

**КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ПАРАМЕТРОВ НАНОФОТОННОГО СЕНСОРА ПРИ ДЕТЕКТИРОВАНИИ 3,4-БЕНЗПИРЕНА****Введение**

3,4-бензпирен (БП)  $C_{20}H_{12}$  относится к химическому классу полициклических (многоядерных) ароматических углеводородов (ПАУ). ПАУ представляют собой кристаллические вещества мало или практически не растворимые в воде. Они способны к биоаккумуляции в живых организмах и донных отложениях водных сред и имеют выраженную канцерогенную активность. Источником БП являются продукты сгорания автомобильного, воздушного и судозводного транспорта, асфальт, сырье и продукты каменноугольной смолы и нефтепереработки. Все продукты питания, которые содержат жиры, могут абсорбировать БП при неправильном транспортировании, хранении и переработке [1]. В Украине на сегодня из продуктов питания содержание БП нормируется только для подсолнечного масла (2 мкг/кг), гранично допустимая концентрация (ГДК) БП для питьевой воды согласно ДСанПиН 2.2.4-171-10 (ДСанПиН 2.2.4-400-10) для водопроводной составляет 0,005 мкг/дм<sup>3</sup>, для бутилированной – < 0,002 мкг/дм<sup>3</sup> [2]. БП вступает в реакцию замещения, сравнительно легко окисляется с образованием хинонов и карбоновых кислот, относительно легко гидрируется [1]. БП люминесцирует с характерной структурой спектра [3]. Максимум люминесценции для БП с концентрацией  $4,1 \cdot 10^{-4}$  М в среде диметилформамид (ДМФА) – вода (1:1) находится на длине волны 430 нм. Наиболее распространенные методы определения БП являются хроматографические, иммунохимические и биологические методы. Следует отметить, что указанные методы обладают рядом недостатков, среди которых трудоемкость и длительность процедур пробоподготовки и анализа, сложность и дороговизна оборудования, для иммунохимических и биологических методов – высокий предел обнаружения и низкая селективность.

Отсюда следует актуальность разработки новых методов их инструментального обеспечения контроля БП в продуктах питания и воде – сенсоров, на основе современных наноматериалов и нанотехнологий, которые обладают низкой границей определения, высокой селективностью, экспрессностью, экономической эффективностью.

**Постановка задачи**

Достижения указанной цели может быть осуществлено, как минимум, двумя путями – эмпирическим подбором материалов, конструкций сенсоров, режимов их работы и т.п., а также теоретически, используя соответствующие методы компьютерного моделирования процессов в сенсорах.

В данной работе предлагается использование в качестве сенсоров так называемых нанопотонных устройств на базе полупроводниковых наноразмерных материалов – квантовых точек (КТ), выполняющих роль детекторных элементов сенсора. Учитывая сложный характер процессов, протекающих в подобных устройствах при их работе, корректная постановка задачи и ее реализация путем компьютерного моделирования должна быть основана на современных квантово-механических методах расчета, применяемых в квантовой химии. В связи с этим в качестве основной задачи было поставлено проведение квантово-механических расчетов энергетических характеристик детекторных элементов и определяемых в сенсоре компонентов, таких как БП.

Анализ полученных результатов позволяет определить принципиальную возможность реализации нанопотонного сенсора и его основные метрологические характеристики.

**Свойства сферических полупроводниковых КТ и применение в сенсорике**

Дать точное определение КТ достаточно сложно. Это связано с тем, что в физической литературе КТ называют широкий класс систем, в которых проявляется эффект размерного

квантования энергетических спектров электронов, дырок и экситонов. К этому классу прежде всего относят полупроводниковые кристаллы, в которых все три пространственных размера сопоставлены по порядку величины с борновским радиусом экситона в объемном материале. Данное определение предвидит, что КТ находится в вакууме, газовой или жидкой среде, или ограничена каким-либо твердотельным материалом, который отличается от материала, из которого она изготовлена. В этом случае трехмерное пространственное ограничение (конфайнмент) элементарных возбуждений в КТ обусловлено ее наноразмерами и наличием границы раздела. Эффект размерного квантования заключается в том, что при уменьшении линейных размеров объекта квазинепрерывные спектры и волновые функции его элементарных возбуждений радикально модифицируются, в КТ возникают дискретные уровни энергии (рис.1, а) [4].

К наиболее используемым КТ можно отнести композитные CdSe и CdTe КТ, обладающие люминесценцией практически во всем видимом диапазоне, в зависимости от размеров КТ. Такие КТ часто называют нанокристаллами. Существенного увеличения квантового выхода люминесценции (больше 70 %) удалось достичь формированием вокруг CdSe-ядра тонкого слоя более широкозонной ZnS-оболочки, которая выполняет роль пассиватора поверхностных состояний и локализованной электронно-дырочной пары внутри ядра КТ [5]. Большой интерес представляют КТ стабилизированные органическими молекулами – коллоидные КТ, отличительной чертой которых является высокая излучательная способность. Для предотвращения агрегации КТ, которая приводит к тушению люминесценции, используют поверхностно-активное вещество – стабилизатор триоктилфосфин оксид (ТОПО) (рис.1,б). Стабилизированные органическими молекулами коллоидные КТ – перспективная замена традиционных люминофоров, как органических так и неорганических, они имеют высокий коэффициент экстинкции, фотостабильность и квантовый выход флуоресценции и являются исключительно интересными для создания оптоэлектронных преобразователей, нанофотонных сенсоров, маркеров для биологических объектов и т.д.

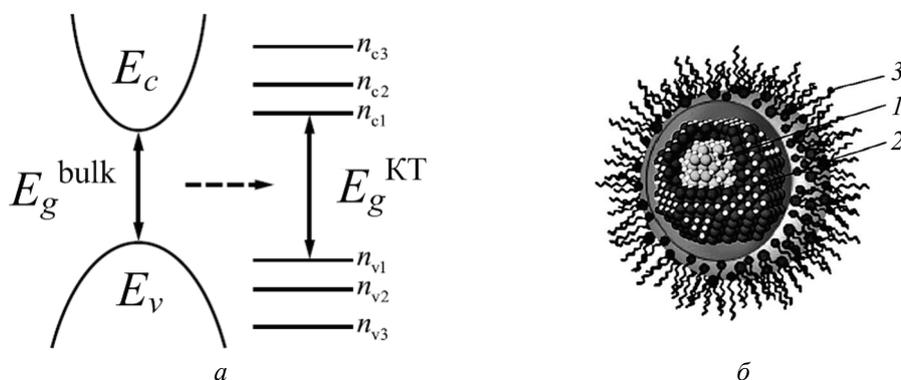


Рис 1. Трансформация непрерывного энергетического спектра зоны проводимости  $E_c$  и валентной зоны  $E_v$  объемного полупроводника в дискретный спектр КТ:  $E_g^{bulk}, E_g^{КТ}$  – ширина запрещенной зоны в объемном материале и в КТ,  $n_{ci}, n_{vi}$  – квантовые числа, соответствующие энергетическим состояниям зоны проводимости и валентной зоны ( $i = 1, 2, 3 \dots$ ) – а; схема коллоидной КТ: 1 – ядро CdSe, 2 – оболочка ZnS, 3 – стабилизирующее покрытие ТОПО – б

Интерес к этим объектам обусловлен их уникальными физическими свойствами и возможностью изготовления на их основе разнообразных фотонных и оптоэлектронных устройств, включая сенсоры. Особенный интерес представляют уникальные свойства КТ, в частности оптические, при которых поглощение фотона приводит к образованию электрон-дырочные пары, а рекомбинация электронов и дырок – к флуоресценции. Вследствие высокой размерной однородности (больше чем 95 %) КТ излучают достаточно узкий и симметрический спектр флуоресценции (полуширина пика флуоресценции  $\approx 20 \div 30$  нм).

Спектры поглощения и люминесценции КТ CdSe/ZnS в воде, зарегистрированы с помощью спектрофотометра Ocean Optics Spectrometer QE65000, представлены на рис. 2 [6]. Полуширина спектра флуоресценции составляет 25 нм, длина волны максимума люминесценции – 542 нм. Полученные спектры указывают на достаточно низкую дисперсию размеров КТ и на незначительное количество дефектов (поверхностных энергетических состояний).

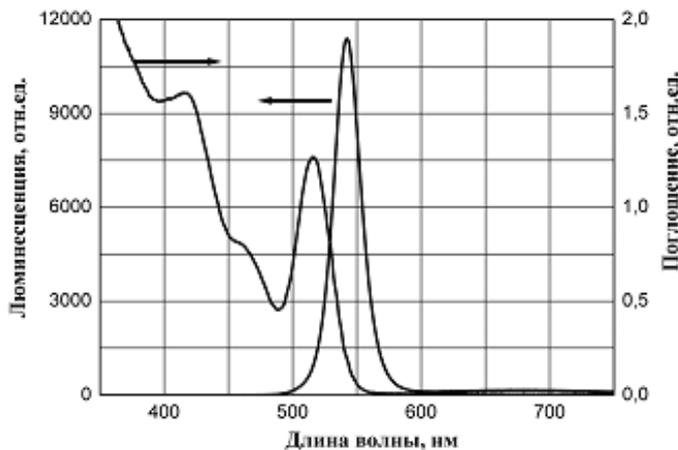


Рис. 2. Спектры поглощения и флуоресценции 0,02 мМ КТ CdSe/ZnS (диаметр  $d=2,5$  нм) в воде

### Физические процессы в нанопотонном сенсоре

Нанопотонный сенсор представляет собой оптически прозрачную ячейку, которая содержит рабочий и вспомогательный электроды. Рабочий электрод является трехслойной структурой, состоящей из стеклянной подкладки, покрытой слоем оксида индия  $In_2O_3$  и нанесенного по специальной технологии тонкого (мономолекулярного) упорядоченного слоя сферических полупроводниковых КТ, которые играют роль детекторных элементов. Вспомогательный электрод в зависимости от конструктивных особенностей сенсора, может быть изготовлен из оптически прозрачного материала, например, стеклогуглерода, который имеет высокую электропроводность.

К контактам рабочего и вспомогательного электрода подключают источник напряжения, на рабочий электрод подают отрицательный потенциал, а на вспомогательный – положительный, в результате закрепленные на рабочем электроде КТ переходят в состояние анион-радикала (1) (рис. 3, а), а молекулы БП, находящиеся в растворе, которым заполнена рабочая камера сенсора, в состояние катион-радикала (2):



Катион-радикалы  $БП^{+}$  начинают двигаться в направлении катода – отрицательно заряженного рабочего электрода до встречи с  $КТ^{-}$  (3). В результате происходит рекомбинация, сопровождающаяся переносом электрона из валентной зоны КТ на нижнюю вакантную молекулярную орбиталь (НВМО) БП, результатом такого перехода может являться образование возбужденной частицы  $КТ^{*}$  и излучение кванта света –  $h\nu$  (4) (рис. 3):



Количество зарегистрированных квантов света является мерой содержания БП в исследуемом образце, поскольку между интенсивностью излучения  $I$  и содержанием аналита  $c_a$  имеется соответствующая корреляция  $I = f(c_a)$ , где функция  $f$  может быть линейной или

нелинейной зависимостью. Последнее обстоятельство выясняют при построении градуировочного графика, получаемого на соответственной модельной системе.

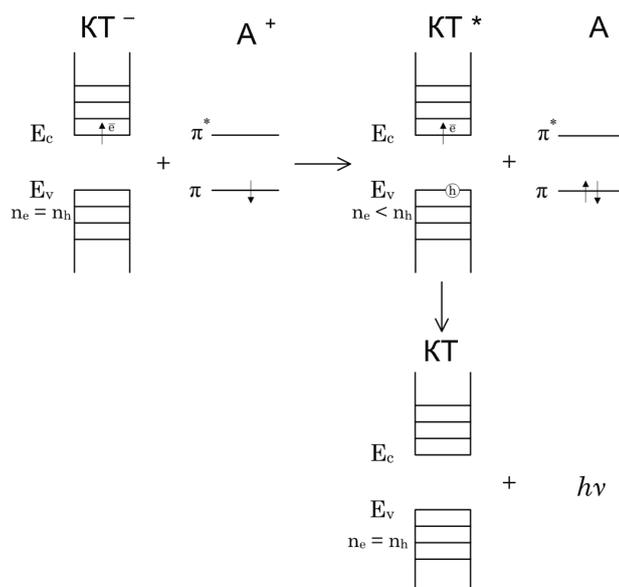


Рис. 3. Схема переноса электрона между веществом-аналитом (БП) и КТ: π – высшая заполненная молекулярная орбиталь (ВЗМО), π\* – низшая вакантная молекулярная орбиталь (НВМО)

Процесс переноса электрона является возможным только при условии, когда ширина запрещенной зоны КТ будет равной или меньшей, чем разница между высшей заполненной (ВЗМО) и НВМО молекулярными орбиталями БП (рис. 3) [7]. Таким образом, для корректного выбора детекторного элемента, а именно материала и размера КТ, необходимо провести квантово-химические расчеты молекулярной системы БП, зависимости ширины запрещенной зоны КТ от ее радиуса и их сопоставление.

### Квантово-химические методы расчета электронных структур молекул

В зависимости от степени аппроксимации параметров в приближенном решении уравнения Шредингера для много центровых, многоэлектронных систем, квантово-химические методы делят на эмпирические (параметры взятые из экспериментальных и спектроскопических данных), полуэмпирические (часть параметров обнуляется, часть заменяется данными эксперимента) и неэмпирические *ab initio* (рассчитываются все интегралы, которые возникают при решении алгебраических уравнений Рутаана после нулевого дифференциального приближения) [8].

Наиболее доступное использование этих методов обеспечивается известным программным комплексом HyperChem, возможности которого не ограничены только квантово-химическим расчетом энергии и электронной структуры молекул. В этом программном комплексе реализованы AM1, PM3, MNDO, MNDO/3 методы расчета энергии и электронной структуры химических соединений в полуэмпирическом приближении и неэмпирические методы *ab initio* в приближении Хартри – Фока и т.д.

Метод MNDO (Modified Neglecting of Differential Overlap) основан на строгом приближении, в котором учитываются интегралы межэлектронного отталкивания, включающие одноцентровые перекрытия. В 1985 г. метод MNDO был модифицирован добавлением новых параметров, получив название AM1 (Austin Model 1). AM1 (Дюар, 1985) является более совершенным чем метод MNDO и используется для расчета энергии, электронной структуры, молекулярной геометрии и стандартных энтальпий образования органических молекул [9]. Метод PM3 является лишь новой параметризацией метода AM1. Метод PM3 предназначен для расчета органических молекул, является модифицированной версией ме-

тогда AM1 и отличается от него только величинами параметров. Параметры для PM3 были получены сравнением большого числа экспериментов с результатами расчетов. В настоящее время AM1 и PM3 считаются наиболее надежными из всех полуэмпирических методов.

Метод Хартри – Фока – приближенный метод решения уравнения Шредингера путем сведения многоуровневой задачи к одноуровневой в предположении, что каждая частица движется в некотором усредненном самосогласованном поле, которое создается всеми другими частицами системы. Метод впервые предложен Д. Хартри и В. Фоком в 1927 г [10].

Каноническое уравнение Хартри – Фока имеет вид

$$\hat{F} = \hat{H} + \sum_{j=1}^{n/2} [2J_j - K_j],$$

где  $\hat{F}$  – одноэлектронный хартри-фоковский оператор;  $\hat{H}$  – оператор полной энергии системы (гамильтониан);  $J_j, K_j$  – кулоновский и обменный операторы соответственно.

Для проведения расчетов неэмпирическим методом возможно использование любого базисного набора. Однако целесообразно использование такого набора, при котором требуется наименьший объем вычислений. Этому условию удовлетворяют наборы, при которых для аппроксимации молекулярной орбитали достаточным является использование меньшего количества базисных функций. В качестве широко распространенных стандартных базисных наборов используют минимальный (STO-3G), малый (3-21G), средний (6-31G\*) и расширенный (6-31G\*\*) [11].

Таким образом, приходим к заключению, что наиболее оптимальными методами расчета необходимых параметров исследуемых систем с точки зрения точности и достоверности результатов является использование неэмпирического метода с базисным набором STO-6G и полуэмпирических методов AM1, MNDO и PM3. Данные методы используются для изучения электронного строения молекулы БП.

### Квантово-химический расчет молекулярной структуры и электронных свойств БП

Для расчета электронных структуры и свойств вещества-аналита БП проведен квантово-химический расчет молекулярной структуры в вакууме и среде растворителя N,N-диметилформамида (ДМФА) (рис. 4) в основном состоянии и состоянии катион-радикала, с целью выбора оптимального диаметра сферической полупроводниковой КТ – детекторного элемента нанопотонного сенсорного устройства для определения БП. Для расчетов использовали программный пакет HyperChem 8.0, а также реализованные в данном пакете полуэмпирические AM1, MNDO, PM3 и неэмпирические ab initio с базисным набором STO-3G методы.

Таблица 1  
Фрагменты log-файла расчета дипольного момента молекулы БП  
в вакууме и в среде ДМФА

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
	в вакууме			
Point-Chg.	0,011	-0,037	-0,000	0,039
sp Hybrid	-0,002	-0,011	0,000	0,011
pd Hybrid	0,000	0,000	0,000	0,000
Sum	0,010	-0,048	0,000	0,049
	в среде ДМФА			
Point-Chg.	-1,718	-0,384	-0,000	1,760
sp Hybrid	0,066	-0,478	-0,000	0,483
pd Hybrid	0,000	0,000	0,000	0,000
Sum	-1,652	-0,862	-0,000	1,863

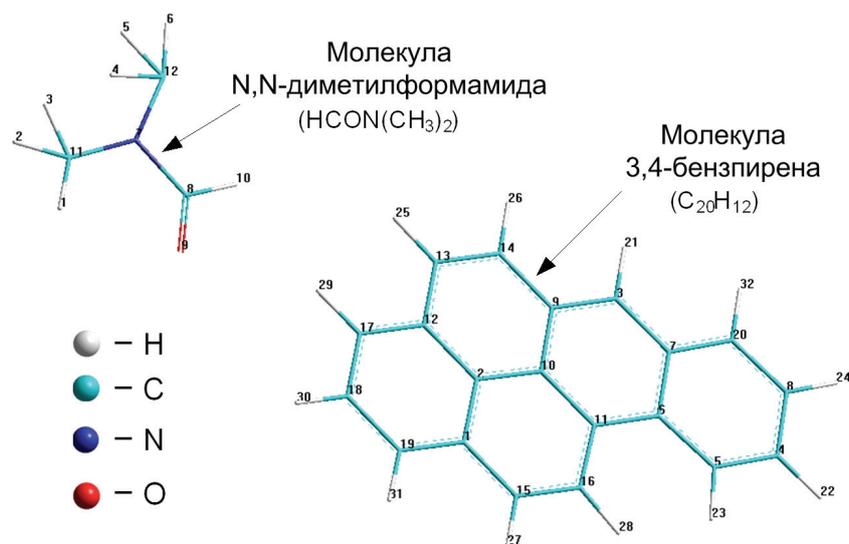


Рис. 4. Структурная схема молекулы БП в среде растворителя ДМФА. Программный пакет HyperChem 8.0, оптимизирована аппаратом квантовой механики MM+.

1,2,3, ...  $n$  – позиции атомов

Оценить растворимость БП в воде можно с помощью расчета дипольного момента. Оценка растворимости производится сравнением электрического дипольного момента молекулы БП с дипольным моментом молекулы растворителя. На основании близости дипольных моментов делается вывод о преимущественной растворимости в данном растворителе. Для воды  $\mu(\text{H}_2\text{O}) = 1,83 \text{ D}$  (полярный растворитель). Электрический дипольный момент молекулы БП, рассчитанный полуэмпирическим методом MNDO, имеет очень малую величину  $0,049 \text{ D}$ .

Молекула БП растворима в растворителях, таких как бензол, толуол, ДМФА и т.д. Для перевода БП в водную среду необходимо предварительно растворить его в полярном растворителе, например, ДМФА. В этом случае электрический дипольный момент БП, растворенного в ДМФА, становится равным  $1,863 \text{ D}$ , что позволяет перевести данный раствор в водную среду.

Положение реакционных центров молекулы приближенно определяется зарядами на атомах. Оценка распределения зарядов на атомах исследуемой молекулы по Малликену (табл. 2) и на основании их величин и знаков дает возможность проанализировать наиболее вероятные направления атак нуклеофилов (отрицательно заряженных частиц) и электрофилов (катионов) в среде.

Из данной таблицы видно, что максимальным отрицательным зарядом по Малликену обладает 17 атом – атом углерода, который является наиболее вероятным центром электрофильной атаки.

Для оценки направления атаки реагента на один из альтернативных реакционных центров используют величины зарядов на них, величины и знаки коэффициентов атомной орбитали ВЗМО или НСМО (орбитальный контроль).

Для сравнения реакционной способности в ряду соединений важно знать знак и величины энергии граничных орбиталей  $E_{\text{ВЗМО}}$  и  $E_{\text{НСМО}}$ . В реакциях электрофильного и нуклеофильного замещения в ряду ароматических и гетероароматических соединений наблюдается зарядовый контроль. В результате проведенных расчетов, приведенных в табл. 3, можно сделать заключение, что молекула БП является электрофилом, так как НСМО обладает отрицательным знаком.

Таблица 2

Распределение Маллиkenовских зарядов на атомах молекулы БП в зависимости от ее состояния в среде растворителя ДМФА методом *ab initio* в приближении Хартри – Фока

Номер атома	Маллиkenовский заряд, основное состояние	Маллиkenовский заряд, ионное состояние (заряд +1)	Номер атома	Маллиkenовский заряд, основное состояние	Маллиkenовский заряд, ионное состояние (заряд +1)
1	0,001367	0,000202	17	-0,064492	-0,057581
2	-0,001146	0,000515	18	-0,062032	-0,062552
3	-0,062423	-0,054444	19	-0,062567	-0,054421
4	-0,062482	-0,057907	20	-0,061451	-0,056429
5	-0,063840	-0,058621	21	0,063056	0,060954
6	0,000815	0,002044	22	0,063635	0,064196
7	0,000572	-0,000983	23	0,064781	0,067080
8	-0,063846	-0,059227	24	0,058696	0,025624
9	-0,000680	-0,001370	25	0,068456	0,057408
10	-0,000664	0,000329	26	0,063688	0,066357
11	0,001045	0,002723	27	0,062264	0,060758
12	0,000172	-0,001959	28	0,018189	0,194578
13	-0,063548	-0,060234	29	-0,013752	0,000036
14	-0,060765	-0,056908	30	0,012132	0,202799
15	-0,061892	-0,056697	31	0,008537	0,004413
16	-0,064412	-0,058285	32	-0,009060	-0,004446

Таблица 3

Значения энергий ВЗМО и НЗМО молекулы БП в среде ДМФА в основном состоянии и его катион-радикала (заряд +1), рассчитанные полуэмпирическим методом PM3

	$E_{ВЗМО}, \text{эВ}$	$E_{НСМО}, \text{эВ}$	$E_{ВЗМО} (+1), \text{эВ}$	$E_{НСМО} (+1), \text{эВ}$	$\Delta E, \text{эВ}$	$\Delta E(+1), \text{эВ}$	$\Delta E_{ox}, \text{эВ}$
3,4-бензпирен (в вакууме)	-8,041796	-1,220635	-12,19579	-5,915411	6,821161	6,280379	2,126385
3,4-бензпирен (в ДМФА)	-7,741654	-2,67172	-11,74923	-5,334725	5,069934	6,414505	2,406929

$\Delta E$  – разница между энергиями граничных орбиталей ВЗМО и НСМО;  $\Delta E_{ox}$  – разница между энергиями граничных молекулярных орбиталей ВЗМО в основном состоянии и НСМО в возбужденном.

### Определение оптимальных размеров сферических полупроводниковых КТ

Исходя из изложенного квантово-размерные эффекты играют ключевую роль в опто-электронных свойствах КТ. Существует математическая зависимость ширины запрещенной зоны от размера (радиуса) наночастицы, которую можно получить, решая уравнение Шредингера для волновой функции  $\psi$  с использованием аппроксимации эффективной массы для конкретного типа полупроводниковой КТ

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \nabla_h^2}{2m_h^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r_{eh}} + V_0 \right] \psi(r_e, r_h) = E\psi(r_e, r_h),$$

где  $r_e, r_h$  – радиусы электрона и дырки сферической КТ соответственно;  $m_e^*, m_h^*$  – эффективные массы электрона и дырки соответственно;  $\epsilon, \epsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость наночастицы и вакуума соответственно.

В данном уравнении  $\left( -\frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \nabla_h^2}{2m_h^*} \right)$  представляют оператор кинетической энергии для электрона и дырки, а  $V_0$  – периодическая потенциальная энергия электрона. Потенциал

$V_0$  может включать потенциал ионизации и электрон-электронные взаимодействия.

Для бесконечного потенциала вне наночастицы и нулевого внутри предложено следующее уравнение для определения ширины запрещенной зоны  $E_g$  сферической наночастицы в зависимости от изменения ее радиуса [12]:

$$E_g = E_g^{bulk} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2er^2} \left( \frac{1}{m_e^* m_0} + \frac{1}{m_h^* m_0} \right) - \frac{1,8e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} - \frac{0,124e^3}{\hbar^2 (4\pi\epsilon\epsilon_0)^2} \left( \frac{1}{m_e^* m_0} + \frac{1}{m_h^* m_0} \right)^{-1}, \quad (5)$$

где  $E_g^{bulk}$  – ширина запрещенной зоны объемного полупроводника того же типа, что и КТ;  $r$  – радиус КТ;  $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг – масса электрона.

Слагаемое  $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2er^2} \left( \frac{1}{m_e^* m_0} + \frac{1}{m_h^* m_0} \right)$  уравнения (5) описывает кинетические энергии взаимодействующих электрона и дырки в сферической потенциальной яме с радиусом  $r$ ,  $\frac{1,8e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}$  описывает кулоновское взаимодействие частиц – электронов и дырок, а слагаемое  $\frac{0,124e^3}{\hbar^2 (4\pi\epsilon\epsilon_0)^2} \left( \frac{1}{m_e^* m_0} + \frac{1}{m_h^* m_0} \right)$  определяет энергию экситона в наночастице.

На рис. 5 приведена рассчитанная зависимость ширины запрещенной зоны  $E_g$  от радиуса  $r$  сферических КТ типа ZnS, CdSe, CdTe используя программный пакет Mathematica 9.0.1.

Наиболее подходящими для создания детекторного элемента сенсора являются сферические полупроводниковые КТ типа CdSe, основываясь на особенности существенного изменения ширины запрещенной зоны от ее радиуса. Это позволяет улучшить метрологические характеристики нанофотонного сенсорного устройства для определения БП в водных объектах. Физико-химические параметры оптимальных КТ представлены в табл. 4.

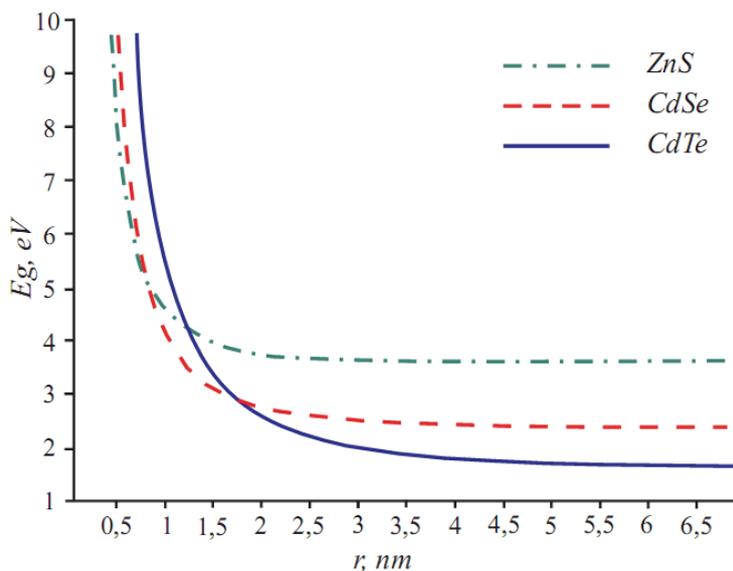


Рис. 5. Рассчитанная зависимость ширины запрещенной КТ от ее радиуса для полупроводниковых КТ типа ZnS, CdSe and CdTe

Физико-химические параметры сферических полупроводниковых КТ типа CdSe

Диаметр КТ, <i>нм</i>	Оболочка	Покрытие	Длина волны люминесценции $\lambda_{max}$ , <i>нм</i>	$\varphi_{ox}$ В	$\varphi_{red}$ В	$E_{BG}$ , эВ
3.8	ZnS	ТОРО	590	+1.77	-1,25	2.0

$\varphi_{ox}$ ,  $\varphi_{red}$  – потенциалы окисления и восстановления КТ соответственно;  $E_{BG}$  – ширина запрещенной зоны КТ.

## Выводы

В результате проведения физического и математического моделирования процессов, протекающих в сенсорном устройстве, при определении БП у водных объектах окружающей среды выбраны тип и размер сферических КТ, которые могут быть использованы в качестве детекторных элементов нанофотонного сенсора. Таким образом, полупроводниковые сферические КТ типа CdSe/ZnS с диаметром 3,8 нм в соответствии с расчетными данными (рис. 4) и квантово-химическими расчетами молекулярной структуры БП являются оптимальными для использования их как детекторных элементов сенсорного устройства для определения БП в водных объектах.

*Авторы статьи выражают благодарность Международному проекту УНТЦ № 5067, в рамках которого выполнена данная работа, и руководителю проекта проф., д-ру физ.-мат. наук Рожницкому Н.Н.*

**Список литературы:** 1. Алемасова, А.С., Луговой, К.С. Экологическая аналитическая химия. Донецк: ДонНУ, 2010. 271 с. 2. ДСанПіН 2.2.4-171-10 (ДСанПіН 2.2.4-400-10): Наказ МОЗУ №400 від 12.05.2010. Редакція від 19.09.2011. 25 с. 3. Нурмухаметов, Р.Н. Поглощение и люминесценция ароматических соединений. – М. : Химия, 1971. – 216 с. 4. *Molecular Electronics: a chemistry of the 21<sup>st</sup> Century* / Edited by Jortner J., Ratner M. Hoboken: Blackwell Science, 1997. 485 с. 5. Сперанская, Е.С. Квантовые точки на основе селенида кадмия: получение, модификация и применение в иммунохимическом анализе: автореф. дис. ... канд. хим. наук. – Саратов : СГУ им. Н.Г.Чернышевского, 2013. – 23 с. 6. Жолудов, Ю.Т., Белаш, Е.М., Кукоба, А.В., Рожницкий, Н.Н. Сенсбилизация электрогенерированной хемиллюминесценции полупроводниковыми квантовыми точками // Сенсор. електрон. і мікро-систем. технології. – 2011. – Т. 2, № 3. – С. 71–75. 7. Сушко, О.А., Рожницкий, М.М. Оптичний сенсор на основі напівпровідникових квантово-розмірних структур для визначення конденсованої ароматики у водних об'єктах довкілля // Системи обробки інформації. – 2013. – № 2 (109). – С. 259–264. 8. Хедвиг П. Прикладная квантовая химия. – М. : Мир, 1977. – 595 с. 9. Туровський, М.А., Туровська, О.М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. – Донецьк : ДонНУ, 2004. 131 с. 10. Заградник, Р., Полак, Р. Основы квантовой химии. – М. : Мир, 1979. – 504 с. 11. Ладик, Я. Квантовая биохимия для химиков и биологов. – М. : Мир, 1975. – 257 с. 12. Ronda, C. Luminescence. From Theory to Application. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008. – 260 p.

Харьковский национальный  
университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 23.01.2014