензофенона, помещается внутри димера β -циклодекстрина, обеспечивая достаточную жесткость структуре, ответственной за проявление длительной ФКТ. Поскольку в комплексе донор и акцептор разделены насыщенной молекулой циклогексана, а расстояние между Д и А не превышает 8 Å, Т-Т перенос энергии между ними осуществляется по туннельному механизму.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственным заданиям ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН в части “квантово-химических расчетов”, ИПХФ РАН (№ 01201361847) в части “исследование комплексов “арен-циклодекстрин”, (грант РФФИ-офи_м 16-29-11765) в части “фотохимические исследования”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Liu Y., Zhan G., Liu Z.-W., Bian Z.-Q., Huang C.-H. // Chinese Chemical Letters. 2016. V. 27. № 8. P. 1231.
2. Congreve D.N., Lee J., Thompson N.J., Hontz E., Yost S.R., Reusswig P.D., Bahlke M.E., Reineke S., Voorhis T.V., Baldo M.A. // Science. 2013. V. 340. № 6130. P. 334.
3. Kabe R., Noutsuka N., Yoshida K., Adachi C. // Adv. Mater. 2016. V. 28. № 4. P. 655.
4. Zhang G., Chen J., Payne S.J., Kooi S.E., Demas J.N., Fraser C.L. // J. Am. Chem. Soc. 2007. V. 129. № 29. P. 8942.
5. Shu X.X., Chen Y., Yuan H., Gao S., Xiao D. // Anal. Chem. 2007. V. 79. P. 3695.
6. Назаров В.Б., Герко В.И., Вершинникова Т.Г. // Изв. АН. Сер. хим. 1995. Т. 44. № 10. С. 1966.
7. Назаров В.Б., Герко В.И., Алфимов М.В. // Изв. АН. Сер. хим. 1996. Т. 45. № 4. С. 1014
8. Назаров В.Б., Герко В.И., Алфимов М.В. // Изв. АН. Сер. хим. 1996. Т. 45. № 9. С. 2225.
9. Назаров В.Б., Авакян В.Г., Алфимов М.В., Вершинникова Т.Г. // Изв. АН, Сер. хим. 2003. Т. 52. № 4. С. 869.
10. Назаров В.Б., Авакян В.Г., Багрий Е.И., Вершинникова Т.Г., Алфимов М.В. // Изв. АН. Сер. хим. 2005. Т. 54. № 12. С. 2661.
11. Mieno H., Kabe R., Notsuka N., Allendorf M.D., Adachi C. // Adv. Optical Materials. 2016. V. 4. № 4. P. 1015.
12. Ермолаев В.Л. // Успехи физических наук. 1963. Т. 80. № 1. С. 3.
13. Nakamura T., Hayakawa S. // Japan J. Appl. Physics. 1969. V. 10. № 1. P. 85.
14. Vura-Weis J., Abdelwahed S.H., Shukla R., Rathore R., Ratner M.A., Wasielewski M.R. // Science. 2010. V. 328. P. 1547.
15. Kearns D.R., Case W.A. // JACS. 1966. V. 88. № 22. P. 5087.
16. Marchetti A.P., Kearns D.R. // JACS. 1967. V. 89. № 4. P. 768.
17. openmopac.net/MOPAC2016.html.
18. Firefly, version 8.2.0. © 1994, 2016 by Alex Granovsky. <http://classi.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
19. Broo A., Holmén A. // J. Phys. Chem. A. 1997. V. 101. № 19. P. 3589.
20. Кусаков М.М., Шиманко Н.А., Шишкин М.В. Ультрафиолетовые спектры поглощения ароматических углеводородов. М.: Изд-во АН СССР, 1963.