

---

# SENSORS DESIGN AND MATHEMATICAL MODELING

---

## ПРОЕКТУВАННЯ І МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СЕНСОРІВ

---

---

PACS 32.18Md; УДК 539.186

### ПРОЦЕССЫ РЕЛАКСАЦИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

*Т. Н. Сакун*

Национальный авиационный университет, пр. Комарова, 16, 03208, г. Киев, Украина  
(tasa2008@ukr.net )

### ПРОЦЕССЫ РЕЛАКСАЦИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

*Т. Н. Сакун*

**Аннотация.** В работе проведены исследования частотной и температурной зависимости квантового выхода фотодиссоциации молекул метиленового голубого и резазурина в твердом полимерном растворе. Найдена эмпирическая зависимость константы скорости релаксации возбуждения от разности энергий между возбужденными состояниями и температуры:

$k_{mn} = k_0 \cdot \exp(-b \cdot \frac{\Delta E_{mn}}{kT})$ , где  $b = 0,1$ . Моделирование процессов релаксации позволило показать,

что экспериментальные результаты можно описать, если предположить, что в формировании полос ультрафиолетового поглощения принимают участие не только электронно-колебательные состояния, но и взаимодействие этих состояний с фононами матрицы растворителя. В итоге получена теоретическая зависимость, адекватно описывающая экспериментальные результаты.

**Ключевые слова:** релаксация возбуждения, фотодиссоциация молекул метиленового голубого и резазурина

### ПРОЦЕСИ РЕЛАКСАЦІЇ ЗБУДЖЕННЯ В МОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМАХ ПРИ РІЗНИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

*Т. М. Сакун*

**Анотація.** У роботі проведені дослідження частотної і температурної залежності квантового виходу фотодисоціації молекул метиленового блакитного і резазурина в твердому полімерному розчині. Знайдена емпірична залежність константи швидкості релаксації збудження від різниці

енергій між збудженими станами і температури:  $k_{mn} = k_0 \cdot \exp(-b \cdot \frac{\Delta E_{mn}}{kT})$ , де  $b = 0,1$ . Моделювання

процесів релаксації дозволило показати, що експериментальні результати можна описати, якщо припустити, що у формуванні смуг ультрафіолетового поглинання беруть участь не тільки електронно-коливальні стани, але і взаємодія цих станів з фононами матриці розчинника. У підсумку отримана теоретична залежність, яка адекватно описує експериментальні результати.

**Ключові слова:** релаксація збудження, фотодісоціація молекул метіленового блакитного і резазуріна

## PROCESSES OF EXCITATION RELAXATION IN MOLECULAR SYSTEMS FOR DIFFERENT TEMPERATURES

*T. N. Sakun*

**Abstract.** In the work studying frequency and temperature dependence of quantum output of the methylene blue molecules and rezazurine molecules in the solid polymer solution are carried out. It has been found an empirical dependence for the constant of speed of excitation relaxation on

difference between excited states and temperature:  $k_{mn} = k_0 \cdot \exp(-b \cdot \frac{\Delta E_{mn}}{kT})$ , where  $b = 0,1$ . Modelling

the processes of excitation relaxation allows to show that the experimental results can be described in supposing that not only electron-vibrational states, but interaction of these states with phonons of the solvent matrix participate in forming the UV absorption bands. As a result, it is obtained the theoretical dependence, which adequately describes the experimental results.

**Keywords:** excitation relaxation, photodissociation of the methylene blue and rezazurine molecules

**Введение.** Поведение молекул в высоковольтных состояниях является актуальной фундаментальной проблемой современной физики и техники. К этому времени процессам релаксации возбуждения молекул уделялось очень мало внимания. Считалось, что неуклонно работают законы фотохимии и, в частности, четвертый закон, который гласит, что в подавляющем большинстве фотохимических процессов, протекающих в растворах органических молекул, участвуют только возбужденные в  $S_1$  или  $T_1$  состояния молекулы [1].

Длительное время считалось, что так и должно быть, поскольку релаксационные процессы в основном являются быстрыми и неравновесными, а все возможные равновесные процессы могут происходить только при участии  $S_1$  или  $T_1$  состояний молекулы. И это несмотря на то, что факт выцветания красителей на тканях под действием солнечного излучения общеизвестен. Впоследствии появились

экспериментальные данные, показывающие, что процессы релаксации возбуждения не мешают протеканию важных для науки и практики процессов в высоковольтных состояниях: генерации носителей тока, фотохимических и радиационно-химических процессов и т. п.

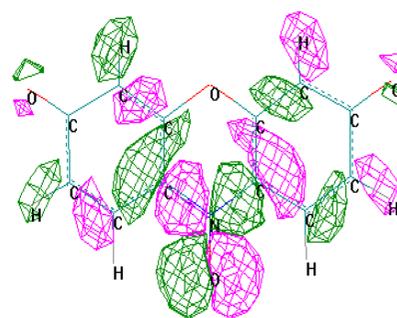
Проведенные исследования фотохимических процессов в молекулах красителей [2-4, 11], показали, что краситель не имеет фотохимической активности в длинноволновой полосе поглощения (красная область спектра) при низких интенсивностях возбуждения, однако имеет фотохимическую активность при высоких интенсивностях (двухквантовые процессы) света видимого диапазона, или при произвольных интенсивностях в ультрафиолетовой области спектра ( $\lambda \leq 330$  нм). Итак, фотохимические превращения молекулы осуществляются в высоковольтных состояниях.

В этих исследованиях установлено, что облучение растворов красителей монохроматическим светом с  $\lambda = 313\div 254$  нм сопровождаются линейными фотохимическими процессами. Кроме того, показано, что линейный фотохимический процесс при облучении светом с  $\lambda \geq 365$  нм отсутствует.

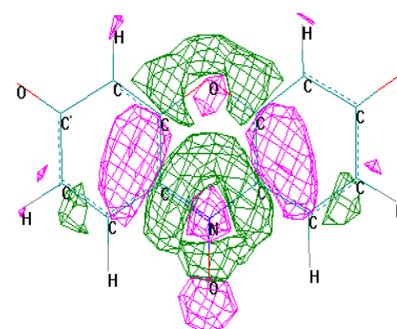
**Механизмы фотохимической активности молекул в высоковозбужденных состояниях.** Из наших работ [4, 10] известно, что в растворах резазурина фотохимические превращения приводит к разрыву связи N-O. Эта связь образована в результате взаимодействия полностью занятой n-молекулярной орбитали (n-MO), локализованной на атоме азота, и полностью свободной p- атомной орбитали (p-AO), локализованной на возбужденном атоме кислорода. Такого типа связи характерны для экзотической молекулы XeO<sub>3</sub> (связи типа Xe-O). При этом оказалось, что среди возбужденных состояний молекулы метиленового голубого или резазурина существует  $\sigma^*$ - состояние, потенциальная поверхность которого диссоциативная (рис.1). Расчет с использованием метода AM1 [12] показал, что существует единственный квантовый переход, который может вызвать диссоциацию молекулы, это переход с  $\sigma$ -МО № 36 на  $\sigma^*$ - МО № 47 [10]:

Этот факт приводит к тому, что возбуждение молекулы в это состояние непременно вызовет ее диссоциацию с квантовым выходом  $\phi \approx 1$ , поскольку в этом состоянии отсутствует потенциальная яма, которая была бы способна затормозить процесс диссоциации и тем самым снизить величину квантового выхода фотодиссоциации.

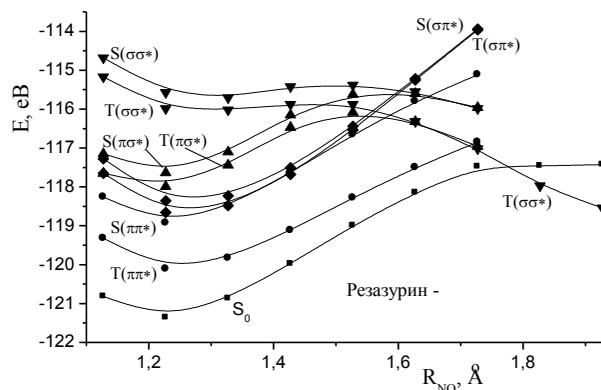
В табл. 1 приведены параметры квантовых переходов в анионе резазурина. Из таблицы следует, что существуют квантовые переходы как в низкоэнергетической области спектра, так и в высокоэнергетической области ( $\lambda < \lambda_{кр} = 330$  нм). Конечно, существует еще много квантовых переходов, ответственных за полосы поглощения резазурина в области  $\lambda < 270$  нм. Исследование величины квантового выхода фотодиссоциации резазурина в твердом полимерном растворе (использовался поливинил-



$\sigma$  - МО № 36



$\sigma^*$ - МО № 47



**Рис. 1. Энергетическая диаграмма аниона резазурина (расчет по методу AM1).**

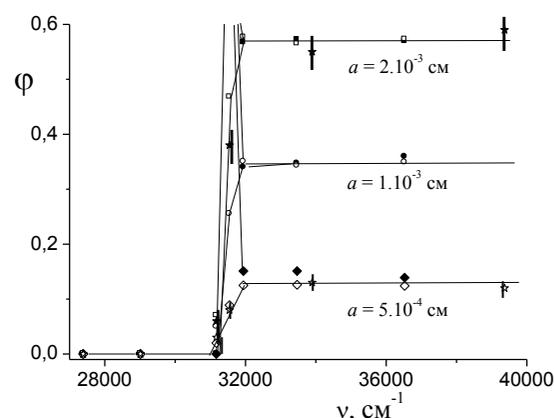
пирролидон - ПВП) в зависимости от длины волны возбуждения показало, что величина квантового выхода почти не зависит от длины волны в области  $\lambda < 330$  нм (рис. 2) и составляет при комнатной температуре  $0,15 \pm 0,03$ , а при 77 К -  $0,55 \pm 0,05$ . Поскольку процессы фотодиссоциации происходят в высоковозбужденных состояниях, необходимо прежде всего понять, почему возбуждение из высших состояний не релаксирует неравновесным образом в  $S_1$  - состояние. Если полное время релаксации возбуждения с  $S_n$  ( $n > 1$ ) в  $S_1$  - состо-

яние взять равным 5 пс (обычно эта величина для разных молекул лежит в пределах  $10^{-11} \div 10^{-13}$  с), а разность энергий  $E_n - E_1 = 25000 \text{ см}^{-1}$ , то при равномерном заполнении промежутка колебательными состояниями с  $n = 100 \text{ см}^{-1}$  (период колебания  $T = 3 \cdot 10^{-13}$  с) таких состояний будет  $m=250$  и среднее время пребывания возбуждении вблизи колебательного состояния составит  $\Delta t = 2 \cdot 10^{-14}$  с, то есть в 15 раз меньше периода колебания.

Таблица 1.

**Синглет-синглетные квантовые переходы в анионе резазурина (AM1)**

№	Квантовый переход	$\lambda$ , нм,	$\nu$ , $\text{см}^{-1}$	Сила осцилятора
1	42 $\rightarrow$ 43 ( $\pi \rightarrow \pi^*$ )	635	15737	0.7358
2	36 $\rightarrow$ 43 ( $\sigma_{\text{NO}} \rightarrow \pi^*$ )	453	22072	0.0000
3	42 $\rightarrow$ 47 ( $\pi \rightarrow \sigma_{\text{NO}}^*$ )	445	22463	0,0000
4	38 $\rightarrow$ 43 ( $\pi \rightarrow \pi^*$ )	444	22498	0,0000
5	42 $\rightarrow$ 47 ( $\pi \rightarrow \sigma_{\text{NO}}^*$ ) 36 $\rightarrow$ 43 ( $\sigma_{\text{NO}} \rightarrow \pi^*$ )	436	22957	0,0000
6	42 $\rightarrow$ 44 ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ) 42 $\rightarrow$ 45	421	23770	0.0682
7	42 $\rightarrow$ 46, ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ) 41 $\rightarrow$ 44	398	25102	0.0101
8	41 $\rightarrow$ 43, ( $\pi \rightarrow \pi^*$ )	379	26393	0.1049
9	41 $\rightarrow$ 47 ( $\pi \rightarrow \sigma_{\text{NO}}^*$ ) 40 $\rightarrow$ 47	365	27388	0.0042
10	42 $\rightarrow$ 44, ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ) 42 $\rightarrow$ 45	345	29014	0.0758
11	40 $\rightarrow$ 43 ( $\pi \rightarrow \pi^*$ )	321	31174	0.3329
12	36 $\rightarrow$ 47 ( $\sigma_{\text{NO}} \rightarrow \sigma_{\text{NO}}^*$ )	317	31546	0.1709
13	42 $\rightarrow$ 48 ( $\pi \rightarrow \pi^*$ )	313	31942	0.2129
14	40 $\rightarrow$ 44, ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ) 37 $\rightarrow$ 43	299	33469	0.2128
15	41 $\rightarrow$ 44, ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ) 37 $\rightarrow$ 43	274	36524	0.7375



**Рис. 2. Зависимости квантового выхода фотодиссоциации резазурина в ПВП от частоты света возбуждения, полученные при различных величинах параметра теории  $a$ . Звездочками с вертикальными линиями, соответствующие погрешностям эксперимента, нанесены экспериментальные данные  $\Phi(\nu)$  по величине квантового выхода фотодиссоциации резазурина в ПВП при 300 К (нижняя зависимость) и 77 К (верхняя зависимость).**

Из соотношения неопределенностей находим  $\Delta E = 270 \text{ см}^{-1}$ , то есть, мгновенное состояние очень размыто по шкале энергий. Разумеется, при таких соотношениях  $\Delta E$  и энергии одного колебания процесс релаксации не может быть равновесным.

Возбуждение не будет ощущать дискретную энергетическую структуру и быстро релаксирует в нижнее возбужденное состояние. Остается единственное требование, чтобы произошла конверсия возбуждения с  $S_n$ -состояния сразу в колебательное  $S_1(m)$ -состояние ( $m$  - номер колебательного состояния). Низкоэнергетические колебания, как правило, делокализованы по всей молекуле. В этом случае волновые функции одного и того же колебательного состояния различных молекул в молекулярном кристалле существенно перекрываются. Поэтому между соответствующими колебаниями соседних молекул будет наблюдаться сильная связь, что и обусловит малое время релаксации.

Процесс неравновесной релаксации возбуждения напоминает поток воды из крана. С удалением от крана сплошной поток истончается, а затем силы поверхностного натя-

жения разрывают поток на отдельные капли. Имеем макроскопическое квантование потока (легко убедиться, что вся капли одинаковы). Аналогично, при неравновесной релаксации возбуждения энергия сначала рассеивается сплошным потоком, а затем благодаря молекулам окружения разрывается на кванты, которые и поглощаются молекулами окружения. Однако, неравновесная релаксация возможна лишь в том случае, когда есть возможность утечки энергии на возбуждение других молекул. Молекулы окружения (твердого или жидкого растворителя) и будут ответственными за квантование сплошного потока энергии. В вакууме безызлучательный процесс релаксации молекулы из высоковозбужденных состояний нереальный.

Если же промежуток  $E_n - E_1$  заполнен колебательными состояниями с  $n = 1000 \text{ см}^{-1}$  ( $T = 3 \cdot 10^{-14} \text{ с}$ ), тогда таких состояний будет только 25 со средним временем пребывания молекулы в одном состоянии  $\Delta t = 2 \cdot 10^{-13} \text{ с}$ , а неопределенность энергии составит  $\Delta E = 27 \text{ см}^{-1}$ . Такой процесс уже не будет неравновесным, поскольку в каждом состоянии система способна сделать около 7 полных колебаний, прежде чем передаст энергию колебания при соприкосновении с соседней молекулой. В этом случае передача энергии сразу осуществляется квантовым образом. Итак, теперь мы имеем дело с квазиравновесным процессом релаксации.

Относительно длительное время пребывания в колебательном состоянии обусловлено тем, что высокочастотные колебания локализованы на отдельных связях в молекуле, в результате чего волновые функции колебательного состояния различных молекул очень слабо перекрываются и вероятность переноса энергии колебания будет уменьшенной.

Примем за аксиому тот факт, что с  $n$ -го электронного возбужденного состояния молекула не может релаксировать непосредственно в  $S_1$  - состояние. Это следует из того, что при больших разностях энергии между  $S_1$  и  $S_2$ - состояниями, что характерно для полиметиновых красителей, внутренняя конверсия имеет малую вероятность, поэтому всегда наблюда-

ется  $S_2 \rightarrow S_0$  - флуоресценция [6, 7]. С другой стороны, релаксация (внутренняя конверсия)  $S_n \rightarrow S_1$  может протекать только благодаря изоэнергетическому переходу с  $S_n(0)$  в  $S_1(m)$  состояние. Вероятность конверсии  $p$  можно найти, если известен оператор возмущения  $\hat{p}$ , вызывающий конверсию

$$p = \left| \int \psi_{S_n} \hat{p} \psi_{S_1} dV \right|^2$$

Используя приближение Борна - Оппенгеймер, имеем  $\psi_{S_i} = \chi_{S_i} \varphi_{S_i}$ , где  $\varphi$  и  $\chi$  - волновые функции электронного и колебательного состояний, находим

$$p = \left| \int \varphi_{S_n} \hat{p} \varphi_{S_1} dV_e \int \chi_{S_n} \chi_{S_1} dV_v \right|^2. \quad (1)$$

т.е. величина  $p$  будет определяться интегралом перекрывания колебательных функций.

Таким образом, вероятность внутренней конверсии определяется интегралом перекрывания колебательных состояний [8, 9]. Поскольку волновая функция  $m$ -го колебательного состояния в своих пределах ( $m - 1$ ) раз меняет знак, то с увеличением квантового числа  $m$  величина интеграла перекрытия, а значит и вероятности квантового перехода будет быстро уменьшаться. Такой процесс релаксации возбуждения не должен зависеть от температуры [8], поскольку колебательные состояния существуют при произвольной температуре.

Известен и зависящий от температуры релаксационный процесс. Он реализуется в случае пересечения конфигурационных кривых верхнего и нижнего возбужденных состояний, так что реализуется процесс преддиссоциации (переход из одного состояния в другое через потенциальный барьер) [8].

Приведенные оценки показывают, что релаксация возбуждения молекул происходит исключительно с участием всех электронных состояний молекулы, которые лежат между  $S_n$  и  $S_1$ - состояниями. Конечно, время жизни молекулы в том или ином промежуточном состоянии будет зависеть от расстояния до ближайшего нижнего состояния, а также от вероятности безызлучательного квантового перехода между этими состояниями. Итак, следует ожидать, что на отдельных участках

релаксация возбуждения будет представлена квазиравновесным процессом, а на других - неравновесным. В частности, процесс будет неравновесным в том случае, когда энергетическая поверхность низшего сословия будет пересекаться с поверхностью высшего состояния в окрестности ее минимума. Часто такими оказываются процессы перехода из связующего возбужденного состояния в диссоциативное состояние.

Ни один из названных случаев релаксации возбуждения не соответствует экспериментальным результатам, полученным на красителях [10], поскольку, как следует из рис. 2, константа скорости релаксации возбуждения между всеми высоковозбужденными состояниями зависит от температуры. Константу скорости процессов релаксации, следуя за авторами монографии [8], мы рассчитывали по формуле:

$$k_{mn} = k_0 \cdot \exp(-a \cdot \Delta E_{mn}), \quad (2)$$

где  $a = \text{const}$ . Величина  $k_0$  будет определяться интегралом перекрытия колебательных функций соответствующих состояний. Однако, в своих расчетах мы ввели дополнительное приближение:  $k_0 = \text{const}$ . Кроме того, мы учли только релаксацию с участием синглетных состояний. Из формулы (2) видно, что при больших значениях константы  $a$  релаксационные процессы возможны только между соседними энергетическими состояниями, в то время как при малых значениях этой константы возможны безызлучательные переходы между всеми удаленными энергетическими состояниями. Если в первом случае возбуждение релаксирует к диссоциативному состоянию, то произойдет диссоциация молекулы с высоким квантовым выходом (теоретически близким к единице). Во втором случае будет наблюдаться большая эффективность релаксации возбуждения, минуя диссоциативное состояние, что повлечет значительное снижение квантового выхода диссоциации.

Варьируя величину  $a$ , мы находили зависимости квантового выхода фотодиссоциации резазурина от длины волны возбуждения, а затем сравнивали с экспериментально полученными результатами (рис. 2). Такое сравнение

показало, что введенные нами дополнительные приближения удовлетворительно описывают экспериментальные результаты.

Понижение температуры приводит к уменьшению перекрытия полос поглощения и, как следствие, к увеличению величины квантового выхода фотодиссоциации.

Анализируя рис. 2, мы сделали интересный вывод, который заключается в том, что величину константы  $a$  можно представить в форме

$$a = \frac{b}{kT}. \quad (3)$$

Поскольку при комнатной температуре  $kT = 200 \text{ см}^{-1}$ , в то время как величина константы  $a = 5 \cdot 10^{-4}$ , то величина  $b = 0,1$  - безразмерная величина.

Таким образом, квазиравновесные процессы релаксации, как и процессы термодинамического равновесия заселения высших энергетических состояний, описываются больцмановским фактором, однако в степени 0,1.

Для того, чтобы понять физические процессы, ответственные за температурную зависимость константы скорости релаксации, мы в деталях рассмотрели процессы безызлучательного переноса энергии между возбужденными состояниями молекулы.

Известно [9], что вероятность безызлучательного переноса энергии возбуждения молекулы, записанную выше через волновые функции состояний, между которыми происходит перенос энергии, определяется интегралом перекрытия спектров излучения (или поглощения) донора энергии и поглощения акцептора энергии. Поскольку при квазиравновесной релаксации возбуждение успевает локализоваться на чисто электронном состоянии  $S_n(m=0)$ , то интеграл перекрытия будет пропорциональным величине коэффициента поглощения в полосах, которые относятся к нижним состояниям, на частоте, соответствующей  $S_n(m=0)$  - состоянию. Соответствующий расчет показал, что гауссова или лоренцова форма полос поглощения не дает возможности получить найденные экспериментально зависимости константы скорости релаксации от температуры.

Для того, чтобы получить зависящую от температуры константу скорости релаксации возбуждения, необходимо предположить, что не только колебательные состояния молекулы, а и фононы принимают активное участие в формировании полос поглощения. А поскольку заселенность фононных состояний зависит от температуры согласно выражению

$$n(\nu) = A \cdot \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right), \quad (4)$$

где  $A$  - постоянная величина, то эта функция будет участвовать в формировании высокоэнергетического края полосы поглощения  $S_l$  - состояния ( $l < n$ ). В таком случае величина константы скорости релаксации возбуждения будет определяться выражением

$$k_{nl} = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_n - E_l}{kT}\right) = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E_{nl}}{kT}\right). \quad (5)$$

Заметное отличие между экспериментальными полученными зависимостями (формулы (2) и (3)) и теоретической формулой (5). Однако, формула (5) не учитывает наличия колебательных состояний, формирующих колебательные повторения чисто электронного перехода. Будем считать, что в формировании коротковолновой части электронно-колебательной полосы поглощения также участвуют фононы. В таком случае для полосы  $i$ -го колебательного повторения  $E_{vi}$  формула (5) будет иметь вид:

$$k_{nli} = k_{0i} \cdot \exp\left(-\frac{E_n - E_l - E_{vi}}{kT}\right) = k_{0i} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E_{nl} - E_{vi}}{kT}\right). \quad (7)$$

$$E_n - E_l - E_{vi} > 0.$$

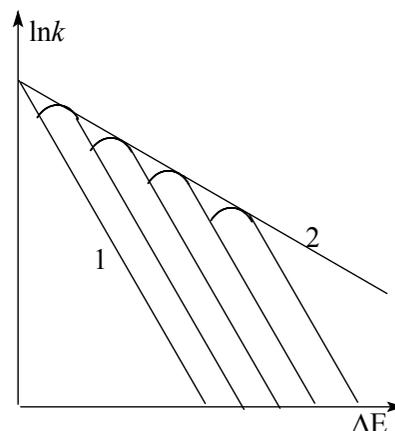
Собирая все колебательные повторения одного и того же электронного состояния, получим

$$k_{nl} = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E_{nl}}{kT}\right) \cdot \left(1 + \sum_{E_{vi} < \Delta E_{nl}} \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_0} \cdot \exp\left(\frac{E_{vi}}{kT}\right)\right), \quad (8)$$

где  $\varepsilon_i$  - коэффициент экстинкции в чисто электронном переходе и в колебательных повторениях.

Как следует из формулы (8), на частотную зависимость (5) накладывается ряд ступенек

колебательных повторений, которые в сумме существенно уменьшают величину энергии, что экспериментально было воспринято как появление постоянного коэффициента  $b = 0,1$  (рис.3).



**Рис.3.** Зависимость величины константы скорости безызлучательного процесса от энергетического расстояния между высоковозбужденными электронными состояниями: 1 - без учета электронно-колебательных состояний; 2 - с учетом наличия электронно-колебательных состояний между электронными состояниями.

**Выводы.** На основании результатов экспериментальных и теоретических исследований температурной зависимости квантового выхода фотодиссоциации молекул красителей в высоковозбужденных состояниях в работе сделаны следующие выводы.

1. Перекрывание полос поглощения, соответствующих возбуждению молекулы в высоковозбужденные состояния, не может объяснить результаты эксперимента по температурной зависимости константы скорости безызлучательных переходов, если форма полос поглощения описывается формулами Гаусса или Лоренца.

2. Показано, что учет электрон-фононного взаимодействия позволяет качественно объяснить экспериментально полученные результаты по частотной и температурной зависимости константы скорости безызлучательных переходов между возбужденными состояниями.

3. Учет электронно-колебательных полос поглощения позволяет полностью согласовать экспериментальные и теоретические результаты, согласно которым константу скорости бе-

ызлучательных переходов можно описать

формулой  $k_{mn} = k_0 \cdot \exp(-b \cdot \frac{\Delta E_{mn}}{kT})$ , где  $b = 0,1$ .

### Список использованной литературы

1. Кондратенко П. О. Фотохімічна дія світла. / (Навчальний посібник) Київ: Видавничо-поліграфічний центр „Київський університет”. - 2005. - 401С.
2. Кондратенко П. О., Лопаткін Ю. М. Одно- та двоквантові процеси в твердих розчинах барвників. // Фізика і хімія твердого тіла. - 2004. - Т.5, № 3. - С.474-480
3. Кондратенко П. А., Максимюк В. А., Танцюра Л. Я. Двухквантовые процессы в метиленовом голубом в фототермопластической среде // Химическая физика. - 1983. - № 7. - С.955-962.
4. Кондратенко П. О., Лопаткін Ю. М., Сакун Т. М. Процеси релаксації в високозбуджених молекулах резазурину // Фізика і хімія твердого тіла. - 2007. - Т.8, № 1. - С.100-108.
5. Knuts S., Minaev B. F., Agren H., Vahtras O. The phosphorescence of benzene obtained by ab initio and semi-empirical calculations // Theoretica Chimica Acta. - 1994. - Vol. 87, № 4-5. - P. 343-371.
6. Турро Н. Молекулярная фотохимия. М.: Мир.-1967.-328С
7. Тихонов Е. А., Пржонская О. В., Шпак М. Т. Поглощение и флуоресценция при переходах из высоковольтных возбужденных электронных состояний полиметиновых красителей. // Квантовая электроника. - 1987. - N 10. - С. 92-108.
8. Ермолаев В. Л., Бодунов Е. Н., Свешникова Е. Б., Шахвердов Т. А. / Безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения / Л.; Наука. - 1977. - 312 С.
9. В. М. Агранович, М. Д. Галанин. Перенос энергии электронного возбуждения в конденсированных средах. / М.: Наука. - 1978. - 383С.
10. Кондратенко П. О., Лопаткін Ю. М., Сакун Т. М., Квazірівноважні процеси в високозбуджених молекулах резазурину // Журнал нано- та електронної фізики. - 2012. - Том 4, № 2. - С. 02017-1 - 02017-7.
11. Смирнов В. А., Бричкин С. Б., Алфимов М. В., Тылтина Л. И., Авраменко Л. Ф., Фотолиз азидов. Фотодиссоциация пара-азидомалахитового зеленого // Химия высоких энергий. - 1979 - том 13, № 2. - С.156-160.
12. Glushkov A. V., Kondratenko P. A., Lepikh Ya. I., Fedchuk A. P., Svinarenko A. A., Lovett L., Electrodynamical and quantum - chemical approaches to modelling the electrochemical and catalytic processes on metals, metal alloys and semiconductors//Int. Journ. of Quantum Chemistry.-2009.- Vol.109,N14.-P.3473-3481.
13. Dewar M. J. S., Zorbisch E. G., Healy E. F., Stewart J. J. P., AM1: a new general perpos quantum mechanical molecular model// J.Amer. Chem. Soc.-1985.-Vol.107,N13.-P.3902-3909.

Стаття надійшла до редакції 28.04.2014 р.