

**ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ В МОДЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСАХ КЛАСТЕРОВ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТОЧКАМИ\***В.А. Помогаев<sup>1,2</sup>, Х.Д. Ли<sup>2</sup>, Ы. Го<sup>2</sup>, О.Н. Чайковская<sup>1</sup>, А.И. Кононов<sup>3</sup>, П.В. Аврамов<sup>2</sup><sup>1</sup> *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*<sup>2</sup> *Кёнбукский национальный университет, г. Тегу, Республика Корея*<sup>3</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия*

Проведены теоретические расчеты возбужденных состояний в комплексах золотых и серебряных трехатомных нанокластеров с углеродными квантовыми наноточками с использованием функционала *M062X* и гибридного базисного набора *def2svp{H}/def2TZVP/def2TZVPP{Ag,Au}*. Последующий расчет возбужденных состояний выполнен в приближении зависимой от времени теории функционала плотности и реализован в Gaussian09. Хромофорные центры точек моделировались гетероциклическими молекулами изохино-диазаантрацена и бензопиранонафтидина. Кластеры присоединялись к точкам посредством этилмеркаптана и метоксиэтанового мостика различной длины. Рассмотрены каналы переноса энергии в зависимости от взаимного расположения энергетических уровней кластеров и гетероциклов.

**Ключевые слова:** *перенос энергии возбуждения, металлические кластеры, углеродные наноточки, фотофизические процессы.*

**Введение**

Комплексы углеродных квантовых наноточек (УКН) [1] с металлическими наноструктурами, включая наноразмерные кластеры благородных металлов, проявляют уникальные спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства, обусловленные бинарной хромофорной природой таких соединений, когда фотоактивность обоих составляющих проявляется в областях видимых спектральных полос поглощения и излучения, что находит применение в различных отраслях современной научной, производственной и медицинской деятельности для оптических и биоимиджинговых приложений [2–6]. Положение и интенсивность излучательных спектров в значительной степени зависят от химического состава и пространственной структуры УКН, определяющих как скорости безызлучательных переходов и переносов возбужденной энергии между хромофорами, так и квантовый выход люминесценции. Ввиду многообразия конкурирующих взаимодействий хромофоров в условиях жидкой или газовой сред вероятности диссипативных процессов переноса энергии весьма чувствительны к скоростям структурных флуктуаций и преобразований, зависящих от концентрации, температуры, растворителя, pH и других параметров среды. В работе рассчитываются электронно-возбужденные состояния комплексов между модельными трехатомными кластерами золота и серебра и гетероатомными соединениями, моделирующими хромофорный центр УКН. Обсуждаются также вероятности процессов переноса электронного возбуждения в комплексах.

**Моделирование комплексов и методы расчетов**

Модельная бинарная хромофорная система представляет собой трехатомные кластеры благородных металлов (БМК) золота или серебра, либо с этилмеркаптаном (ЗЭТ) или  $-SC_2H_4-$  (СЭТ) группой, либо связанной мостиком с гетероциклическим фрагментом (ГЦФ) (рис. 1 и 2). Возможно также существование двух изолированных систем БМК и ГЦФ, которые потенциально могут формировать как комплексы столкновения в результате теплового движения хромофоров, определяемых параметрами среды, так и координационные структуры по примеру комплексов серебряных кластеров с основаниями ДНК и аминокислотами [7–10]. В работе обсуждаются структуры, соединенные мостиком из метоксиэтановых звеньев до 11, что соответствовало длине от 15 до 42 Å. Представлены также возможные фотофизические процессы, протекающие в системе при отсутствии вышеуказанной связующей цепочки. Комплексы столкновения представляют особый интерес благодаря динамической схеме диссипации энергии возбуждения через процесс переноса

\* Работа поддержана совместным грантом РФФИ-NRF (с российской стороны № 19-53-51005 NIF\_a, с корейской стороны NRF-2019K2A9A1A06100125).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала  
**«Известия высших учебных заведений. Физика»**  
осуществляется на платформе  
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU  
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>