

К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МЕЗОГЕННЫХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III) ДЛЯ ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ УСТРОЙСТВ*Ключевые слова: комплексы европия(III), квантово-химическое моделирование, энергии возбужденных состояний, межмолекулярный перенос энергии.*

Практическое применение комплексов европия(III) с проводящими полимерами в оптических материалах может ограничиваться низкой эффективностью и самогашением люминесценции, кристаллизацией и агрегацией молекул в пленке светоизлучающего материала. Экспериментальный подбор полимеров и лигандов для комплексов с целью разработки эффективных электролюминесцентных устройств на их основе осложняется высокими затратами. Для решения подобных задач следует привлекать квантово-химические методы, позволяющие прогнозировать системы, обладающие наилучшим комплексом фотофизических и химических свойств. Данная работа посвящена разработке подходов к квантово-химическому моделированию эффективных излучательных материалов на основе мезогенных комплексов европия(III) для электролюминесцентных устройств. В ходе анализа результатов квантово-химического моделирования было установлено, что расчет оптических свойств и равновесной геометрии мезогенных комплексов европия(III) можно проводить с использованием полупериодических методов и моделей PM6, SMLC и ZINDO/S. Была подобрана методика, основанная на теории функционала плотности, позволяющая моделировать равновесную геометрию и оптические свойства ряда полимеров, широко используемых в электролюминесцентных устройствах. При анализе эффективности межмолекулярного переноса энергии в системах комплексов европия(III) с полимерами учитывалось наибольшее перекрытие спектров излучения полимеров и спектров поглощения комплексов, а также соотношение между триплетными возбужденными уровнями полимеров и лигандов в комплексах. На основе рассчитанных энергий возбужденных уровней, спектров излучения полимеров и поглощения комплексов европия(III) были подобраны полимеры, обеспечивающие наиболее эффективный межмолекулярный перенос энергии возбуждения. Наибольшей эффективностью излучения, согласно полученным данным, обладает система на основе поливинилкарбазола и комплекса европия(III) с замещенными β -дикетонами и 1,10-фенантролином.

К. А. Romanova, Yu. G. Galyametdinov

QUANTUM-CHEMICAL SIMULATION OF EMISSIVE MATERIALS BASED ON MESOGENIC EUROPIUM(III) COMPLEXES FOR ELECTROLUMINESCENT DEVICES*Keywords: europium(III) complexes, quantum-chemical simulation, energies of the excited states, intermolecular energy transfer.*

Practical application of europium(III) complexes with conducting polymers in optical materials may be limited by low efficiency and self-quenching of luminescence, crystallization and aggregation of molecules in the film of light-emitting material. Experimental selection of polymers and ligands for complexes in order to develop efficient electroluminescent devices is complicated by high costs. To solve such problem, one can apply quantum-chemical methods to predict systems with the best set of photophysical and chemical properties. This work is devoted to the development of approaches to quantum-chemical simulation of efficient emitting materials based on mesogenic europium(III) complexes for electroluminescent devices. During the analysis of the quantum-chemical simulation results, it was found that the optical properties and equilibrium geometry of mesogenic europium(III) complexes can be calculated using semiempirical methods and models such as PM6, SMLC and ZINDO/S. A technique based on the density functional theory was selected, allowing the study of equilibrium geometry and optical properties of some polymers widely used in electroluminescent devices. When analyzing the efficiency of intermolecular energy transfer in systems of europium(III) complexes with polymers, the greatest overlap of the emission spectra of polymers and absorption spectra of complexes, as well as the ratio between the triplet excited levels of polymers and ligands in the complexes, was taken into account. According to the calculated energies of excited levels, emission spectra of polymers and absorption spectra of europium(III) complexes, polymers that provide the most efficient intermolecular excitation energy transfer were selected. The results suggest that the system of polyvinylcarbazole and the europium(III) complex with substituted β -diketones and 1,10-phenanthroline has the highest emission efficiency.

Введение

Соединения элементов группы лантаноидов (Ln) активно используются во множестве научных и технических направлений благодаря своим уникально полезным физико-химическим характеристикам. Они применяются в качестве компонентов электронных устройств, включая светодиодные технологии и системы усиления сигналов в оптоволоконной связи, служат эффективными легирующими элементами и улучшают свойства стали и металлических сплавов, выступают

активными компонентами топлива и смазочных масел [1, 2].

Исследовательские и инженерные усилия сосредоточены в основном на разработке новых материалов на основе соединений Ln, используемых в создании энергоэффективных осветительных приборов, сенсорных дисплеев и фотоэлектрических преобразователей. Подобные материалы представляют особый интерес благодаря своей способности эффективно преобразовывать энергию

возбуждения в излучение строго определенной длины волны, приближенное к монохроматичному.

Ионы Ln характеризуются наличием частично заполненных 4f-электронных оболочек. Это обуславливает уникальные особенности их электронно-спектральных характеристик как в виде солей, так и в составе комплексов с различными классами органических молекул. Благодаря таким особенностям, соединения Ln успешно применяются в биомедицинских технологиях, аналитической химии и оптике [1, 2].

Ключевым аспектом практического использования Ln являются процессы переноса энергии между возбужденным состоянием лиганда и Ln(III). Для достижения высокой эффективности процесса важно правильно подобрать структуру и состав лигандов, способствующих оптимальному взаимодействию с активируемым ионом Ln(III).

Путем комбинирования ионов Ln(III) и лигандной оболочки можно добиться любого цвета излучения материалов на их основе, в том числе белого. Однако практическое использование координационных соединений Ln(III) с проводящими полимерами в настоящее время ограничено низкой эффективностью люминесценции. Малая интенсивность излучения зачастую обусловлена кристаллизацией и агрегацией молекул в пленке светоизлучающего материала, что приводит к появлению дефектов и самогашению люминесценции. Поэтому исследование новых комплексов Ln(III) и изучение возможности их использования в качестве люминесцентных материалов является актуальной и практически важной задачей.

Синтез, физико-химическое изучение и подбор органических лигандов для комплексов Ln(III) экспериментальным путем с целью разработки органических электролюминесцентных устройств осложняются высокой стоимостью исходных веществ. Решением данной проблемы является применение квантово-химических методов, позволяющих прогнозировать системы, обладающие наилучшим комплексом фотофизических и химических свойств [3-5].

Несмотря на большое количество литературных данных о природе, особенностях люминесцентных свойств комплексов Ln(III) и применении их в различных областях науки и техники, представлено достаточно мало информации о подходах к моделированию процессов внутри- и межмолекулярного переноса энергии в комплексах Ln(III) с полимерами для органических электролюминесцентных устройств. Применение методов квантовой химии позволяет значительно сократить финансовые затраты и целенаправленно подбирать системы с прогнозируемыми фотофизическими свойствами. Поэтому целью данной работы являлась разработка теоретических подходов к моделированию эффективных лантаноидсодержащих эмиттеров для органических электролюминесцентных устройств.

В качестве объектов исследования были выбраны комплексы Eu(III) (рис. 1), обладающие

жидкокристаллическими свойствами и способностью к ориентации под действием внешнего воздействия [6, 7]. В состав лигандного окружения ионов Eu(III) входили следующие замещенные β-дикетоны:

Dk₁₂₋₁₆ ($R_1 = C_{12}H_{25}O-C_6H_4-$, $R_2 = C_{16}H_{33}O-$), Dk₁₂₋₁₄ ($R_1 = C_{12}H_{25}O-C_6H_4-$, $R_2 = C_{14}H_{29}O-$), CPDK₃₋₅ ($R_1 = C_6H_{11}-$, $R_2 = C_3H_7-C_6H_{10}-$), CPDK_{5-tio} ($R_1 = C_4H_3S-$, $R_2 = C_5H_{11}-C_6H_{10}-$), CPDK_{3-ph} ($R_1 = C_6H_5-$, $R_2 = C_3H_7-C_6H_{10}-$), а также некоторые основания Льюиса: 1,10-фенантролин (Phen) и замещенные 2,2'-бипиридин Bpy₁₂₋₁₂ ($R_3 = C_{12}H_{25}-$) и Bpy₁₇₋₁₇ ($R_3 = C_{17}H_{35}-$).

Комплексы Eu(III) отличаются более высокой интенсивностью люминесценции по сравнению с другими соединениями Ln(III) [8, 9]. Они представляют большой интерес, как с теоретической точки зрения, так и в связи с возможностью создания надмолекулярно-организованных магнито- и оптически-анизотропных материалов.

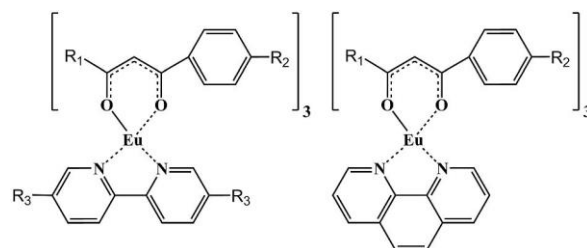


Рис. 1 – Структурные формулы изученных комплексов Eu(III)

Fig. 1 – Chemical structures of the studied Eu(III) complexes

Исходя из литературных данных, были также подобраны самые распространенные полимеры, используемые в разработке светодиодов, волноводах, различных источниках света и т.д. В их число вошли: поли(п-фенилен-винилен) (PPV), политиофен (PT), поли(9-винилкарбазол) (PVK), полифлуорен (PFO), поли [2-метокси-5-(2-этилгексилокси)-1,4-фениленвинилен] (МЕН-PPV), поли [2,5-бис(гексидецилокси)-п-фенилен] (C-PPP), поли [2,5-бис(гексидецилокси)-1,4-фенилен-ил-1,4-фенилен] (P-PPP), поли [2-(6-циано-6-метилгептилокси)-1,4-фенилен] (CN-PPP) [10-13].

Методика моделирования

Для проведения процесса оптимизации геометрии молекул комплексов Eu(III) были применены полуэмпирическая модель SMLC и метод PM6 в программе MOPAC2016 [14]. Модель SMLC, предназначенная для моделирования координационных соединений Ln(III), обеспечивает достаточную точность расчетов относительно прочих полуэмпирических методов, сохраняя при этом значительно меньшие требования к вычислительным ресурсам и временным затратам по сравнению с *ab initio* методами [15, 16]. Исходные геометрические структуры координационных полиэдров комплексов Eu(III), использованные для построения исследуемых комплексов и последующей оптимизации, были извлечены из

Кембриджской базы данных рентгеноструктурного анализа. Моделирование УФ-спектров поглощения комплексов Eu(III) проводилось с использованием полуэмпирического метода ZINDO/S в программе ORCA 5.0 [17].

Для экспериментального определения значений энергий триплетного возбужденного уровня органических лигандов были использованы литературные данные по спектрам фосфоресценции комплексов Gd(III) [18]. Ион Gd(III) имеет широкую энергетическую щель между основным и первым возбужденным состояниями, поэтому его комплексы используются для измерения триплетных состояний органических лигандов.

Оптимизация геометрий мономерных звеньев и цепочек полимеров, расчеты положений высшей занятой (HOMO) и низшей свободной (LUMO) молекулярных орбиталей, оптических спектров проводились с помощью ряда методов и базисных наборов в программе Gaussian 16 [19].

Обсуждение результатов

Ход выполнения исследований включал подбор подходов к квантово-химическому моделированию равновесной геометрии и оптических свойств ряда мезогенных комплексов Eu(III) и полимеров, широко используемых в электролюминесцентных устройствах, а в дальнейшем подбор полимеров, обеспечивающих наиболее эффективный перенос энергии в изученных системах.

На первом этапе работы был осуществлен подбор метода моделирования молекулярного строения комплексов Eu(III) . На этом этапе важно наиболее точно подобрать изначальную геометрию молекулы, что значительно сокращает количество итераций до достижения равновесной геометрии молекулы и, соответственно, уменьшает время расчетов. Геометрия координационного полиэдра комплексов была заимствована у комплексов Eu(III) со схожим лигандным окружением без алкильных заместителей из Кембриджской базы данных по структурам, полученным методом рентгеноструктурного анализа. Расчеты проводились без учета влияния симметрии в газовой фазе.

Ввиду того, что жидкокристаллические комплексы Eu(III) содержат большое число атомов (> 200) и тяжелый ион Eu(III) , для оптимизации геометрии был выбран наиболее эффективный метод PM6 с использованием специально созданной для ионов Ln(III) полуэмпирической модели SMLC. В данной модели ион Ln(III) заменяют на точечный заряд, помещенный в центр отталкивающего сферического потенциала.

В результате были получены геометрии комплексов, представленные на рис. 2, с геометрическими параметрами, длинами связей и углами в координационной сфере (рис. 3), близкими к величинам схожих по строению комплексов Eu(III) [6, 7, 9].

Наличие тяжелого иона и сложная природа процессов фотовозбуждения комплексов Eu(III) затрудняют моделирование их фотофизических свойств. Использование точных *ab initio* методов для

многоатомных систем требует больших временных и компьютерных затрат, поэтому моделирование УФ-спектров комплексов Eu(III) проводилось полуэмпирическим методом ZINDO/S. Расчет проводился без учета влияния растворителя.

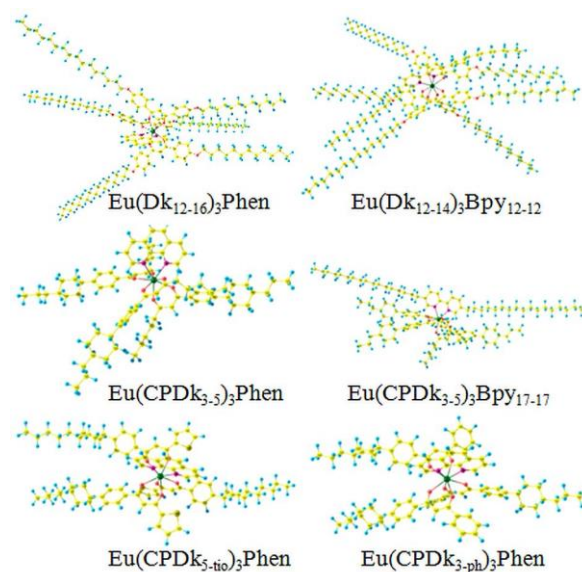


Рис. 2 – Оптимизированные геометрии комплексов Eu(III)

Fig. 2 – Optimized geometries of the Eu(III) complexes

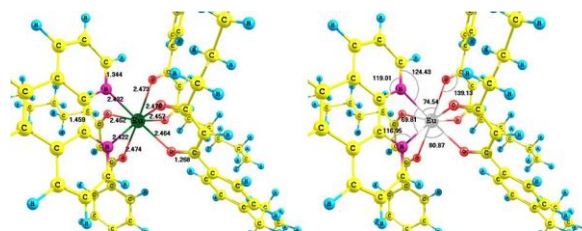


Рис. 3 – Геометрические параметры координационного центра Eu(CPDk3-5)3Phen

Fig. 3 – Geometrical parameters of the coordination sphere of the Eu(CPDk3-5)3Phen complex

В табл. 1 представлены полученные в ходе расчетов положения полос максимумов на спектрах поглощения комплексов Eu(III) с различным лигандным окружением в сравнении с экспериментальными величинами. Из данных, полученных в ходе моделирования УФ-спектров, видно, что максимумам поглощения комплексов соответствуют длины волн от 287 нм до 323 нм, что отвечает поглощению β -дикетонов [6-9], играющих главную роль в процессах фотовозбуждения комплексов Ln(III) . Сравнение рассчитанных спектров с экспериментальными данными (табл. 1) показывает, что метод ZINDO/S может быть использован в дальнейшем для моделирования оптических свойств комплексов Eu(III) . При этом наибольшие отклонения наблюдались для комплексов с основаниями Льюиса, содержащими длинные алкильные заместители (Bpy_{12-12} и Bpy_{17-17}).

Таблица 1 – Экспериментальные [20] и рассчитанные положения максимумов поглощения (нм) на спектрах комплексов Eu(III)

Table 1 – Experimental and calculated positions of absorption maxima (nm) in the spectra of the Eu(III) complexes

Комплекс	$\lambda_{\text{эксп}}$	$\lambda_{\text{расч}}$	$ \lambda_{\text{эксп}} - \lambda_{\text{расч}} $
Eu(CPDk ₃₋₅) ₃ Bpy ₁₇	317,04	315,86	1,18
Eu(CPDk ₃₋₅) ₃ Phen	317,76	317,74	0,02
Eu(Dk ₁₂₋₁₄) ₃ Bpy ₁₂₋₁₂	362,83	323,14	39,69
Eu(CPDk ₅₋₁₀) ₃ Phen	354,09	352,89	1,20
Eu(CPDk _{3-ph}) ₃ Phen	355,45	325,37	30,08

Одним из основных параметров, используемых при подборе полимеров для дальнейшего применения в светодиодах и других источниках света, являются положения их **HOMO** и **LUMO** молекулярных орбиталей. Для подбора квантово-химического метода расчета молекулярного строения и оптических свойств полимеров в качестве модельного соединения был выбран PVK. Расчеты геометрий и положений молекулярных орбиталей проводились для одного мономерного звена PVK с использованием следующих методов: теория функционала плотности (DFT) с наиболее распространенными функционалами PBE и B3LYP, метод Хартри-Фока (HF), теория возмущений Меллера-Плессета разных порядков (MP2 и MP4). При этом применяли базисные наборы 6-31G(d,p) и 3-21G. В результате были получены следующие величины разницы (HOMO–LUMO): 4,41 эВ (HF/6-31G(d,p)), 5,10 эВ (MP2/3-21G), 4,90 эВ (MP2/6-31G(d,p)), 5,10 эВ (MP4/3-21G), 3,30 эВ (PBE/6-31G(d,p)). Экспериментальная величина составляет 3,60 эВ [10]. Таким образом, наилучшее совпадение с экспериментом показал метод DFT с использованием функционала PBE и базисного набора 6-31(d,p).

Несмотря на достаточно широкое использование метода теории возмущения Меллера-Плессета и ее различных вариаций для моделирования оптических свойств, основным недостатком данного метода является в некоторых случаях слабая сходимост, которая зависит от межэлектронного взаимодействия в системе и используемого базисного набора. Кроме того наблюдаемые в данной работе результаты методами MP2 и MP4 оказались сильно завышенными.

Метод DFT, благодаря высокой скорости расчетов, широко используется при моделировании геометрических структур молекул и их свойств. Ошибки, наблюдаемые в рамках данного подхода, составляют порядка нескольких десятых электрон-вольт даже при расчете высоковозбужденных ридберговских состояний и двухкратных возбуждений, поэтому данный метод был выбран для моделирования остальных систем.

На рис. 4 представлены оптимизированные геометрии мономерных звеньев некоторых из рассмотренных полимеров (PVK и MEH-PPV) с геометрическими параметрами.

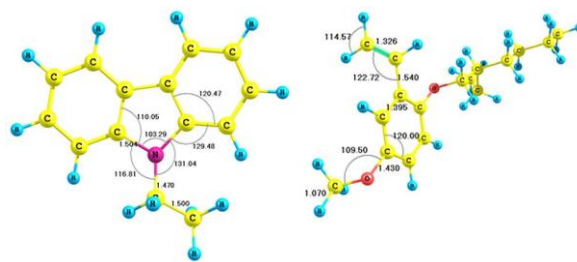


Рис. 4 – Геометрические параметры мономерных звеньев полимеров PVK и MEH-PPV

Fig. 4 – Geometrical parameters of monomer units of polymers PVK and MEH-PPV

Расчет длинноцепочечных молекул представляет весьма ресурсоемкую задачу при изучении полимеров сложного состава с различными заместителями. На следующем этапе было осуществлено моделирование молекул полимера PPV, содержащего различное число мономерных звеньев $n = 1, 3, 5, 8$. В результате были получены следующие величины разницы (HOMO–LUMO): 3,60 эВ ($n = 1$); 2,15 эВ ($n = 3$); 1,71 эВ ($n = 5$); 1,49 эВ ($n = 8$). Экспериментальная величина составляет 2,440 эВ [11]. Таким образом, наилучшее соотношение между рассчитанными значениями и экспериментальными данными наблюдалось для молекулы, содержащей три полимерных звена. Поэтому при дальнейшем моделировании полимеров расчет проводили для молекул, содержащих три звена.

Одними из основных критериев, используемых при анализе эффективности межмолекулярного переноса энергии в системах комплексов Ln(III) с полимерами, являются наибольшее перекрытие спектров излучения полимеров и спектров поглощения комплексов Ln(III), а также соотношение между триплетными возбужденными уровнями лигандов комплексов и полимеров.

Моделирование положения возбужденных уровней полимеров проводили методом DFT с функционалом B3LYP и базисным набором 6,31G(d,p) в программе Gaussian 16. В табл. 2 представлены рассчитанные и экспериментальные положения триплетных (T) уровней полимеров и лигандов в изученных комплексах Eu(III).

Исходя из представленных в табл. 2 положений возбужденных уровней полимеров и лигандов в изученных комплексах Eu(III), триплетные уровни всех полимеров расположены выше по энергии, чем у лигандного окружения комплексов, следовательно, они могут эффективно участвовать в межмолекулярном переносе энергии.

При сопоставлении рассчитанных спектров поглощения комплексов Eu(III) и спектров излучения полимеров наибольшее перекрытие спектров было выявлено у комплекса Eu(CPDk₃₋₅)₃Phen и полимера PVK. Триплетный уровень PVK находится выше по энергии возбужденных триплетных состояний лигандов в Eu(CPDk₃₋₅)₃Phen, то есть соотношение их возбужденных уровней наиболее оптимально для эффективного переноса энергии.

Таблица 2 – Положения низших триплетных уровней

Table 2 – The values of the lowest triplet excited states

Полимер	T _{расч.} , эВ	Лиганд	T _{эксп.} , эВ
PPV	3,798	CPDk ₃₋₅ Phen	2,440 2,684
PVK	3,162	CPDk _{3-ph} Phen	2,380 2,684
PFO	3,056	CPDk _{5-tio} Phen	2,258 2,684
МЕН-PPV	3,686	Dk ₁₂₋₁₄ Bpy ₁₂₋₁₂	2,375 2,870
PT	3,654	Dk ₁₂₋₁₆ Phen	2,370 2,684
CN-PPP	4,020	CPDk ₃₋₅ Bpy ₁₇₋₁₇	2,440 2,870

Согласно экспериментальным наблюдениям, наиболее эффективный перенос энергии происходит при разнице в положении возбужденных состояний, равной 0,4 – 0,5 эВ [21, 22]. В рассчитанных системах у полимера PVK и комплекса Eu(CPDk₃₋₅)₃Phen разница уровней составляет 0,478 эВ. Кроме того именно данный комплекс обладает наибольшим квантовым выходом из всех исследованных соединений [20]. Следовательно, в оптическом материале, состоящем из данных компонентов, следует ожидать наибольшую эффективность межмолекулярного переноса энергии возбуждения и наибольшую интенсивность излучения.

Выводы

В данной работе были подобраны квантово-химические подходы, основанные на теории функционала плотности, позволяющие моделировать равновесную геометрию и оптические свойства ряда полимеров, широко используемых в электролюминесцентных устройствах. Было продемонстрировано, что моделирование оптических свойств и равновесной геометрии мезогенных комплексов Eu(III) можно проводить с использованием полуэмпирических методов PM6, SMLC и ZINDO/S. На основе рассчитанных энергий возбужденных уровней, спектров излучения полимеров и спектров поглощения комплексов Eu(III) были подобраны полимеры PVK и PFO, обеспечивающие наиболее эффективный межмолекулярный перенос энергии. Данные соединения могут быть совместно использованы при создании функциональных материалов для оптоэлектроники и фотоники. Наибольшей эффективностью излучения, согласно полученным данным, обладает полимер PVK и комплекс Eu(CPDk₃₋₅)₃Phen.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00. Тема исследования «Создание научных основ

получения новых мультифункциональных материалов широкого спектра применения» (FZSG-2023-0008).

Литература

1. J. Sahoo, S. Jaiswar, H.S. Jena, P. S. Subramanian, *ChemistrySelect*, **5**, 42, 12878-12884 (2020).
2. K. Nehra, A. Dalal, A. Hooda, S. Bhagwan, R.K. Saini, B. Mari, S. Kumar, D. Singh, *Journal of Molecular Structure*, **1249**, 131531 (2022).
3. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **20**, 18, 9-11 (2017).
4. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **20**, 19, 15-17 (2017).
5. К.А. Романова, А.В. Кремлева, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидкие кристаллы и практическое использование*, **19**, 2, 15-24 (2019).
6. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидкие кристаллы и практическое использование*, **22**, 1, 16-26 (2022).
7. К.А. Романова, А.А. Фрейдзон, А.А. Багатурьянц, М.В. Стрелков, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **15**, 18, 19-22 (2012).
8. J.-C. G. Bünzli, *Trends in Chemistry*, **1**, 8, 751-762 (2019).
9. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **18**, 16, 7-9 (2015).
10. D.G. Georgiadou, M. Vasilopoulou, G. Pistoris, D. Dimotikali, P. Argitis, *RSC Advances*, **2**, 11786-11792 (2012).
11. M. Shikha, K. Jayant, M. Devinder, S. Inderpreet, B. Pramod, M. Parmatma, *Journal of Nanophotonics*, **5**, 1, 053518 (2011).
12. S.-J. Lee, J.S. Park, M. Song, K.-J. Yoon, Y.I. Kim, S.-H. Jin, H.-J. Seo, *Applied Physics Letters*, **92**, 193312 (2008).
13. C.-K. Tai, P.-L. Yeh, C.-C. Chang, W.-H. Chen, R.-H. Wu, Y.-M. Chou, B.-C. Wang, *Research on Chemical Intermediates*, **40**, 2355-2362 (2014).
14. Stewart J.J.P. MOPAC2016 (2016).
15. M.A.M. Filho, J.D.L. Dutra, G.B. Rocha, R.O. Freire, A.M. Simas, *RSC Advances*, **3**, 37, 16747-16755 (2013).
16. M.R. Nailton, A. Daniel, M. Rodrigues, B. Nivan, F. Gimenez, O. Ricardo, *Journal of Molecular Structure*, **1184**, 310-15 (2019).
17. Frank Neese, Frank Wennmoths, Ute Becker, Christoph Riplinger, *Journal Chemistry Physics*, **152**, 224108 (2020).
18. D. Lapaev, V. Nikiforov, G. Safiullin, V. Lobkov, K. Salikhov, A. Knyazev, Yu. Galyametdinov, *Optical Materials*, **37**, 593-597 (2014).
19. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Petersson G.A., Nakatsuji H., Li X., Caricato M., Marenich A.V., Bloino J., Janesko B.G., Gomperts R., Mennucci B., Hratchian H.P., Ortiz J.V., Izmaylov A.F., Sonnenberg J.L., Williams-Young D., Ding F., Lipparini F., Egidi F., Goings J., Peng B., Petrone A., Henderson T., Ranasinghe D., Zakrzewski V.G., Gao J., Rega N., Zheng G., Liang W., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Throssell K., Montgomery J.A., Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M.J., Heyd J.J., Brothers E.N., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T.A., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A.P., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Millam J.M., Klene M., Adamo C., Cammi R., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Farkas O., Foresman J.B., Fox D.J. Gaussian 16, Revision C.01 (2016).
20. K.A. Romanova, N.P. Datskevich, I.V. Taidakov, A.G. Vitukhnovskii, Yu.G. Galyametdinov, *Russian journal of physical chemistry A*, **87**, 12, 2108-2111 (2013).

21. M. Latva, H. Takalo, V.-M. Mikkala, C. Matachescu, J.C. Rodriguez-Ubis, J. Kankare, *Journal of Luminescence*, **75**, 2, 149-169 (1997).
22. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **18**, 16, 41-43 (2015).

References

1. J. Sahoo, S. Jaiswar, H.S. Jena, P. S. Subramanian, *ChemistrySelect*, **5**, 42, 12878-12884 (2020).
2. K. Nehra, A. Dalal, A. Hooda, S. Bhagwan, R.K. Saini, B. Mari, S. Kumar, D. Singh, *Journal of Molecular Structure*, **1249**, 131531 (2022).
3. K.A. Romanova, Yu.G. Galyametdinov, *Herald of the Technological University*, **20**, 18, 9-11 (2017).
4. K.A. Romanova, Yu.G. Galyametdinov, *Herald of the Technological University*, **20**, 19, 15-17 (2017).
5. K.A. Romanova, A.V. Kremleva, Yu.G. Galyametdinov, *Liquid Crystals and Practical Applications*, **19**, 2, 15-24 (2019).
6. K.A. Romanova, Yu.G. Galyametdinov, *Liquid Crystals and Practical Applications*, **22**, 1, 16-26 (2022).
7. K.A. Romanova, A.Ya. Freidzon, A.A. Bagaturyants, M.V. Strelkov, Yu.G. Galyametdinov, *Herald of Kazan Technological University*, **15**, 18, 19-22 (2012).
8. J.-C. G. Bünzli, *Trends in Chemistry*, **1**, 8, 751-762 (2019).
9. K.A. Romanova, Yu.G. Galyametdinov, *Herald of Technological University*, **18**, 16, 7-9 (2015).
10. D.G. Georgiadou, M. Vasilopoulou, G. Pistolis, D. Dimotikali, P. Argitis, *RSC Advances*, **2**, 11786-11792 (2012).
11. M. Shikha, K. Jayant, M. Devinder, S. Inderpreet, B. Pramod, M. Parmatma, *Journal of Nanophotonics*, **5**, 1, 053518 (2011).
12. S.-J. Lee, J.S. Park, M. Song, K.-J. Yoon, Y.I. Kim, S.-H. Jin, H.-J. Seo, *Applied Physics Letters*, **92**, 193312 (2008).
13. C.-K. Tai, P.-L. Yeh, C.-C. Chang, W.-H. Chen, R.-H. Wu, Y.-M. Chou, B.-C. Wang, *Research on Chemical Intermediates*, **40**, 2355-2362 (2014).
14. Stewart J.J.P. MOPAC2016 (2016).
15. M.A.M. Filho, J.D.L. Dutra, G.B. Rocha, R.O. Freire, A.M. Simas, *RSC Advances*, **3**, 37, 16747-16755 (2013).
16. M.R. Nailton, A. Daniel, M. Rodrigues, B. Nivan, F. Gimenez, O. Ricardo, *Journal of Molecular Structure*, **1184**, 310-15 (2019).
17. Frank Neese, Frank Wennmohs, Ute Becker, Christoph Riplinger, *Journal Chemistry Physics*, **152**, 224108 (2020).
18. D. Lapaev, V. Nikiforov, G. Safiullin, V. Lobkov, K. Salikhov, A. Knyazev, Yu. Galyametdinov, *Optical Materials*, **37**, 593-597 (2014).
19. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Petersson G.A., Nakatsuji H., Li X., Caricato M., Marenich A.V., Bloino J., Janesko B.G., Gomperts R., Mennucci B., Hratchian H.P., Ortiz J.V., Izmaylov A.F., Sonnenberg J.L., Williams-Young D., Ding F., Lipparini F., Egidi F., Goings J., Peng B., Petrone A., Henderson T., Ranasinghe D., Zakrzewski V.G., Gao J., Rega N., Zheng G., Liang W., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Throssell K., Montgomery J.A., Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M.J., Heyd J.J., Brothers E.N., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T.A., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A.P., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Millam J.M., Klene M., Adamo C., Cammi R., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Farkas O., Foresman J.B., Fox D.J. Gaussian 16, Revision C.01 (2016).
20. K.A. Romanova, N.P. Datskevich, I.V. Taidakov, A.G. Vitukhnovskii, Yu.G. Galyametdinov, *Russian journal of physical chemistry A*, **87**, 12, 2108-2111 (2013).
21. M. Latva, H. Takalo, V.-M. Mikkala, C. Matachescu, J.C. Rodriguez-Ubis, J. Kankare, *Journal of Luminescence*, **75**, 2, 149-169 (1997).
22. K.A. Romanova, Yu.G. Galyametdinov, *Herald of Technological University*, **18**, 16, 41-43 (2015).

© К. А. Романова – канд. хим. наук, доцент кафедры Физической и коллоидной химии (ФКХ), Казанский национальный исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань, Россия, ksenuya@mail.ru; Ю. Г. Галяметдинов – д-р хим. наук, профессор кафедры ФКХ, КНИТУ.

© К. А. Romanova – PhD (Chemical Sci.), Associate Professor, Department of Physical and Colloid Chemistry (PCC), Kazan National Research Technological University (KNRTU), ksenuya@mail.ru; Yu. G. Galyametdinov – Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Full Professor, the PCC department, KNRTU.

Дата поступления рукописи в редакцию – 12.08.25.

Дата принятия рукописи в печать – 01.09.25.