

ОПТОХЕМОТРОННЫЕ СЕНСОРЫ - НОВЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ БИМЕДИЦИНСКИХ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ. 1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ, ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ, ФИЗИЧЕСКИЕ И МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ В ОПТОХЕМОТРОННЫХ СЕНСОРАХ

Методы анализа разнообразных объектов, находящихся в различных фазовых состояниях, основанные на регистрации фотонов люминесценции, испускаемой данными объектами, представляют особый интерес для биологических и медицинских исследований. Данный оптический канал позволяет получать разнообразную информацию о биофизических и биохимических процессах, протекающих в живых организмах на молекулярном уровне в норме и патологии, проводить диагностику заболеваний путем измерения люминесценции белковых молекул, клеток и более сложных структур, биологических жидкостей и пр. Люминесцентные методы анализа успешно применяют для контроля фармакокинетики и определения очень низких концентраций лекарственных препаратов в крови и других биожидкостях, при исследовании циркуляции крови, проходимости сосудов. Люминесценцию используют для изучения структуры биомолекул, поскольку люминесцентные параметры и характеристики (квантовый выход, время жизни возбужденного состояния, длина волны максимума в спектре люминесценции, собственно её спектр, поляризация, перенос энергии электронного возбуждения и др.) очень чувствительны к изменению свойств окружения. Это дает возможность изучать конформационные процессы биополимеров, миграцию энергии в биосистемах, структуру и свойства биомембран и др. [1,2]. В биомедицинских исследованиях и практике также весьма широко используют хемилюминесцентные методы анализа жидких проб, основанные на испускании света в химических реакциях, протекающих с выделением энергии, достаточной для образования продуктов в электронно-возбужденном состоянии, включая «световые» реакции в живых организмах - биохемилюминесценцию [3,4].

Целью настоящей и последующих публикаций является исследование путем математического моделирования и сопоставления с экспериментальными результатами достаточно сложных процессов, протекающих в устройствах, предназначенных для проведения электрохемилюминесцентного анализа (ЭХЛА). Данный метод основан на эффекте электрохимической люминесценции (ЭХЛ), испускаемой растворами органических соединений при фарадеевском электролизе в рекомбинационных процессах электрогенерированных ион-радикалов электрохемилуминофоров. Именно, речь идет о малогабаритных сенсорах - новых элементах оптохемотроники. Применение полученных результатов позволит создавать оптимизированные конструкции оптохемотронных (ОХ) сенсоров и основанных на них аналитических систем в целом [5]. Подобные системы являются составной частью современных медико-биологических и экологических диагностических систем, использующих, в том числе, возможности средств телекоммуникации в сочетании с оптоволоконными системами при передаче данных для проведения дистанционной диагностики и лечения.

Для дальнейшего рассмотрения данной проблемы необходимо ввести некоторые основные определения и положения. На рис. 1 изображена общая схема процесса ЭХЛ. В объеме ячейки (сенсора) находятся растворенные вещества А и Х, последнее подлежит определению (молекулы растворителя на рисунке изображены светлыми сфероидами малого радиуса). При подаче отрицательного импульса молекулы А восстанавливаются на катоде, переходя в анион-радикалы $A^{\cdot-}$, приобретая электроны, в тоже время вещество Х, находящееся в растворе вблизи анода, окисляется, теряя электрон (стрелка 1 на рис. 1). Катион-радикалы $X^{\cdot+}$ устремляются к катоду, и, подойдя на достаточно близкое расстояние к $A^{\cdot-}$, вступают в реакцию с образованием АК - активированного комплекса ($A^{\cdot-} \dots X^{\cdot+}$)[#], время жизни которого мало и зависит от природы веществ А и Х (стрелка 2). После распада АК образуется две мо-

лекулы: возбужденная A^* (стрелка 3) и невозбужденная X (стрелка 4). Молекула A^* испускает квант ЭХЛ γ_{ecl} , переходя в основное состояние (стрелка 5), замыкая тем самым цикл превращений, протекающих в оптохемотронном сенсоре (ОХ). Под действием отрицательного импульса напряжения A вновь восстанавливаются на катоде (стрелка 6), повторяя данный цикл. В рассмотренном случае вещество A является люминофором - реагентом для X , определение которого в таком случае проводится непрямым (или косвенным) ЭХЛА, являющимся гораздо более распространенным. Существует, однако, обширный класс систем, в которых люминесцирует само определяемое вещество; основанный на этом метод анализа называется прямым ЭХЛА (вещества A и X тождественны, для условности пусть это будет вещество A).

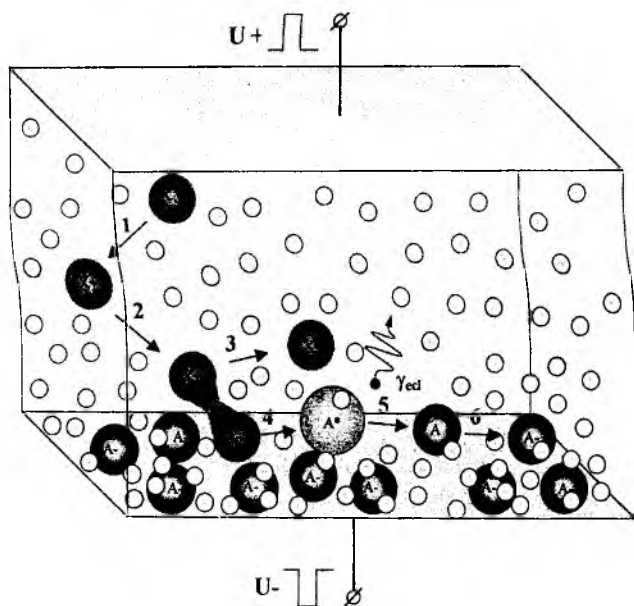


Рис. 1

Следует ввести определение оптохемотронного сенсора. Под ОХ-сенсором понимается оптически прозрачный сосуд (ячейка) необходимой конфигурации с введенными во внутрь электродами - рабочим(и), вспомогательным, сравнения и жидкой пробой с определяемым веществом X .

Рабочий электрод обычно изготавливают с помощью микро- или нанотехнологий, и, размещаясь на одной из внутренних стенок ячейки, он выполняет функции и электрода, и датчика сенсора, рис.2. Вводимая в рабочую область (1) сенсора проба (4), содержащая вещество X , перемещаясь вдоль электродов - датчиков сенсора (2,3), одновременно подвергаясь электролизу, реагирует (рекомбинирует) с электрохемилюминофором-реагентом A с испусканием аналитического сигнала - квантов ЭХЛ γ_{ecl} . Существенным является наличие двух каналов сенсора - входного электрохимического (гальванического) с напряжением U_{el} и оптического выходного, через который передается аналитический сигнал в виде квантов ЭХЛ, что обеспечивает полную электрическую развязку и высокую помехозащищенность между каналами сенсора. Это важно при использовании таких устройств в системах передачи данных и связи.

Разработка эффективных ОХ-сенсоров для вышеуказанных диагностических целей на разные определяемые объекты (их также именуют аналиты или вещества-мишени), важные с точки зрения медико-биологической, фармацевтической и экологической диагностики, требует проведения комплекса теоретико-экспериментальных и технологических работ, включающих использование современных методов нанотехнологии, тонкой химической технологии, физико-химического анализа и пр. Отсюда очевидна важность и актуальность создания адекватных физических и математических моделей электронных, ионных и фотонных процессов, протекающих в ОХ-сенсорах, с последующим компьютерным моделированием и анализом.

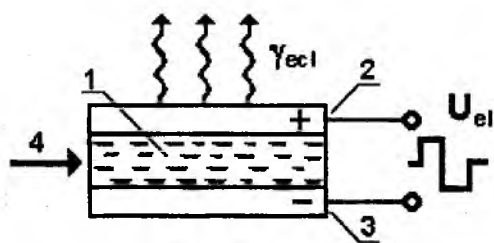
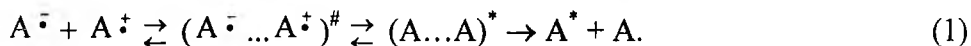


Рис. 2

Для осуществления поставленной цели необходимо провести возможно более полное теоретическое описание различных стадий процесса ЭХЛ в оптохемотронном сенсоре, включающих: гетерогенный (на границе электрод/раствор) и гомогенный (между ион-радикалами A при их парных рекомбинациях) перенос заряда, транспорт вещества в системе, осуществ-

ляемого путем диффузии, конвекции и миграции, образование возбужденных продуктов при рекомбинации, испускание квантов света. В первом приближении при этом можно не учитывать вклад иных процессов и физических полей, имеющих место в системе и воздействующих на указанные стадии.

Так, после стадий электрохимических фарадеевских процессов и образования частиц A^- и A^+ их сближение, вплоть до рекомбинации (см. рис. 1), приводит к возникновению АК $(A^- \dots A^+)^{\#}$, откуда возможны переходы в конечное состояние с образованием продуктов реакций переноса электрона (РПЭ), в том числе эмиттеров ЭХЛ A^* . Отсюда, упрощенная химико-физическая модель процесса ЭХЛ может быть описана схемой [5]:



Некоторые вышеупомянутые задачи, важные при моделировании эффективных ОХ-сенсоров, достаточно хорошо изучены и имеется соответствующий физико-математический аппарат. Например, моделирование транспорта осуществляется с помощью формального и известного аппарата, описывающего диффузионный перенос вещества в жидких средах и конвекции (например, движение среды вдоль плоского электрода), которая относится к прерогативе физико-химической гидродинамики [6]. При этом, макроскопическую кинетику электролизных рекомбинационных процессов определяют, если известны пространственные распределения (концентраций) реагентов, продуктов и динамика их изменений во времени. Эти распределения находят, решая задачу массопереноса в подвергаемой электролизу жидкой среде с заданными макроскопическими химико-физическими характеристиками, начальными и краевыми условиями для процессов рождения, гибели и рекомбинации частиц электрохемилюминофора и реагента.

Перенос заряженных частиц в электролитах моделируют с помощью формального аппарата электродинамики сплошных сред [7]. Процессы переноса заряда при рекомбинациях типа реагент-аналит (мишень) можно описывать с помощью аппарата теории реакций переноса электрона в конденсированных средах - сплошных диэлектриках, включая теорию полярона, которая применима и для переноса заряда на межфазной границе электрод-раствор электролита [5,7].

Процессы, протекающие на межфазной границе, следует моделировать с учетом адсорбции вещества, включая математическое моделирование процесса и соответствующие квантово-химические расчеты. Ввиду важности и малоизученности данного вопроса рассмотрим его несколько подробнее, особенно учитывая проявление таких эффектов в водных средах и биожидкостях, вводимых в качестве проб в ОХ-сенсоры. В [8] предложена модель неспецифической электростатической адсорбции на поверхности металла, обобщенная на случай адсорбционных явлений в растворах-электролитах. Энергия кулоновского взаимодействия между бесконечной проводящей поверхностью и молекулой адсорбата рассчитывается с использованием так называемого метода изображений, в рамках которого задача сводится к вычислению энергии взаимодействия между системой зарядов в исходной молекуле и ее антиобразом [7]. С использованием π -электронного приближения в ограниченном методе Хартри-Фока в [8] отмечено, что при взаимодействии с поверхностью металла молекулы с делокализованными связями распределение зарядов в исходной молекуле существенно меняется. Использование данного подхода при описании поведения молекул в электролитах вносит значительные ошибки, связанные с неучетом роли двойного электрического слоя (ДЭС). Между тем поле ДЭС существенно воздействует как на электронную оболочку молекул (деформируя и поляризуя ее), так и на энергию адсорбции. В случае неполярных молекул поле ДЭС полностью определяет электростатический вклад в адсорбционное взаимодействие. Для большей корректности в данной модели следует учесть влияние электронов σ -остова молекул, расширив ее за рамки π -электронного приближения, а также, посредством введения резонансных интегралов между молекулой и ее изображением, рассмотреть эффекты специфического взаимодействия с металлом, а также с растворителем.

Наиболее важную и на данный момент наименее изученную проблему создания эффективных ОХ-сенсоров и оптимизации их свойств представляет расчет, в рамках соответствующих моделей молекулярных систем аналит-мишень, кинетики рекомбинации их реакционно-активных ион-радикальных (или радикальных) форм, образованных ими лабильных активированных комплексов $(A^{\cdot-} \dots X^{\cdot+})^{\#}$ и продуктов реакции, в первую очередь, электронно-возбужденных, испускающих люминесцентный аналитический сигнал. Данные вопросы относятся к прерогативе таких научных дисциплин, как квантовая механика, химическая кинетика, квантовая химия, люминесценция. Именно, знание таких фундаментальных свойств указанных молекулярных систем, как электронная структура, энергетика частиц и их АК, получаемых при квантово-химических расчетах, представляет основу для построения ОХ-сенсоров с заданными свойствами и реализации их широких диагностических возможностей. Так, например, данные расчеты в совокупности с имеющейся технологией изготовления мономолекулярных упорядоченных структур могут подсказать наиболее рациональные пути создания реагентов с подходящей молекулярной структурой, их расположения на электродах сенсора и пр., что необходимо для повышения вероятности образования комплекса реагент-аналит и увеличения светового выхода реакции, т.е. для роста эффективности ОХ-сенсоров.

Теоретическое изучение свойств молекул на основе методов квантовой механики сводится к решению уравнения Шредингера (3) и определения волновой функции Ψ_j и собственных значений E_j :

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (2)$$

где \hat{H} - оператор Гамильтона (гамильтониан). После этого возможно вычисление характеристик молекулы, представляющих интерес - молекулярных орбиталей, их энергий, полной энергии, энергии ионизации и пр. В адиабатическом приближении полная волновая функция системы может быть представлена как произведение электронной волновой функции, зависящей от координат ядер как от параметров, и ядерной волновой функции. Первая из них является собственной функцией электронного гамильтониана, который в пренебрежении магнитными (релятивистскими) взаимодействиями имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i + \sum_{i>j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (3)$$

$$\hat{H}_i \equiv \hat{H}(r_i) = -\frac{\nabla^2}{2} - \sum_A \frac{Z_A}{|\vec{r}_i - \vec{R}_A|}, \quad (4)$$

где Z_A и \vec{R}_A - заряд и радиус-вектор A -го ядра соответственно, а \vec{r}_i - радиус-векторы электронов (используется атомная система единиц с $m=e=\hbar=1$). Суммирование в (3) проводится по всем электронам, а в (4) - по всем ядрам атомов, составляющих молекулу.

Решение уравнения (2) для сложных систем, таких, как молекулы органолюминофоров, сопряжено с большими математическими трудностями и фактически возможно приближенными методами. Наиболее эффективным и распространенным является изложенный Рутааном метод молекулярных орбиталей (МО) [9]. В рамках метода МО электрон в молекуле рассматривается как частица, находящаяся в эффективном самосогласованном поле, создаваемом всеми остальными электронами и ядрами. Математически это означает возможность описания движения электрона одночастичной волновой функцией, зависящей только от координат данного электрона, и называемой молекулярной спин-орбиталью $\Psi(\xi)$, где ξ - совокупность пространственных и спиновых переменных. При этом волновая функция всей молекулы, в соответствии с принципом Паули, представляется в виде антисимметризованного произведения (детерминанта) одночастичных функций $\Psi(\xi)$, которые в рассматриваемом

приближении могут быть записаны как произведение координатной и спиновой частей

$$\Psi(\xi) = \varphi(\vec{r})\alpha(\sigma). \quad (5)$$

Функции $\varphi(\vec{r})$ называются молекулярными орбиталями.

Вывод уравнений Рутаана основан на следующих предположениях:

1) волновая функция φ_i i -го электрона в молекуле, т.е. МО, выбирается в форме линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО), т.е.

$$\varphi_i = \sum_k c_{ki} \chi_k, \quad (6)$$

где χ_k - волновая функция (атомная орбиталь) электрона в атоме k , c_{ki} - коэффициент, учитывающий вклад k -ой атомной орбитали в i -ю молекулярную орбиталь;

2) молекулярные орбитали считаются ортогональными и нормированными, т.е.

$$\int \varphi_i^* \varphi_k d\tau = \delta_{ik}, \quad (7)$$

где φ_i^* - комплексно-сопряженная к φ_i волновая функция;

3) полная $2N$ -электронная волновая функция основного состояния молекулы представляется в виде слэтеровского детерминанта (N - число электронных пар)

$$\Phi_{2N} = \frac{1}{[2N!]^{\frac{1}{2}}} \begin{vmatrix} \varphi_1\alpha(1) & \varphi_1\beta(1) & \dots & \varphi_N\beta(1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1\alpha(2N) & \varphi_1\beta(2N) & \dots & \varphi_N\beta(2N) \end{vmatrix}; \quad (8)$$

4) гамильтониан системы (молекулы) задается выражением (3);

5) полная энергия системы определяется интегралом

$$E = \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau, \quad (9)$$

где τ - элемент объема.

Минимизация уравнения (9) при условии (7) приводит к уравнениям

$$\sum_l C_{il} (F_{kl} - S_{kl} E) = 0, \quad (10)$$

$$\det |F_{kl} - S_{kl} E| = 0. \quad (11)$$

Решение уравнений (10) и (11) дает уровни энергии E молекулы и молекулярные орбитали. Данные уравнения называются уравнениями Рутаана, первым получившим их, применив вариационный метод непосредственно к выражению для полной энергии

$$E = 2 \sum_m E_m + \sum_m \sum_n (2I_{mn} - K_{mn}), \quad (12)$$

где E_m - сумма кинетической и потенциальной энергии, обусловленной притяжением электрона на орбитали ψ_m к ядрам, I_{mn} , K_{mn} - соответствующие орбитальные интегралы [9].

В (11) и (12) входят матричные элементы F_{kl} и S_{kl} . Величина S_{kl} называется интегралом перекрытия, отражает неортогональность волновых функций электронов χ_n и χ_m . Поскольку физический смысл ортогональности - несовместимость соответствующих состояний, то в данном случае состояния χ_n и χ_m не являются взаимно исключаящими (т.е. имеется область, где нельзя указать, находится ли электрон в состоянии χ_n или χ_m). F_{kl} есть

матричный элемент гамильтониана с учетом электрон-электронного взаимодействия.

Наилучшими молекулярными орбиталями в форме ЛКАО являются собственные функции оператора \hat{F} с матричными элементами F_{kl} , зависящими от коэффициентов, с которыми в выражение для молекулярной орбитали входят атомные орбитали. Сущность метода самосогласованного поля (ССП), предложенного Рутааном, заключается в следующем.

Задаются произвольным набором коэффициентов c_{ki} и находят F_{kl} .

Для найденных F_{kl} определяют ϵ_i - множители Лагранжа, соответствующие по физическому смыслу задачи собственным значениям полной энергии E .

Для нового набора коэффициентов c_{ki} опять находят F_{kl} и т.д. до тех пор, пока не будет найден «самосогласованный» набор коэффициентов, который определяется значениями F_{kl} , приводящими к исходным значениям c_{ki} . При этом предполагают, что матричные элементы S_{kl} и H_{kl} можно вычислить.

Расчеты матричных элементов, входящих в уравнение Рутаана, обычно связаны с математическими трудностями решения задачи (из-за этого, например, часто при выборе исходного набора коэффициентов пренебрегают электрон-электронным взаимодействием). Поэтому желательно использовать более простые способы оценки матричных элементов, что достигают с помощью полумпирических методов. В настоящее время разработано большое число таких методов, которые успешно применяются для проведения квантово-механических расчетов свойств молекул. В последующих работах мы изложим результаты использования наиболее значимых современных методов, с учетом их необходимой модернизации, для расчета соответствующих процессов в ОХ-сенсорах диагностических систем, предназначенных для детектирования объектов медико-биологической и фармакологической природы.

Следует подчеркнуть, что использование результатов таких расчетов позволяет, в принципе, определять не только электронные свойства, строение и кинетику рекомбинации рассматриваемых молекулярных систем ОХ-сенсоров, но и процессы электронного возбуждения молекул органолюминофоров при электролизе, что существенно для оптимизации аналитического сигнала. Иницируемое электродными реакциями химическое возбуждение молекул электрохемилюминофора в *бирадикальных межмолекулярных рекомбинациях*, существенно отличаясь от оптического, обратного *внутримолекулярной* электронной релаксации, есть процесс непосредственного заселения излучательных электронных состояний без выполнения известного правила запрета внутримолекулярных переходов с изменением мультиплетности состояний. Необходимо, однако, соблюдение закона сохранения энергии в гомогенной бирадикальной рекомбинации РПЭ: сумма энтальпии $-\Delta H_0$ и энергии активации ΔG^\ddagger должна быть не меньше энергии электронно-возбужденного состояния продукта A^* . Отличительная особенность ЭХЛ - очень высокие экзоэргичность и скорость «световых» бирадикальных рекомбинаций [5], обусловленные запасом энергии реагентов, полученным при фарадеевском электролизе. Это приводит при рекомбинации к образованию пары продуктов $(A...A)^*$ с избытком электронной энергии (несколько эВ), которая должна быть отдана среде или в виде низкочастотных квантов колебаний ядерных остовов молекул - фононов, или высокочастотных - фотонов. Размен такой энергии на фононы маловероятен [5]. Значительно более вероятной и быстрой является перестройка электронной оболочки одного из компонентов пары $(A...A)^*$ до конфигурации электронно-возбужденного состояния $^1A^*$ или 3A . Процесс существенно ускоряется, если электронное строение переходного состояния близко к конфигурации пары $(A...A)^*$, что справедливо для бирадикальных рекомбинаций между анион-радикалом и катион-радикалом данной родительской молекулы. Поэтому весьма высоки константы скорости k_{bi} гомогенных адиабатических ($\chi_{tr} \approx 1$) рекомбинаций (13), т.е. I_{ecl} ($\sim 10^{12}$ фотон/см²·с), а также эффективность процесса ЭХЛ Φ_{ecl} ($\sim 1 \div 10\%$):

$$k_{bi} = \chi_{tr} k_d \exp(-\Delta G^\ddagger / RT), \quad (13)$$

где $k_d = 8RT/3000\eta$ - константа скорости диффузионных встреч (η - вязкость растворителя, П); $k_d \sim 10^9 \div 10^{10} (\text{М}\cdot\text{с})^{-1}$ в распространенных растворителях при $T=298^\circ \text{К}$. Данное выражение получено Р.Маркусом в рамках теории абсолютных скоростей реакций, приближения Борна-Оппенгеймера и модели реорганизации растворителя [5].

Более подробное исследование молекулярных систем требует знания их потенциальной энергии. Определение гиперповерхности потенциальной энергии (ППЭ) для реакции, как функции конфигурационных координат q реагентов и продуктов, является необходимым предварительным шагом для вычисления хода рекомбинации по данной координате (или набору координат). Это также позволяет определить межюнное расстояние, на котором вероятность переноса электрона наибольшая. Такая информация способствует подбору (или направленному синтезу) селективных реагентов с заданным строением и, одновременно, путем выбора наиболее эффективной взаимной конфигурации пары реагент-мишень, получению более высокой интенсивности аналитического сигнала. При этом учитывают, что перенос электрона от донора A^- к акцептору A^+ в конденсированной среде, т.е. переход из одного дискретного энергетического состояния в иное, описывается фундаментальным адиабатическим приближением Борна-Оппенгеймера, основанном на учете значительного отличия масс легкой (электрон) и тяжелой (ядра атомов в молекулах и ион-радикалах электрохемилюминофора, растворителя) подсистем. Это позволяет считать, что электроны в каждый момент времени занимают квазиравновесное положение при данной конфигурационной координате, отвечающее неподвижным ядрам и, таким образом, определять спектр дискретных энергий электрона. Согласно принципу Франка-Кондона, безызлучательные электронные переходы происходят между состояниями с одинаковой

конфигурацией тяжелой подсистемы, т.е. при совпадении в многомерном пространстве координат q ППЭ исходного состояния пары реагентов R и пары продуктов P^* , одним из которых есть электронно-возбужденная молекула - эмиттер, рис. 3. Сечения параболических ППЭ системы вдоль пути реакции в зависимости от координат q ядер реагентов R и продуктов P бирадикальных рекомбинаций можно разделить на два основных типа, как это показано на рис.3:

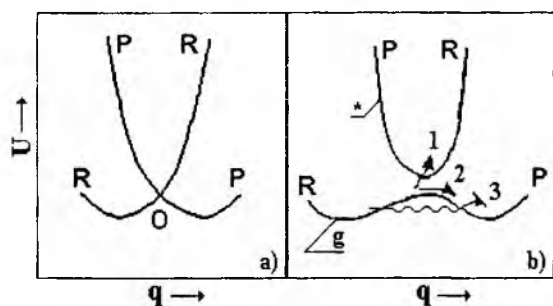


Рис. 3

а) - адиабатические ППЭ, электронные орбитали партнеров практически не взаимодействуют, б) - адиабатические ППЭ основного (g) и электронно-возбужденного ($*$) состояний, отличное от нуля взаимодействие: чем оно больше, тем больше расталкивание поверхностей R и P (стрелками схематически показаны адиабатический - 1, адиабатический - 2 и туннельный - 3 переходы системы через область АК) [5]. Решение рассмотренных задач в рамках адекватных моделей и методов расчета делает практически возможным реализацию эффективных ОХ-сенсоров. Именно благодаря возможности на основе моделей и их расчетов прогнозировать ход анализа и диагностики, необходимо построение адекватных моделей процессов в сенсорах. Однако, даже на современном этапе развития имеются недостатки в существующих моделях, которые следует устранять разработкой более совершенных моделей, описывающих с достаточной степенью приближения реальные процессы. Это даст возможность рассматривать вопрос создания ОХ-сенсоров с научной позиции, существенно снижая трудоемкость их разработки, делая эти приборы более дешевыми и доступными, что повысит перспективность их применения в различных областях. Явления, протекающие в ОХ-сенсоре, характерны не только для данных объектов, и изучение их сущности позволит понять и правильно описать многие другие объекты, в

которых протекают подобные процессы (речь прежде всего идет о процессах переноса электрона - фундаментальных процессах в физике, химии, биофизике).

Из вышесказанного очевидна важность разработки новых эффективных и селективных ОХ-сенсоров для определения различных аналитических систем, существенных для отмеченных приложений. Для этого, по мнению авторов, необходимо использовать математическое моделирование процессов, протекающих в ОХ-сенсоре, как наиболее рациональный и достаточно результативный способ проведения исследований с целью анализа системы. В частности, на основании моделей квантовой механики и квантовой химии в рамках соответствующих полуэмпирических методов проводится компьютерный расчет химической кинетики. В ходе моделирования исследуют этапы процесса рекомбинации, и явлений, ее сопровождающих, как, например, испускание квантов света возбужденными молекулами люминофора - продуктами реакции. С учетом изложенного подхода, обосновывающего актуальность поставленной проблемы, данные вопросы предполагается рассмотреть и проанализировать в последующих статьях авторов, посвященных этой тематике.

Список литературы: 1. Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. Органические люминофоры: Изд. 2-е. /Под общ. ред. Б.М. Красовицкого. М.: Химия, 1984. С.116-117. 2. Владимиров Ю.А., Добрецов Г.Е. Флуоресцентные зонды в исследовании биологических мембран. М.: Наука, 1980. 320с. 3. Барашков Н.Н. Люминесцентный анализ на службе здоровья. М.: Наука, 1985. 96с. 4. Хемиллюминесценция крови в экспериментальной и клинической онкологии / Серкиз Я.И., Чеботарев Е.Е., Барабой В.А. и др. / Под общ. ред. В.А. Барабои, Е.Е. Чеботарева. К.: Наук. думка, 1984. 183с. 5. Рожницкий Н.Н., Бых А.И., Красноголовец М.А. Электрохимическая люминесценция. Харьков: ХТУРЭ. 2000. 320с. 6. Левич В.Г. Физико-химическая гидродинамика. М.: Изд-во АН СССР, 1952. 538с. 7. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1964. 532с. 8. Высоцкий С.Б., Брянцев В.С. Квантово-химическая модель адсорбции органических молекул на поверхности металла в растворах электролитов // Теор. и exper. химия.1999. Т. 35, № 5. С.284-288. 9. Голованов И.Б., Пискунов А.К., Сергеев Н.М. Элементарное введение в квантовую биохимию. М.: Наука, 1969. 236с.

*Харьковский национальный
университет радиоэлектроники*

Поступила в редакцию 11.10.2001