

ПРИРОДА ДВУХПОЛОСНОЙ ЭМИССИИ ОКТАЭДРИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ Cu_4I_4

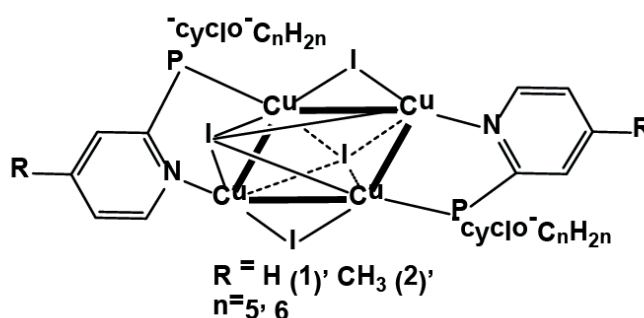
Герасимова Т.П.,^a Шамсиева А.В.,^a Стрельник И.Д.,^a Колесников И.Е.,^b Кацюба С.А.,^a
Мусина Э.И.,^a Карасик А.А.,^a Синяшин О.Г.^a

^a Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,
Арбузова, 8, 420088, Казань, Россия, e-mail: tatyanaagr@gmail.com

^b Ресурсный центр "Оптические и лазерные методы исследования веществ", Научный парк СПбГУ,
Университетская набережная, 7-9, 199034 Санкт-Петербург, Россия

Люминесцентная термометрия (ЛТ) является одной из перспективных бесконтактных техник благодаря простоте и неинвазивности. Один из подходов ЛТ основан на использовании температурной зависимости соотношения двух полос эмиссии, что может быть достигнуто либо путем комбинирования двух люминофоров, либо с использованием одного люминофора, проявляющего две полосы эмиссии. Среди последних значительный интерес вызывают полиядерные комплексы меди (I) благодаря большим стоксовым сдвигам, длинным временам жизни и высоким квантовым выходам при комнатной температуре.

Недавно были синтезированы комплексы меди (I) с октаэдрическим типом ядра Cu_4I_4 . Было показано, что полученные комплексы проявляют температуру-зависимую двухполосную эмиссию.¹



Квантово-химически были найдены структуры двух нижних триплетных уровней, T_1 and T_2 . Согласно расчетам, высшие занятые молекулярные орбитали обоих триплетов локализованы на металло-галогенидном ядре, а нижние свободные молекулярные орбитали – на пиридинах. Таким образом, обе полосы эмиссии имеют ${}^3(X+M)LCT$ характер.

Acknowledgements

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 19-13-00163.

Авторы благодарят ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН за проведенные физико-химические исследования полученных структур.

Литература

1. Musina, E.I.; Shamsieva A.V.; Strel'nik I.D.; Gerasimova T.P.; Krivolapov D.B.; Kolesnikov I.E.; Grachova E.V.; Tunik S.P.; Bannwarth C.; Grimme S. *Dalt. Trans.* 2016, 45, 2250–2260.