

**РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ИНДУКТИВНО-РЕЗОНАНСНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ  
В НАНОСФЕРАХ, СОДЕРЖАЩИХ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ CdSe/ZnS И ДИАРИЛЭТЕН****П. В. Карпач<sup>1\*</sup>, С. А. Маскевич<sup>2</sup>, Г. Т. Василюк<sup>1</sup>, В. В. Бритиков<sup>3</sup>,  
С. А. Усанов<sup>3</sup>, А. А. Хузин<sup>4</sup>, М. В. Артемьев<sup>5</sup>**

УДК 535.37

<https://doi.org/10.47612/0514-7506-2022-89-3-360-368><sup>1</sup> Гродненский государственный университет имени Янки Купалы,  
Гродно, Беларусь; e-mail: [pavel\\_karpach@mail.ru](mailto:pavel_karpach@mail.ru)<sup>2</sup> Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова  
Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь<sup>3</sup> Институт биоорганической химии НАН Беларуси, Минск, Беларусь<sup>4</sup> Институт нефтехимии и катализа Российской АН, Уфа, Россия<sup>5</sup> Институт физико-химических проблем Белорусского государственного университета,  
Минск, Беларусь

(Поступила 29 марта 2022)

Представлен анализ теоретических модельных исследований фотохромных систем с обратимой модуляцией флуоресценции на основе полимерных наносфер, содержащих полупроводниковые квантовые точки (КТ) CdSe/ZnS и молекулы фотохромного диарилэтена ДАЭ2. На основе известных соотношений теории индуктивно-резонансного переноса энергии (FRET) построена модель эффективности модуляции флуоресценции КТ  $E(r)$ , вызванной фотохромными превращениями находящихся вблизи молекул ДАЭ2, за счет механизма FRET. Определены границы оптимальных значений параметров, влияющих на эффективность модуляции флуоресценции за счет FRET. Рассчитана эффективность FRET  $E(r)$  при некоторых граничных значениях влияющих факторов. Показано, что  $E(r) \sim 0.7$  можно достичь при расстояниях между донорами и акцепторами  $r = 4.5$  нм, если на одну КТ с квантовым выходом флуоресценции  $Q = 0.4$  приходится не менее  $n = 16$  молекул ДАЭ2 (либо при  $Q = 0.8$  и  $n = 8$ ), а также при расстояниях  $r = 3$  нм (при  $Q = 0.1$  и  $n = 6$ ,  $Q = 0.4$  и  $n = 2$ ,  $Q = 0.8$  и  $n = 1$ ). Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации структуры и технологии синтеза фотохромных люминесцентных наносфер.

**Ключевые слова:** квантовая точка, флуоресценция, индуктивно-резонансный перенос энергии, моделирование, фотохромизм, диарилэтен, полимерная наносфера.

An analysis of theoretical model studies of photochromic systems with reversible fluorescence modulation based on polymer nanospheres containing CdSe/ZnS semiconductor quantum dots (QDs), and photochromic diarylethene DAE2 molecules is presented. Based on the known relations of the theory of Förster resonance energy transfer (FRET), a model is constructed for the efficiency of modulation of QD fluorescence  $E(r)$  caused by photochromic transformations of DAE2 molecules located near them due to the FRET mechanism. The boundaries of the optimal values of the parameters that affect the efficiency of the fluorescence modulation due to FRET are determined. The efficiency of FRET  $E(r)$  is given for some boundary val-

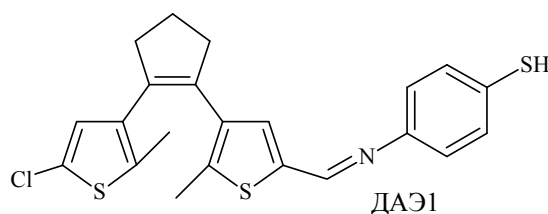
**CALCULATION OF THE FÖRSTER RESONANCE ENERGY TRANSFER PARAMETERS  
IN NANOSPHERES CONTAINING CdSe/ZnS QUANTUM DOTS AND DIARYLETHENE****P. V. Karpach<sup>1\*</sup>, S. A. Maskevich<sup>2</sup>, G. T. Vasilyuk<sup>1</sup>, V. V. Britikov<sup>3</sup>, S. A. Usanov<sup>3</sup>, A. A. Khuzin<sup>4</sup>,  
M. V. Artemiev<sup>5</sup>** (<sup>1</sup> Yanka Kupala Grodno State University, Grodno, Belarus; <sup>2</sup> Belarusian State University, ISEI Belarusian State University, Minsk, Belarus; <sup>3</sup> Institute of Bioorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus; <sup>4</sup> Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia; <sup>5</sup> Research Institute of Physical and Chemical Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus)

ues of the influencing factors. It is shown that  $E(r) \sim 0.7$  can be achieved at distances between donors and acceptors  $r = 4.5$  nm, if one QD with a fluorescence quantum yield  $Q = 0.4$  accounts for at least  $n = 16$  DAE2 molecules (or at  $Q = 0.8$  and  $n = 8$ ), as well as at distances  $r = 3$  nm ( $Q = 0.1$  and  $n = 6$ ;  $Q = 0.4$  and  $n = 2$ ;  $Q = 0.8$  and  $n = 1$ ). The results obtained can be used to optimize the structure and technology for the synthesis of photochromic luminescent nanospheres.

**Keywords:** quantum dots, fluorescence, Förster resonance energy transfer, modeling, photochromism, diarylethenes, polymer nanospheres.

**Введение.** В информационных устройствах трехмерной оптической памяти с люминесцентным считыванием [1—5] перспективно использование фотохромных систем, основанных на фотоуправляемых переключателях [6] и проявляющих модуляцию флуоресценции. Модуляция интенсивности флуоресценции в таких системах [1—3] может осуществляться либо вследствие индуктивно-резонансного переноса энергии (FRET) с флуорофора на фотохром либо путем перепоглощения света флуоресценции фотохромным соединением (эффект внутреннего фильтра).

Наиболее предпочтительно использование в таких системах в качестве люминофоров полупроводниковых нанокристаллов — квантовых точек (КТ) [7—9], а в качестве фотохромов — молекулы термически необратимых диарилэтенов (ДАЭ) [10]. Данной теме посвящены обзоры [1, 2], а также работы [11—16]. В частности, в [16] с использованием технологии [17] синтезированы полимерные наносферы, в которые включены КТ550 (излучающие на  $\lambda = 550$  нм) и молекулы диарилэтена ДАЭ1



Модель структуры таких наносфер представлена на рис. 1. Согласно данной модели, молекулы фотохромного ДАЭ1 инкорпорированы в полимерный гидрофобный бислои. Толщина бислоя в синтезированных наносферах  $\sim 2.0$  нм, радиус CdSe/ZnS КТ  $\sim 2.5$  нм. Результаты экспериментальных исследований [16] показали наличие фотоуправляемой модуляции флуоресценции КТ550 вследствие FRET на ДАЭ1 у данных наносфер. Отмечены низкие квантовый выход флуоресценции наносфер (4 %) и эффективность модуляции флуоресценции. Возможные пути улучшения фотомодулирующих свойств наносфер — увеличение квантового выхода флуоресценции КТ в структуре наносфер и количества молекул ДАЭ, инкорпорированных в полимерный бислои. Для оценки перспективности использования технологии получения функциональных полимерных наносфер [16], содержащих КТ CdSe/ZnS и молекулы фотохромного ДАЭ, в настоящей работе путем моделирования определены оптимальные границы параметров, влияющих на эффективность модуляции флуоресценции за счет FRET. Параметры FRET исследованы для некоторых значений квантового выхода флуоресценции КТ и различного количества молекул фотохрома в полимерной оболочке наносфер.

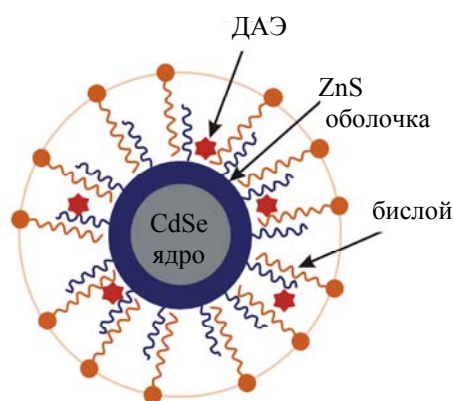


Рис. 1. Модель КТ- и фотохромсодержащих полимерных наносфер (CdSe/(ZnS)+ДАЭ) [16]

**Объекты исследования.** В качестве доноров энергии электронного возбуждения рассматривались КТ525 CdSe/ZnS, синтезированные в НИИ ФХП БГУ по методике [18], в качестве акцептора — фотоиндуцированная циклическая форма *B* молекул ДАЭ2 (рис. 2, *a*) со структурой, подобной ДАЭ1, но с меньшими по размеру боковыми заместителями. Спектры поглощения ДАЭ2 в фотоизомеризованной циклической форме *B* и спектры флуоресценции КТ525 CdSe/ZnS, излучающие на  $\lambda = 525$  нм, хорошо перекрываются (рис. 2, *б*), что важно для эффективного FRET. ДАЭ2 в исходной форме не демонстрирует заметного оптического поглощения в спектральном диапазоне излучения КТ, а фотоизомеризованная циклическая форма ДАЭ2 характеризуется дополнительной полосой в диапазоне 450—650 нм.

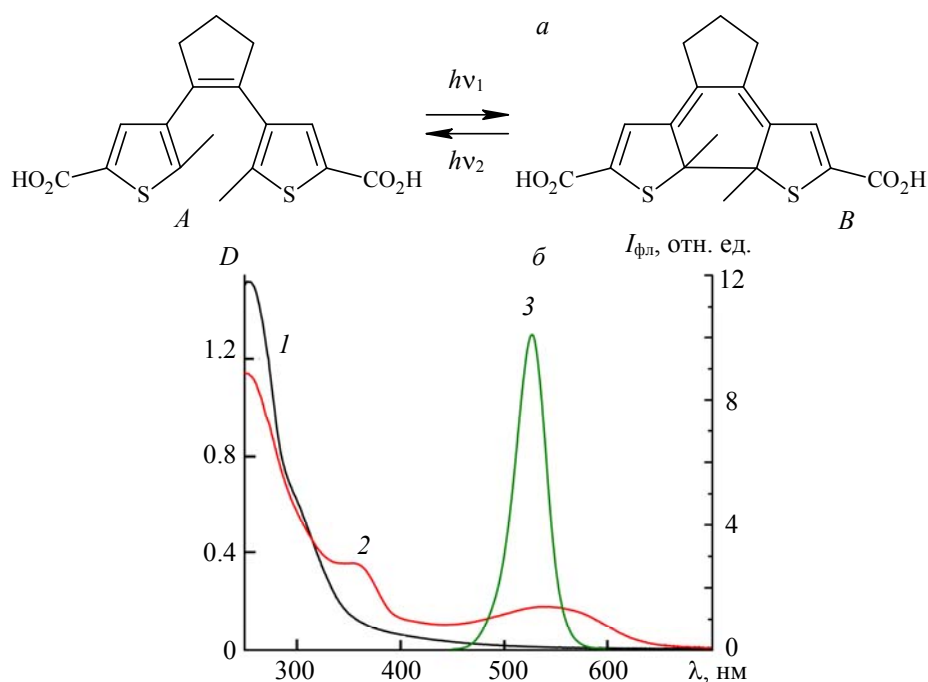


Рис. 2. Схема структурной фотоизомеризации молекул ДАЭ2 при облучении УФ  $h\nu_1$  и видимым  $h\nu_2$  светом (*a*); спектры поглощения в хлороформе: ДАЭ2 в исходной (1) и фотоизомеризованной циклической формах (2) и флуоресценции КТ525 CdSe/ZnS (3) (*б*)

Спектры поглощения растворов ДАЭ2 зарегистрированы на спектрофотометре Specord 200 (Carl Zeiss, Германия), спектры флуоресценции — на спектрофлуориметре CM2203 (“Солар”, Беларусь). Коэффициент молярной экстинкции  $\epsilon_B(\lambda)$  в максимуме длинноволновой полосы поглощения раствора циклической формы *B* ДАЭ2 в ацетоне, а также доля формы *B* в состоянии фоторавновесия при УФ-излучении определены экспериментально с помощью ЯМР-спектроскопии (спектрометр Bruker Avance-500, резонансная частота для протонов 500 МГц (Bruker Biospin GmbH, Германия)) в Институте биоорганической химии НАН Беларуси. Полученные значения использованы в расчетах при определении критического радиуса Фёрстера  $R_0$ .

**Методика расчетов.** Компьютерная модель для определения эффективности  $E(r)$  модуляции флуоресценции КТ (за счет FRET) фотохромными превращениями молекул ДАЭ построена на основе соотношений [16]. Эффективность модуляции интенсивности флуоресценции КТ:

$$E(F) = 1 - F_{DA}/F_D, \quad (1)$$

где  $F_D$  — интенсивность флуоресценции донора (КТ),  $F_{DA}$  — интенсивность флуоресценции донора в присутствии акцептора (циклический изомер ДАЭ).

В предположении, что изменение интенсивности флуоресценции КТ — результат только изменения вероятности FRET (эффективность FRET при одной молекуле акцептора — ДАЭ)

$$E = R_0^6 / (r^6 + R_0^6), \quad (2)$$

где  $r$  — расстояние между донором и акцептором;  $R_0$  — радиус Фёрстера (Å):

$$R_0 = 0.211(\kappa^2 n_r^{-4} Q_D J(\lambda))^{1/6}, \quad (3)$$

$\kappa^2$  — фактор взаимной ориентации в пространстве дипольных моментов переходов донора и акцептора;  $n_r$  — показатель преломления среды;  $Q_D$  — квантовый выход донора в отсутствие акцептора;  $J(\lambda)$  — интеграл перекрытия, отражающий степень спектрального перекрытия между испусканием донора и поглощением акцептора:

$$J(\lambda) = \int_0^\infty F_D(\lambda) \varepsilon_A(\lambda) \lambda^4 d\lambda, \quad (4)$$

$F_D(\lambda)$  — нормированная по площади интенсивность флуоресценции донора;  $\varepsilon_A(\lambda)$  — коэффициент молярной экстинкции акцептора.

На эффективность FRET (и радиус Фёрстера) большое влияние оказывает фактор взаимной ориентации в пространстве дипольных моментов переходов донора и акцептора  $\kappa^2$ , который можно выразить (рис. 3) через углы  $\omega$  и  $\theta$  [19, 20]:

$$\kappa^2 = \cos^2 \omega (1 + 3 \cos^2 \theta), \quad (5)$$

где  $\theta$  — угол между вектором  $\mathbf{d}$  дипольного момента донора и радиусом-вектором  $\mathbf{r}$  между центрами донора и акцептора;  $\omega$  — угол между вектором дипольного момента акцептора и вектором электрического поля донора в месте расположения акцептора.

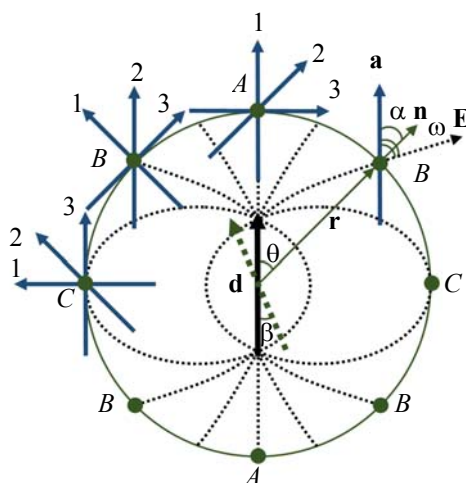


Рис. 3. Схема взаимодействий дипольных моментов переходов донора  $\mathbf{d}$  и акцепторов  $\mathbf{a}$  (молекул ДАЭ), расположенных в точках  $A, B$  и  $C$  на расстоянии  $r$  от центра донора и в различной ориентации (1, 2, 3) относительно нормали  $\mathbf{n}$  к окружности радиуса  $r$

При использовании в качестве доноров люминесцирующих наночастиц цилиндрической формы, обладающих пространственной анизотропией свойств, — квантовых стержней — необходимо учитывать, что их дипольный момент перехода линейно ориентирован (в отличие от КТ) [21].

Эффективность FRET для донора  $D$  в окружении  $n$  молекул акцептора  $A$  по результатам измерения длительности флуоресценции:

$$E_n = 1 - \frac{\tau_{DA_n}}{\tau_D}. \quad (6)$$

Здесь  $\tau_{DA_n}$  — время жизни возбужденного состояния донора в присутствии акцептора:

$$\frac{1}{\tau_{DA_n}} = \frac{1}{\tau_D} \prod_{i=1}^n \left( 1 + \left( \frac{R_0}{r_i} \right)^6 \right), \quad (7)$$

где  $\tau_D$  — время жизни возбужденного состояния донора в отсутствие акцептора;  $r_i$  — расстояние между  $i$ -й молекулой акцептора и донором.

При подстановке (7) в (6) для расчета зависимости эффективности FRET  $E$  от расстояния  $r$  между донором и акцептором при  $n$  молекулах акцептора получаем:

$$E(r) = 1 - \frac{1}{\prod_{i=1}^n (1 + (R_0 / r)^6)}, \quad (8)$$

где  $R_0$  рассчитывается по известным спектрам поглощения циклической формы ДАЭ2 и флуоресценции КТ525, а также по заданным возможным значениям квантового выхода КТ. Для проведения компьютерных вычислений разработана специальная программа. Анализ используемых при построении модели выражений показывает, что определяющий вклад в  $R_0$  и  $E(r)$  наряду с квантовым выходом  $Q$  донора вносит фактор  $\kappa^2$ .

**Результаты и их обсуждение.** В табл. 1 приведены результаты расчета зависимости эффективности FRET комплекса КТ525-ДАЭ2 от расстояния  $r$  (одинакового для всех  $n$  молекул ДАЭ2) между КТ525 и ДАЭ2, количества  $n$  молекул ДАЭ2 на одну КТ и квантового выхода  $Q$  флуоресценции КТ. Данные табл. 1 соответствуют принятым в [16] параметрам  $\kappa^2 = 0.476$  и  $n_r = 1.5$ . При фиксированном значении  $R_0$  эффективность тушения флуоресценции КТ за счет FRET зависит от расстояния  $r$  между КТ и ДАЭ2 и от количества  $n$  акцепторов в окружении одного донора. Можно получить высокие коэффициенты тушения флуоресценции КТ  $E(r) \geq 0.7$  за счет FRET на ДАЭ2 при расстояниях между донорами и акцепторами 4.5 нм. Для этого необходимо, чтобы на одну КТ525 с квантовым выходом флуоресценции в наносфере  $\geq 40\%$  приходилось не менее 15 молекул ДАЭ2.

**Т а б л и ц а 1.** Зависимость эффективности FRET  $E$  для КТ525-ДАЭ2-содержащих наносфер от расстояния  $r$  между КТ и ДАЭ2, количества  $n$  молекул ДАЭ2 на одну КТ, квантового выхода  $Q$  флуоресценции КТ

$Q$	0.10			0.20			0.40			0.60			0.80		
$R_0$ , нм	2.33			2.62			2.94			3.14			3.3		
$r$ , нм	2	3	4.5	2	3	4.5	2	3	4.5	2	3	4.5	2	3	4.5
$n$	$E(r)$														
1	0.71	0.18	0.02	0.83	0.31	0.04	0.91	0.47	0.07	0.94	0.57	0.10	0.95	0.64	0.13
2	0.92	0.33	0.04	0.97	0.52	0.07	0.99	0.72	0.14	1	0.81	0.20	1	0.87	0.25
3	0.98	0.45	0.06	1	0.67	0.11	1	0.85	0.20	1	0.92	0.28	1	0.95	0.35
4	0.99	0.55	0.07	1	0.77	0.14	1	0.92	0.26	1	0.97	0.35	1	0.98	0.44
5	1	0.63	0.09	1	0.84	0.17	1	0.96	0.31	1	0.98	0.42	1	0.99	0.51
6	1	0.70	0.11	1	0.89	0.20	1	0.98	0.36	1	0.99	0.48	1	1	0.58
7	1	0.75	0.13	1	0.92	0.23	1	0.99	0.41	1	1	0.53	1	1	0.64
8	1	0.80	0.14	1	0.95	0.26	1	0.99	0.45	1	1	0.58	1	1	0.69
9	1	0.83	0.16	1	0.96	0.29	1	1	0.49	1	1	0.63	1	1	0.73
10	1	0.86	0.17	1	0.97	0.32	1	1	0.53	1	1	0.66	1	1	0.76
15	1	0.95	0.25	1	1	0.44	1	1	0.67	1	1	0.81	1	1	0.89
20	1	0.98	0.32	1	1	0.53	1	1	0.78	1	1	0.89	1	1	0.94

Синтез полимерных наносфер, подобных описанным в [16] и содержащих системы КТ525-ДАЭ2, проведенный в лаборатории молекулярной спектроскопии и оптики наноструктур ГрГУ, позволил получить образцы с качественно лучшими, чем в [16], характеристиками. В то же время продемонстрирована необходимость как промежуточного контроля качества синтезируемых наносфер, так и совершенствования технологии синтеза. Работы в этом направлении проводятся в настоящее время.

Рассчитанные зависимости эффективности FRET от расстояния между КТ и ДАЭ2 для типичных случаев (рис. 4) демонстрируют высокую эффективность FRET ( $E(r) \geq 0.8$ ) в полимерных наносферах, содержащих КТ525-ДАЭ2, для  $n \geq 6$  и  $Q \geq 0.6$  при  $r = 4$  нм.

На рис. 5 представлены рассчитанные зависимости эффективности FRET от квантового выхода  $Q$  флуоресценции КТ для типичных случаев, реализуемых в эксперименте, соответствующих  $r = 2-6$  нм и  $n = 2-10$ . Видно, что при  $r \leq 3$  нм существует сильная нелинейная зависимость  $E(Q)$ . При  $r = 3$  нм для достижения высокой ( $\sim 0.7$ ) эффективности FRET достаточны квантовый выход флуоресценции КТ  $Q = 0.1$  и количество молекул ДАЭ2 в наносфере  $n = 6$ , а при  $r = 4$  нм  $Q = 0.4$  и  $n = 10$ .

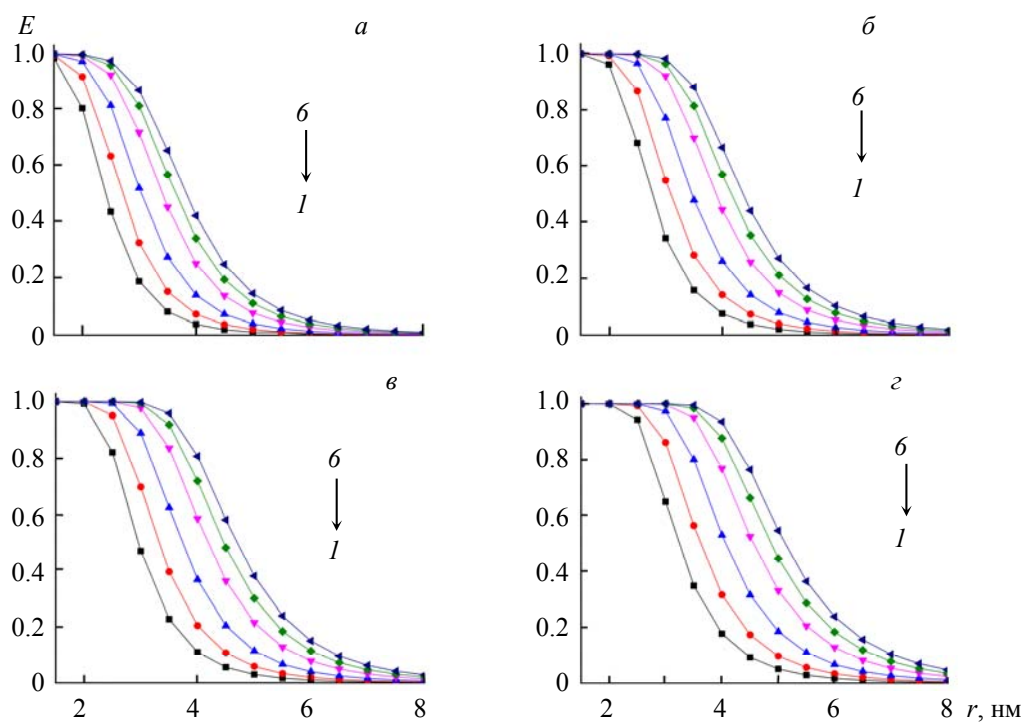


Рис. 4. Зависимости эффективности FRET  $E$  для системы КТ525-ДАЭ2 от расстояния между КТ и ДАЭ2 при  $Q = 0.05$  (1), 0.1 (2), 0.2 (3), 0.4 (4), 0.6 (5) и 0.8 (6); количество молекул ДАЭ2 в наносфере  $n = 2$  (а), 4 (б), 6 (в) и 10 (г)

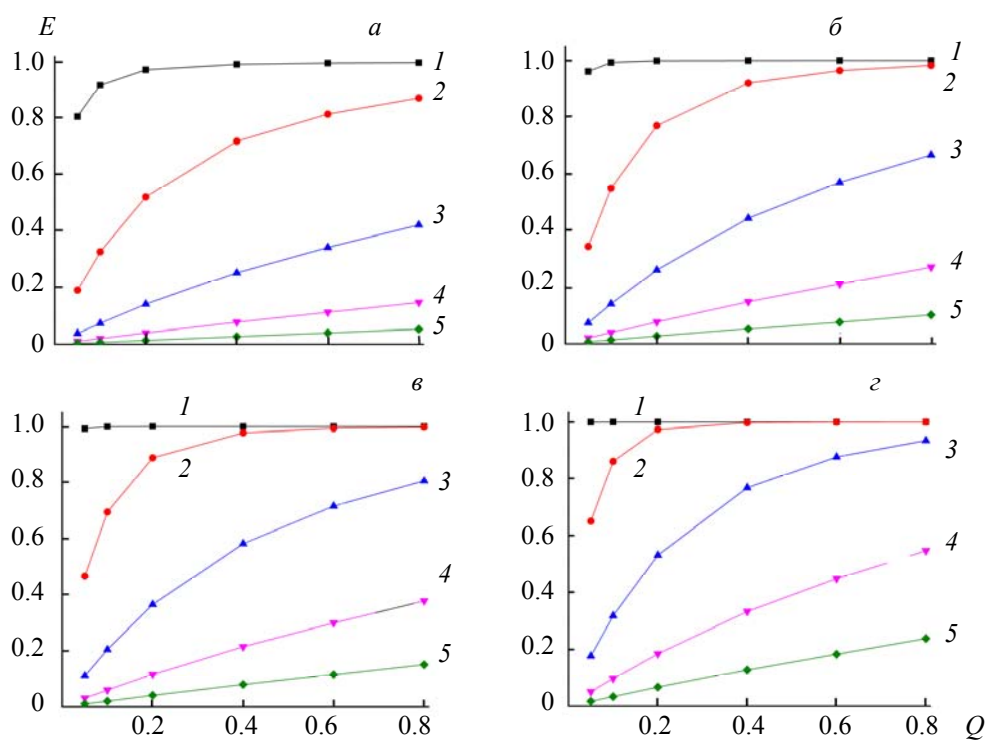


Рис. 5. Зависимости эффективности FRET  $E$  для системы КТ525-ДАЭ2 от квантового выхода  $Q$  флуоресценции КТ при расстояниях между донорами и акцепторами  $r = 2$  (1), 3 (2), 4 (3), 5 (4), 6 (5); количество молекул ДАЭ2 в наносфере  $n = 2$  (а), 4 (б), 6 (в) и 10 (г)

Расчетные зависимости эффективности FRET  $E$  от ориентационного фактора  $\kappa^2$  при  $r = 4$  нм для различных  $n$  и  $Q$  приведены на рис. 6, трехмерные зависимости  $E$  от компонентов  $\kappa^2$  (углов  $\omega$  и  $\theta$ ) — на рис. 7.

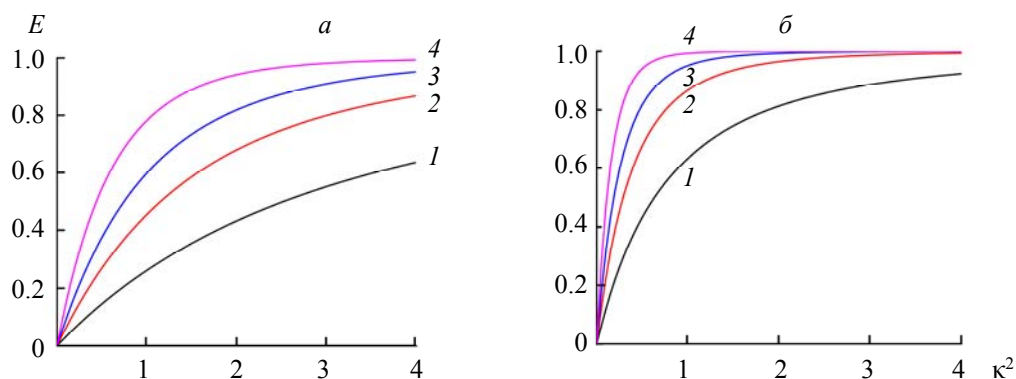


Рис. 6. Зависимости эффективности FRET  $E$  для системы КТ525-ДАЭ2 от ориентационного фактора  $\kappa^2$  при  $r = 4$  нм,  $Q = 0.20$  (а) и  $0.80$  (б); количество молекул ДАЭ2 в наносфере  $n = 2$  (1), 4 (2), 6 (3) и 10 (4)

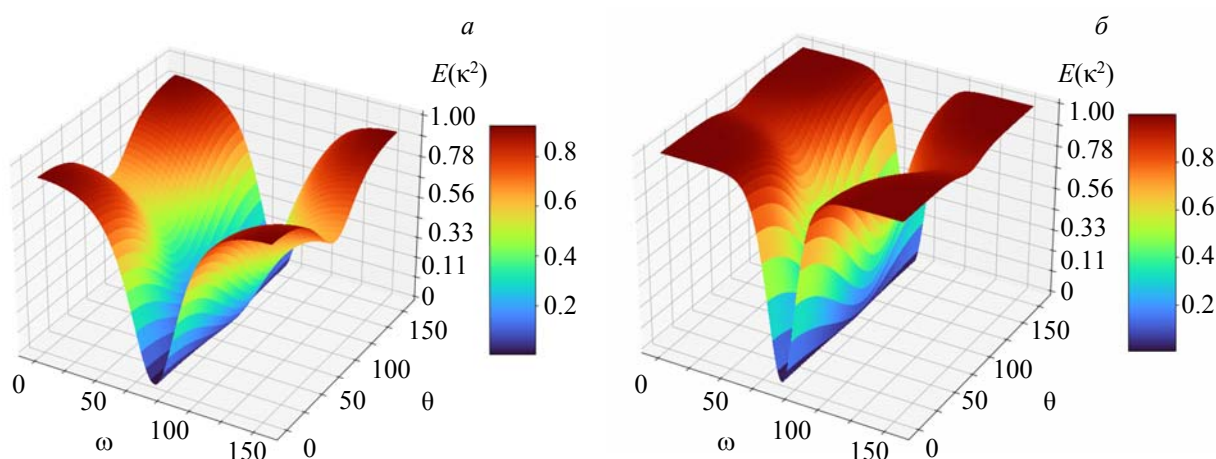


Рис. 7. Зависимости эффективности FRET  $E$  для системы КТ525-ДАЭ2 от компонентов  $\kappa^2$  (углов  $\omega$  и  $\theta$ ) при  $r = 4$  нм,  $Q = 0.80$ ; количество молекул ДАЭ2 в наносфере  $n = 2$  (а) и 6 (б)

Дипольный момент перехода  $\mathbf{d}$  донора (КТ) может принимать любую ориентацию (направление) в пространстве. При изменении направления (угол  $\beta$ , рис. 3)  $\mathbf{d}$  вместе с пространственным распределением его электрического поля изменяются угловые параметры  $\omega$  и  $\theta$ , а также  $\kappa^2$ . В табл. 2 приведены оценки параметров  $\omega$ ,  $\theta$ ,  $\kappa^2$  в точках  $A$ ,  $B$ ,  $C$  при двух ( $\beta = 0$  и  $22.5^\circ$ ) фиксированных мгновенных положениях вектора  $\mathbf{d}$  относительно расположения на поверхности молекул акцептора в точках  $A$ ,  $B$ ,  $C$  (рис. 3). При этом дипольные моменты  $\mathbf{a}$  акцепторов могут принимать положения 1, 2, 3 (рис. 3) относительно нормали  $\mathbf{n}$  к поверхности КТ, что соответствует углам  $\alpha = 0^\circ, \pm 45^\circ, \pm 90^\circ$  (табл. 2).

В соответствии с [19, 20] оценено максимально возможное среднее значение  $\kappa^2$  при фиксированной мгновенной ориентации вектора дипольного момента  $\mathbf{d}$  донора (КТ) относительно положений на поверхности КТ молекул акцептора (рис. 3). При равномерном расположении (в двух взаимно перпендикулярных диаметральных сечениях КТ, как на рис. 3)  $n = 14$  молекул акцептора (ДАЭ) на поверхности донора (КТ) по нормали к поверхности максимально возможное среднее значение  $\kappa^2 = 2.12$ . При этом для системы с 14 молекулами акцептора, расположенными в тех же точках (рис. 3), но под углом  $45^\circ$  к поверхности КТ,  $\kappa^2 = 1.92$ , а в случае ориентации молекул параллельно поверхности КТ ( $\alpha = \pm 90^\circ$ )  $\kappa^2 = 1.07$ . Можно оценить значение ориентационного фактора  $\kappa^2$  при использовании в той же расчетной модели в качестве донора вместо КТ квантового стержня. В этом случае

для  $n = 14$  молекул акцептора максимально возможное среднее значение  $\kappa^2 = 2.90$ . Если все молекулы акцептора ориентированы под углом  $\alpha = 0^\circ$ ,  $\kappa^2 = 2.10$ ; при  $\alpha = \pm 45^\circ$   $\kappa^2 = 2.40$ , при  $\alpha = \pm 90^\circ$   $\kappa^2 = 0.70$ . Анализ приведенных оценок позволяет сделать вывод о большей перспективности использования квантовых стержней в качестве донора по сравнению с КТ (вследствие большего ориентационного фактора  $\kappa^2$ ).

**Т а б л и ц а 2.** Зависимость ориентационного фактора  $\kappa^2$  от углов  $\omega$ ,  $\theta$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  (в град) ориентации дипольных моментов переходов  $d$  донора (КТ) и  $a$  молекулы акцептора

Точка (рис. 3)	$\beta$	$\theta$	$\alpha$	$\omega$	$\kappa^2$
A	0	0	0	0	4.00
			$\pm 45$	45	2.00
			$\pm 90$	90	0.00
B	0	$\pm 45$ ; $\pm 135$	0	25	2.05
			+45	70	0.29
			-45	20	2.21
C	0	$\pm 90$	$\pm 90$	115	0.45
			0	90	0.00
			$\pm 45$	45	0.50
A	22.5	$\pm 90$	$\pm 90$	0	1.00
			0	28	3.33
			+45	73	0.32
B	22.5	$\pm 90$	-45	17	3.25
			$\pm 90$	118	0.78
			0	43	0.78
B	22.5	$\pm 90$	+45	88	0.001
			-45	2	0.15
			$\pm 90$	133	0.68
C	22.5	$\pm 90$	0	43	1.90
			+45	88	0.004
			-45	2	3.56
A	22.5	$\pm 90$	$\pm 90$	133	1.66
			0	123	0.44
			+45	168	1.39
B	22.5	$\pm 90$	-45	78	0.06
			$\pm 90$	213	1.02
			0	123	0.44

**Заключение.** Представлен анализ модельных исследований фотохромных систем с обратной модуляцией флуоресценции на основе полимерных наносфер, содержащих полупроводниковые квантовые точки CdSe/ZnS и молекулы фотохромного диарилэтена ДАЭ2. На основе известных соотношений теории индуктивно-резонансного переноса энергии (FRET) построена модель эффективности модуляции флуоресценции квантовых точек  $E(r)$ , вызванной фотохромными превращениями молекул ДАЭ2 за счет механизма FRET. Определены границы оптимальных параметров, влияющих на эффективность модуляции флуоресценции за счет FRET. Высокие эффективности FRET  $E \sim 0.7$  можно достичь при расстояниях между донорами и акцепторами  $r = 4.5$  нм, если на одну квантовую точку с квантовым выходом флуоресценции  $Q = 0.4$  приходится не менее  $n = 16$  молекул ДАЭ2 (либо при  $Q = 0.8$  и  $n = 8$ ), а также при расстояниях  $r = 3$  нм ( $Q = 0.1$  и  $n = 6$ ,  $Q = 0.4$  и  $n = 2$ ,  $Q = 0.8$  и  $n = 1$ ). Оценены параметры взаимной ориентации в пространстве дипольных моментов переходов донора и акцепторов и их влияние на эффективность FRET. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации структуры и технологии синтеза фотохромных люминесцентных наносфер.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф21РМ-134), Министерства образования Республики Беларусь (задание 1.5 ГПНИ “Фотоника и электроника для инноваций”, а также задание 2.1.04.01 ГПНИ “Химические процессы, реагенты и технологии, биорегуляторы и биоорхимия”).

- [1] J. Zhang, Q. Zou, H. Tian. *Adv. Mater.*, **25** (2013) 378—399
- [2] R. Klajn, J. F. Stoddart, B. A. Grzybowski. *Chem. Soc. Rev.*, **39** (2010) 2203—2237
- [3] J. Cusido, E. Deniz, F. M. Raymo. *Eur. J. Org. Chem.*, **13** (2009) 2031—2045
- [4] Y. Hasegawa, T. Nakagawa, T. Kawai. *Coord. Chem. Rev.*, **254** (2010) 2643—2651
- [5] F. M. Raymo, M. Tomasulo. *J. Phys. Chem. A*, **109** (2005) 7343—7352
- [6] *Molecular switches*, Ed. B. L. Feringa, Weinheim, Wiley-VCH (2001) 37—60
- [7] S. A. Díaz, G. O. Menéndez, M. H. Etchehon, L. Giordano, T. M. Jovin, E. A. Jares-Erijman. *ACS Nano*, **5** (2011) 2795—2805
- [8] I. Yildiz, E. Deniz, F. M. Raymo. *Chem. Soc. Rev.*, **38** (2009) 1859—1867
- [9] I. Yildiz, M. Tomasulo, F. M. Raymo. *J. Mater. Chem.*, **18** (2008) 5577—5584
- [10] M. Irie, T. Fukaminato, K. Matsuda, S. Kobatake. *Chem. Rev.*, **114** (2014) 12174—12277
- [11] V. A. Barachevsky, O. V. Venidiktova, O. I. Kobeleva, A. M. Gorelik, A. O. Ayt, M. M. Krayushkin, A. R. Tameev, G. I. Sigeikin, M. A. Saveliev, G. T. Vasilyuk. *IEEEENANO-2015: Nanotechnology, Proc. IEEE* (2015) 358—361
- [12] P. V. Karpach, A. A. Scherbovich, G. T. Vasilyuk, V. I. Stsiapura, A. O. Ayt, V. A. Barachevsky, A. R. Tuktarov, A. A. Khuzin, S. A. Maskevich. *J. Fluoresc.*, **29**, N 6 (2019) 1311—1320
- [13] V. A. Barachevsky, O. I. Kobeleva, A. O. Ayt, A. M. Gorelik, T. M. Valova, M. M. Krayushkin, V. N. Yarovenko, K. S. Levchenko, V. V. Kiyko, G. T. Vasilyuk. *Opt. Mater.*, **35** (2013) 1805—1809
- [14] В. А. Барачевский, О. И. Кобелева, О. В. Вендиктова, А. О. Айт, Г. Т. Василюк, С. А. Маскевич, М. М. Краюшкин. *Кристаллография*, **64**, № 4 (2019) 820—824 [V. A. Barachevsky, O. I. Kobeleva, O. V. Venidiktova, A. O. Ayt, G. T. Vasilyuk, S. A. Maskevich, M. M. Krayushkin. *Crystallogr. Rep.*, **64**, N 5 (2019) 823—827]
- [15] V. A. Barachevsky, O. V. Venidiktova, T. M. Valova, A. M. Gorelik, R. Vasiliev, A. Khuzin, A. R. Tuktarov, P. V. Karpach, V. I. Stsiapura, G. T. Vasilyuk, S. A. Maskevich. *Photochem. Photobiol. Sci.*, **18** (2019) 2661—2665
- [16] A. A. Scherbovich, S. A. Maskevich, P. V. Karpach, G. T. Vasilyuk, V. I. Stsiapura, O. V. Venidiktova, A. O. Ayt, V. A. Barachevsky, A. A. Khuzin, A. R. Tuktarov, M. Artemyev. *J. Phys. Chem. C*, **124** (2020) 27064—27070
- [17] A. Fedosyuk, A. Radchanka, A. Antanovich, A. Prudnikau, M. A. Kvach, V. Shmanai, M. Artemyev. *Langmuir*, **32**, N 8 (2016) 1955—1961
- [18] A. Sukhanova, K. Even-Desrumeaux, P. Chames, D. Baty, M. Artemyev, V. Oleinikov, I. Nabiev. *Nat. Protoc. Protoc. Exch.* (2012), doi: 10.1038/protex.2012.042
- [19] B. Wieb VanDerMeer. *Methods Appl. Fluoresc.*, **8**, N 3 (2020) 030401
- [20] S. S. Vogel, T. A. Nguyen, B. W. van der Meer, P. S. Blank. *PLoS One*, **7**, N 11 (2012) e49593
- [21] M. Hardzei, M. Artemyev, M. Molinari, M. Troyon, A. Sukhanova, I. Nabiev. *Chem. Phys. Chem.*, **13** (2012) 330—335