

## ПРИРОДА ДВУХПОЛОСНОЙ ЭМИССИИ ОКТАЭДРИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ $Cu_4I_4$

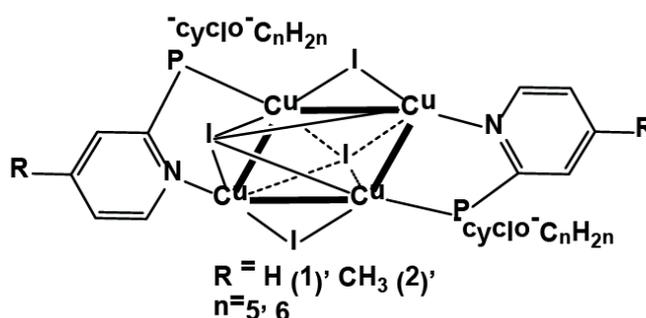
Герасимова Т.П.,<sup>a</sup> Шамсиева А.В.,<sup>a</sup> Стрельник И.Д.,<sup>a</sup> Колесников И.Е.,<sup>b</sup> Кацюба С.А.,<sup>a</sup>  
Мусина Э.И.,<sup>a</sup> Карасик А.А.,<sup>a</sup> Синяшин О.Г.<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> 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.<sup>1</sup>



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.