

4. Ландау Л. Д. О термодинамике фотолюминесценции.— Собр. тр. в 2 т. М.: Наука, 1969, т. 2, с. 26—31.
5. Weinstein M. A. Thermodynamic limitation on the conversion of heat into light.— JOSA, 1960, v. 50, N 6, p. 597—602.
6. Landsberg P. T., Evans D. A. Thermodynamic limits for some light-producing devices.— Phys. Rev., 1968, v. 166, p. 242—246.
7. Чукова Ю. П. Термодинамический предел коэффициента полезного действия люминесценции.— Письма в ЖЭТФ, 1969, т. 10, с. 458—460; Влияние характеристик линии возбуждения на эффективность спектрального преобразования энергии ионами трехвалентного неодима в иттрий-алюминиевом гранате.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1974, т. 38, с. 1190—1192; Область термодинамической допустимости световых КПД, превышающих единицу.— ЖЭТФ, 1975, т. 68, с. 1234—1240; Термодинамический предел КПД антистоксовых люминофоров.— ЖПС, 1974, т. 20, с. 412—416.
8. Perrin C. L. Thermodynamic limitation in chemiluminescent reactions.— JACS, 1975, v. 97, p. 4419—4421.
9. Lissi E. On the entropic control of chemiluminescent reaction.— JACS, 1976, v. 98, p. 3386—3387.
10. Wilson E. B. Does the second law of thermodynamics restrict chemiluminescent reactions?— JACS, 1976, v. 98, p. 3387—3388.
11. O'Neal H. E., Richardson W. H. The thermochemistry of 1,2-dioxetane and its methylated derivatives. An estimate of activation parameters.— JACS, 1970, v. 92, p. 6553—6557.
12. Lechtken P., Höhne G. Thermolysis of tetramethyl-1,2-dioxetane.— Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 1973, v. 12, p. 772—773.
13. Steinmetzer H. C., Yekta A., Turro N. J. Chemiluminescence of tetramethyl-1,2-dioxetane. Measurement of activation parameters and rates of exceedingly slow reactions by a simple and «nondestructive» method. Demonstration of indistinguishable activation energies for generation of acetone singlets and triplets.— JACS, 1974, v. 96, p. 282—284.
14. Turro N. J., Lechtken P. Thermal and photochemical generation of electronically excited organic molecules. Tetramethyl-1,2-dioxetane and naphthalene.— Pure Appl. Chem., 1973, v. 33, p. 363—388.
15. Бых А. И., Васильев Р. Ф., Рожицкий Н. Н. Электрохемилуминесценция растворов органических соединений.— В кн.: Радиационная химия. Фотохимия. М.: ВИНТИ, 1979, т. 2.—135 с.
16. Chukova Yu. P. Thermodynamic upper limit for energy efficiency of injection light source under various conditions of excitation.— Proceedings of the Intern. confer. on the physics and chemistry of semiconductor heterojunct. and layer structures. Budapest, 1971, v. 2, p. 239—247.
17. Bezman R., Faulkner L. R. Mechanism of chemiluminescent electron-transfer reactions. V. Absolute measurements of rubrene luminescence in benzonitrile and NN-dimethylformamide.— JACS, 1972, v. 94, p. 6324—6330.
18. Periasamy N., Santhanam K. S. V. Studies of efficiencies of ECL of rubrene.— Proc. Indian. Acad. Sci., 1974, v. A80, p. 194—206.
19. Wilson T., Schaap A. P. The chemiluminescence from *cis*-Diethoxy-1,2-dioxetane. An unexpected effect of oxygen.— JACS, 1971, v. 93, p. 4126—4136.
20. Карапетьянц М. Х., Карапетьянц М. Л. Основные термодинамические константы неорганических и органических веществ.— М.: Химия, 1968.—470 с.
21. Чукова Ю. П. О предельной эффективности преобразования световой энергии в химическую.— Химия высоких энергий, 1977, т. 11, с. 126—131.
22. Физический энциклопедический словарь.— М., 1962, т. 2, с. 509.
23. Чукова Ю. П. Термодинамические ограничения КПД хемилуминесценции: Тез. докл. IV Всесоюз. совещания по фотохимии (Ленинград, 18—20 ноября 1981 г.). Л., 1981, с. 263.

Поступило в редакцию 06.07.80.

УДК 621.373.3:535.37

О. К. Базыль, Г. В. Майер, Т. Н. Копылова, В. И. Данилова

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ, СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ И ГЕНЕРАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ПИРЕНА И ЕГО ФЕНИЛЭТИНИЛЬНЫХ ЗАМЕЩЕННЫХ

В последнее время прогресс в исследовании генерации сложных органических молекул в значительной мере связан с применением расчетных методов квантовой химии [1—5], поскольку такой подход позволя-

ет установить связь генерационной способности молекул с их строением. В частности, в рамках развитого подхода [4] был предсказан ряд новых лазерно-активных сред на основе бензоксазола, обеспечивших спектрально-перестраиваемую генерацию в УФ области спектра.

Следует отметить, что подавляющее число генерирующих красителей относится к гетероароматическим соединениям. Из класса конденсированных углеводов лазерное излучение в растворах генерируют немногие, а в парах — еще меньше [6, 7]. В связи с этим задача получения новых лазерно-активных сред на основе конденсированных углеводов представляет интерес.

Было показано, что арилацетиленовые производные с протяженной электронной системой, ацетиленовые производные полициклических углеводов [8] и бензоксазолов [9, 10] обнаруживают интенсивную флуоресценцию. На примере нафталина [5] была установлена целесообразность введения фенилэтинильных заместителей для получения генерационноспособных молекулярных структур.

Проведенное исследование пирена и его фенилэтинильных замещенных, помимо названной выше, преследовало следующие цели. Во-первых, необходимо было установить причины улучшения спектрально-люминесцентных свойств и генерационной способности молекул при введении данного заместителя. Во-вторых, получение новых лазерно-активных сред для видимого диапазона имело практическое значение, поскольку известные активные среды (кумарины, пирилиевые соли и др.) не отличаются высокой фотостабильностью. Ограниченная растворимость в неполярных растворителях также затрудняет их использование при поиске генерации в газовой фазе, хотя на некоторых сложных соединениях, содержащих кумарины в качестве фрагментов, эффект был обнаружен [11]. Следует отметить, что применение методов квантовой химии при решении задач планомерного поиска и последующего синтеза лазерно-активных сред пока в основном ограничивается нахождением формальных связей между структурой молекул и их генерационной способностью. Несмотря на очевидные достоинства такого подхода [2, 4], целесообразна постановка исследований по более углубленному пониманию механизмов формирования лазерно-активных уровней, их природы, зависимости относительного расположения разрешенных и запрещенных синглетных $\pi\pi^*$ -состояний от топологии молекулярных систем, что позволит в дальнейшем сформулировать ряд качественных правил связи генерационной способности со строением и энергетическим спектром молекул.

В частности, в работе [5] было показано, что эффективность генерации во многом определяется величиной энергетической щели (ΔE) между нижним разрешенным электронным состоянием $S_1(\pi\pi^*)$ (с большой величиной силы осциллятора f электронного перехода $S_0 \rightarrow S_1$) и следующим запрещенным $S_2(\pi\pi^*)$ -состоянием (с близкой к нулю величиной силы осциллятора $S_0 \rightarrow S_2$ перехода). В то же время для большинства сравнительно малых базисных молекул (таких, как нафталин, бензоксазол, оксазол, пирен) характерно такое расположение нижних электронных синглетных состояний, когда нижним возбужденным состоянием является запрещенное, а следующим — разрешенное (либо величина $\Delta E \leq 2000 \div 3000 \text{ см}^{-1}$), и лишь замещение приводит к их инверсии (либо увеличению ΔE). В связи с этим возникает проблема зависимости ΔE от топологии системы.

Анализ спектрально-люминесцентных свойств и природы возбужденных состояний пирена. Расчет электронной структуры и спектров выполнен по методу Паризера — Парра — Попла [12] со схемой параметризации, предложенной в работах [13, 14]. При расчете спектральных характеристик учитывалось 40 однократно возбужденных конфигураций. Все рассчитанные молекулы приняты плоскими со следующими значениями длин связей и углов: в бензольных кольцах все углы при-

няты равными 120° , а длины связей — $0,140$ нм; длины одинарных и тройных С—С-связей соответственно равны $0,150$ и $0,121$ нм. Теоретико-групповой анализ электронных состояний пирена и его замещенных выполнен нами согласно [15].

Из результатов расчета видно (рис. 1, таблица), что нижнее возбужденное синглетное $S_1(\pi\pi^*)$ -состояние пирена является запрещенным ($f \ll 1$), что и обуславливает малый квантовый выход флуоресценции. Разрешенное $S_2(\pi\pi^*)$ -состояние расположено по энергии примерно на

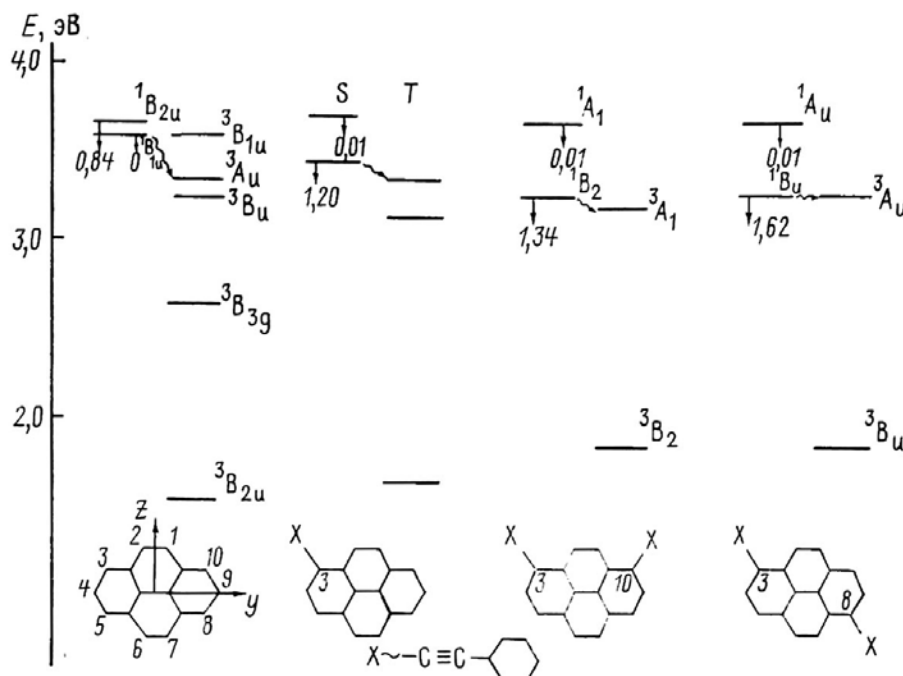


Рис. 1. Схема энергетических уровней пирена и некоторых из его фенилэтинильных замещенных, перспективных в генерационном отношении

1000 см^{-1} выше $S_1(\pi\pi^*)$ -состояния, что позволяет надеяться на инверсию этих состояний при введении заместителей.

Прежде чем перейти к рассмотрению замещенных с инвертированными S_1 - и S_2 -состояниями пирена, остановимся на анализе природы возбужденных состояний пирена.

Из результатов расчета следует, что длинноволновая $S_0 \rightarrow S_1$ малоинтенсивная ($f \ll 1$) полоса поглощения (таблица), поляризованная вдоль короткой оси молекулы, образована промотированием электрона с верхней занятой в основном состоянии молекулярной орбитали (8 МО) на вторую вакантную молекулярную орбиталь (МО 10) (рис. 2). Коротковолновое $S_0 \rightarrow S_2$ интенсивное ($f = 0,84$) поглощение (таблица), поляризованное вдоль длинной оси молекулы, сформировано промотированием электрона с 8-й МО на первую вакантную МО (9-ю). Из рис. 2 видно, что абсолютные величины коэффициентов разложения 8-й и 9-й МО по орбиталям всех атомов (АО) одинаковы.

Согласно классическим представлениям [16], это соответствует неизменности характера пульсации электронной плотности вдоль длинной оси молекулы при взаимодействии с падающей электромагнитной волной, что приводит к увеличению дипольного момента системы при возбуждении, а следовательно, к увеличению силы осциллятора перехода.

В то же время для молекулярных орбиталей 8 и 10 наблюдается резкое различие в распределении коэффициентов разложения МО по АО, и переход между ними в классическом понимании [16] соответствует изменению характера перемещения электронной плотности от пульсации вдоль длинной оси молекулы к пульсации вдоль короткой оси, что не приводит к сколько-нибудь значительному изменению дипольного мо-

**Спектрально-люминесцентные характеристики пирена и его
фенилэтинильных замещенных**

№ п/п	Соединение	λ_S , нм (f)	λ_T , нм	$\lambda_{S_1 \rightarrow S_1}^{max}$, нм (f)	$\lambda_{T_1 \rightarrow T_1}^{max}$, нм (f)	$k_r \cdot 10^{-6}, c^{-1}$	$k_{ic} \cdot 10^{-6}, c^{-1}$	$k_{ST} \cdot 10^{-6}, c^{-1}$	q
1	Пирен	347(10 ⁻⁴) 342(0,84)	895	452(0,96) 442(0,33) 365(0,16) 340(0,12)	396(0,13) 335(0,30) 323(0,12) 322(0,37) 293(0,32)	—	1	0,3	—
2	3-фенилэтинилпирен	365(1,20) 338(0,01)	380	873(0,47) 825(0,55) 614(0,16) 576(0,16)	392(0,32) 386(0,81) 378(0,13) 316(0,10) 310(0,16)	6	1	2	0,75
3	4-фенилэтинилпирен	343(0,01) 340(0,98)	351	610(0,50) 476(0,34) 438(0,24)	386(0,45) 344(0,63) 323(0,15)	—	1	2	—
4	2-фенилэтинилпирен	352(1,0) 337(0,02)	372	1303(0,22) 946(0,12) 793(0,13) 766(0,17)	410(0,56) 353(0,41) 326(0,14) 316(0,24)	5	1	2	0,71
5	3, 10-ди(фенилэти- нил)-пирен	386(1,34) 342(0,01)	390	724(0,74) 629(0,76)	696(0,12) 404(0,50) 390(0,16) 371(0,56)	6	6	7	0,46
6	3, 8-ди(фенилэти- нил)-пирен	386(1,62) 341(0,01)	386	779(1,31)	692(0,12) 420(1,10)	7	6	7	0,50
7	4, 9-ди(фенилэти- нил)-пирен	348(0,01) 337(1,15)	350	704(1,13) 613(0,09)	720(0,14) 385(0,14)	—	1	7	—
8	2, 7-ди(фенилэти- нил)-пирен	360(1,22) 338(0,02)	377	1191(0,34) 684(0,16)	541(0,22) 459(0,51)	6	1	2	0,75

Примечание. $\lambda_S(f)$ — длина волны (силы осцилляторов) $S_0 \rightarrow S_1$ полос поглощения; λ_T — положения триплетных состояний, участвующих в процессах $S_1^1 \rightarrow T$ -конверсии; $\lambda_{S_1 \rightarrow S_1}^{max}(f)$, $\lambda_{T_1 \rightarrow T_1}^{max}(f)$ — длины волн (силы осцилляторов) наиболее интенсивных полос спектров синглет-синглетного и триплет-триплетного поглощения.

мента молекулы при взаимодействии с электромагнитным полем, и сила осциллятора такого перехода будет невелика.

Изложенные выше качественные рассуждения целиком согласуются с результатами квантовохимического расчета (рис. 1).

Из результатов расчета можно также качественно установить зависимость ΔE от положения заместителя, т. е. от топологии системы. Согласно [17], сдвиг одно-электронного уровня пропорционален квадрату коэффициента разложения соответствующей МО на атоме, вступающем в химическую связь с атомами заместителя. Таким образом, введение заместителей в положения 4 и 9 пирена не должно привести к существенному сдвигу 8-го и 9-го молекулярных одноэлектронных уровней (и, таким образом, не может привести к сдвигу разрешенного S_2 -состояния, сформированного промотированием электрона с 8-й МО на 9-ю МО), и в то же время несколько сдвинет 10-й одноэлектронный уровень (и тем самым должно несколько энергетически понизить запрещенное S_1 -состояние). Итак, замещение в положения 4 или 9 пирена (в том числе и одновременное) не может привести к заметному изменению спектрально-люминесцентных свойств такой молекулы по сравнению с пиреном. Замещения же во все прочие положения молекулы должны привести к сдвигам разрешенного и запрещенного переходов.

Таким образом, предложенный подход позволяет уже из анализа природы МО и возбужденных состояний базисной молекулы предска-

зять места замещения для получения молекулярных структур с улучшенными спектрально-люминесцентными свойствами, хотя окончательные выводы требуют учета путей дезактивации возбужденного S_1 -состояния.

Количественные данные по величинам сдвигов, полученные в конкретных квантовохимических расчетах, приведены ниже.

Теоретическое исследование спектрально-люминесцентных свойств и генерационной способности фенилэтинильных замещенных пирена. В целях поиска новых лазерно-активных сред на основе пирена нами

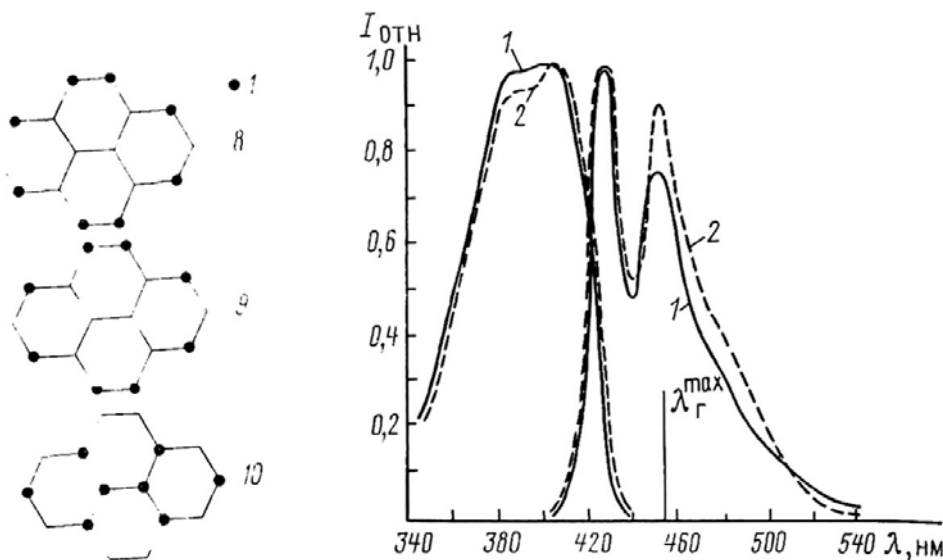


Рис. 2. Природа 8, 9, 10-й молекулярных орбиталей пирена (1 соответствует максимальным абсолютным величинам коэффициентов разложения МО по АО)

Рис. 3. Спектры поглощения, флуоресценции и длина волны генерации ($\lambda_g^{\max}$) 3,8-ди(фенилэтинил)пирена (1) и 3,10-ди(фенилэтинил)пирена (2) в толуоле

был проведен квантовохимический расчет спектров ряда фенилэтинильных замещенных (таблица). Анализ результатов расчета показывает, что введение фенилэтинильного заместителя в молекулу пирена не приводит к изменению природы нижних синглетных возбужденных состояний, т. е. по крайней мере два нижних возбужденных состояния в фенилэтинильных замещенных по своей природе принадлежат пирену, несколько возмущенному заместителями. Имеющее место значительное увеличение силы осциллятора разрешенного перехода в фенилэтинильных замещенных (в случае замещенных пирена примерно в 2 раза, в случае замещенных нафталина — более чем в 5 раз [5]) вызвано ростом дипольного момента перехода, что, в свою очередь, связано с увеличением геометрических размеров молекулярной системы.

Кроме результатов квантовохимического расчета, в таблице приведены величины констант скоростей процессов дезактивации S_1 -состояний, полученные согласно методике, предложенной в [4], и квантовые выходы флуоресценции, а также спектры синглет-синглетного и триплет-триплетного поглощения.

Как и следовало из качественных рассуждений, замещение вдоль длинной оси молекулы пирена не приводит к изменению относительного расположения S_1 - и S_2 -состояний, а максимальный сдвиг разрешенного перехода (и, как следствие этого, максимальное значение ΔE) достигается в структурах 2, 4, 5, 6 и 8.

Из расчета констант скоростей процессов дезактивации возбужденного состояния наиболее перспективных в генерационном отношении структур следует, что в структурах 2, 4 и 8 преобладающим каналом распада S_1 -состояния является флуоресценция. В случае структур 5 и 6 флуоресценция и интеркомбинационная конверсия конкурируют, однако

и в этих случаях благодаря высоким значениям величины k_r квантовый выход флуоресценции значителен (таблица).

Результаты расчета спектров внутримолекулярных потерь показывают (таблица), что спектры $S_1 \rightarrow S_i$ поглощения для структур 2, 5, 6 и 8 лежат далеко от области предполагаемой генерации. Что касается спектров $T_1 \rightarrow T_i$ поглощения, то они гораздо ближе к ней. Однако выбор в качестве источника накачки эксимерного лазера на XeCl^* в силу особенностей параметров его импульса (крутой передний фронт, короткая длительность) позволит уменьшить влияние $T_1 \rightarrow T_i$ потерь [18].

Таким образом, согласно расчету, структурам 2, 5, 6, 8 должно быть свойственно большое значение квантового выхода флуоресценции (при большой величине силы осциллятора $S_0 \leftrightarrow S_1$ перехода), отсутствие заметных внутримолекулярных потерь в области предполагаемой генерации, значительная ($\geq 4000 \text{ см}^{-1}$) величина ΔE . Все это позволило рекомендовать структуры 2, 5, 6 и 8 к синтезу в качестве новых лазерно-активных сред¹.

Экспериментальное исследование генерации фенилэтинильных замещенных пирена. Электронные спектры поглощения замещенных пирена сняты на двухлучевом регистрирующем спектрофотометре Spexord UV VIS (растворитель — толуол, концентрации $2 \cdot 10^{-5}$ — 10^{-5} моль/л). Флуоресцентные свойства этих растворов изучены на установке, описанной в [5] (с длиной волны возбуждения 313 нм). Описание экспериментальной установки для исследования генерации приведено в [19]. Мощность эксимерного лазера XeCl^* [20] (длина волны накачки $\lambda_{\text{нак}} = 308 \text{ нм}$) составляла от 700 кВт до 1,2 МВт, длительность импульса на полувывсоте $\sim 30 \text{ нс}$, частота повторения до 3 Гц. Спектр генерации регистрировался фотоэлектрически. В качестве анализирующего монохроматора использовался МДР-3. Результаты экспериментального исследования спектрально-люминесцентных и генерационных свойств исследованных замещенных пирена приведены на рис. 3. Следует отметить высокую поглощательную способность 3,8- и 3,10-ди(фенилэтинил)пиренов: $\epsilon_{\text{max}} \sim 4\text{—}6 \cdot 10^4 \text{ л} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$. Длинноволновое поглощение, согласно расчетным данным (таблица), сформировано одним электронным переходом, поэтому проявляющаяся структура полосы поглощения, по видимому, является колебательной ($\Delta \nu \simeq 1000$ и 1200 см^{-1}). В спектре флуоресценции колебательная структура становится отчетливее, но величина сохраняется, что говорит о малой вероятности изменения структуры замещенных пирена при возбуждении.

Высокая излучательная способность замещенных пирена, интенсивное поглощение длинноволновой полосы, отсутствие заметного наведенного поглощения в области генерации обуславливают их генерационную способность при накачке короткими и мощными импульсами.

Генерация для обоих изомеров получена на длинноволновом колебательном максимуме спектра флуоресценции ($\lambda_r^{\text{max}} = 457 \text{ нм}$). Существенно, что возможность получения генерации на 3,8- и 3,10-ди(фенилэтинил)пиренах в неполярном растворителе делает их перспективными для получения генерации в парах.

Summary

Theoretical investigation has been made of spectral-luminescent properties of pyrene and its phenyl-ethynyl substituents using the methods of quantum chemistry with the aim of discovering new laser-active media. On the basis of the obtained estimates of rate constants of the excited state deactivation processes, the values of fluorescence quantum yields and the calculated spectral regions of intramolecular losses ($T_1 \rightarrow T_i$, $S_1 \rightarrow S_i$), the structures have been established in the series of the considered pyrene substituents, which are active from the point of view of lasing, and the recommendations on synthesis have been given.

¹ 5-я и 6-я структуры были синтезированы Новиковым А. Н. и Чайковским В. К. Авторы выражают благодарность им за синтез и предоставление веществ.

Experimental study has been made of the absorption and fluorescence spectra of synthesized pyrene substituents. With two isomers of di(phenylethynyl)pyrene in toluene pumped with XeCl^+ -laser, generation has been obtained in the region of 457 nm.

Литература

1. Местечкин М. М. Об особенностях возбужденных состояний органических сцинтилляторов, применяемых в лазерах УФ диапазона.— *Опт. и спектр.*, 1972, т. 32, № 2, с. 355—361.
2. Rulliere C., Rayez J. Lasing ability of naphthyl-1,3,4-oxadiazol Molecules in Relation with their Structures: Application to the desingnof new UV Dye Laser.— *Appl. Phys.*, 1976, v. 11, p. 377—382.
3. Rulliere C., Jousset-Dubien. Conception de nouveaux composés organiques donnant lieu à l'effet laser.— *Rev Appl. Phys.*, 1979, v. 14, p. 303—309.
4. Базыль О. К., Грузинский В. В., Данилова В. И. и др. Исследование зависимости спектрально-люминесцентных и генерационных свойств некоторых ароматических производных бензоксазола от их строения.— *Опт. и спектр.* 1980, т. 48, с. 262—266.
5. Базыль О. К., Майер Г. В., Копылова Т. Н. и др. Теоретическое и экспериментальное исследование генерации фенилэтинильных замещенных нафталина.— *ЖПС*, 1981, т. 35, с. 261—267.
6. Каталог активных сред на основе растворов органических красителей и родственных соединений / Под ред. Б. И. Степанова.— Минск, 1977.— 239 с.
7. Лазеры на красителях / Под ред. Ф. П. Шефера.— М.: Мир, 1976—329 с.
8. Гореленко А. Я., Тулач В. Я., Толкачев В. А., Кожич А. Т. Арилацетилены — новые люминофоры для газовой и конденсированной фаз.— *Тез. докл. III Всесоюз. конф. по орган. люминофорам*. Харьков, 1980, с. 20.
9. Reiser A., Leyshou L. T., Saunders D. et al. The fluorescence of derivatives aromatic benzoxasoles.— *J. Am. Chem. Soc.*, 1972, v. 94, N 7, p. 2414—2421.
10. Копылова Т. Н. Поиск новых активных сред и исследование генерации на растворах органических соединений в ближнем ультрафиолетовом диапазоне спектра: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.— Томск, 1981.— 16 с.
11. Логунов О. А., Старцев А. В., Стойлов Ю. Ю. Кумарины в газовой фазе. II. Исследование лазерной генерации на парах кумаринов в диапазоне 470—540 нм.— *Квант. электр.*, 1981, т. 8, с. 1307—1310.
12. Кругляк Ю. А., Дядюша Г. Г., Куприевич В. А. и др. Методы расчета электронной структуры и спектров молекул.— Киев: Наукова думка, 1969.— 307 с.
13. Hinze H., Jaffe H. H. Orbital Electronegativity of Neutral Atoms.— *J. Am. Chem. Soc.*, 1962, v. 84, p. 540—550.
14. Mataga N., Nishimoto K. Electronic Structure and Spectra of Some Nitrogen Heterocycles.— *Zs. Phys. Chem.*, 1957, v. 12, p. 335—338.
15. Хохштрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии.— М.: Мир, 1968.— 383 с.
16. Теренин А. Н. Фотоника молекул красителей.— Л., Наука, 1967.— 615 с.
17. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии.— М.: Мир, 1972.— 590 с.
18. Копылова Т. Н., Грузинский В. В., Данилова В. И. и др. Возбуждение генерации на органических молекулах излучением эксимерных лазеров.— *ЖПС*, 1979, т. 30, с. 803—811.
19. Баркова Л. А., Грузинский В. В., Данилова В. И. и др. Генерация излучения на растворах 2-фенилбензоксазола в ультрафиолетовой области спектра.— Минск, 1978.— 15 с (Препринт / ИФ АН БССР: № 169).
20. Костин М. Н., Тарасенко В. Ф., Федоров А. И. Система возбуждения электропрямых эксимерных лазеров.— *ПТЭ*, 1980, № 1, с. 218—219.

Поступило в редакцию 23.06.81.

УДК 543.422.4 : 553.611

Л. И. Монахова, М. П. Филиппов, Ю. И. Тарасевич,
Б. И. Штейнман

ПРИМЕНЕНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ИК СПЕКТРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ГЛИНИСТЫХ МИНЕРАЛОВ

Инфракрасная спектроскопия широко применяется в исследовании глинистых минералов, однако получаемая при этом информация основывается, как правило, на данных о положении полос поглощения в спектре [1]. В то же время аналитические возможности метода и объем