

К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов

ВЛИЯНИЕ СТРОЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ 1Н-ИМИДАЗО[4,5-F][1,10]ФЕНАНТРОЛИНА НА ПАРАМЕТРЫ ИНТЕНСИВНОСТИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III) ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Ключевые слова: комплексы европия(III), квантово-химические расчеты, триплетные возбуждённые состояния, внутримолекулярный перенос энергии, квантовый выход.

Комплексы европия(III) с β -дикетонами и основаниями Льюиса являются хорошо известными молекулярными люминесцентными материалами для оптоэлектроники, лазерных технологий и сенсорных устройств. Они характеризуются узкими полосами излучения и длительными временами жизни возбужденных состояний. Ключевую роль во внутримолекулярном переносе энергии возбуждения от лиганда к иону европия(III) и, как следствие, в интенсивности люминесценции в данных соединениях играет строение хромофорного лиганда. В данной работе методами квантово-химического моделирования было проведено изучение влияния строения ряда производных 1Н-имидазо[4,5-f][1,10]фенантролина на параметры интенсивности люминесценции комплексов европия(III). Оптимизация молекулярной геометрии комплексов была выполнена посредством полумпирических методов, дополнительно проведены расчёты энергий триплетных возбуждённых состояний, что дало возможность оценить вероятности переноса энергии от лигандов к иону европия(III). Для каждого комплекса были определены спектроскопические характеристики согласно теории Джадда-Офельта, включая параметры интенсивности люминесцентного излучения, скорости переноса энергии и расчётные значения квантового выхода. Проведён сравнительный анализ указанных параметров для комплексов различного строения, различающихся природой заместителей, их количеством и положением в 1Н-имидазо[4,5-f][1,10]фенантролине, установлены количественные корреляции между строением лигандов и интенсивностью люминесценции, подобраны перспективные для синтеза соединения с эффективными люминесцентными свойствами. Адекватность выбранных вычислительных подходов и данные моделирования были подтверждены доступными экспериментальными величинами. Таким образом, была продемонстрирована эффективность квантово-химического моделирования как инструмента направленного молекулярного дизайна органических лигандов, позволяющего прогнозировать и целенаправленно усиливать люминесцентные характеристики комплексов редкоземельных элементов до стадии их экспериментального получения.

К. А. Romanova, Yu. G. Galyametdinov

THE INFLUENCE OF THE STRUCTURE OF 1H-IMIDAZO[4,5-F][1,10]PHENANTHROLINE DERIVATIVES ON THE LUMINESCENCE INTENSITY PARAMETERS OF EUROPIUM(III) COMPLEXES ACCORDING TO QUANTUM-CHEMICAL SIMULATION DATA

Keywords: europium(III) complexes, quantum-chemical calculations, triplet excited states, intramolecular energy transfer, quantum yield.

Europium(III) complexes with β -diketones and Lewis bases are well-known molecular luminescent materials for optoelectronics, laser technologies, and sensor devices. They are characterized by narrow emission bands and long lifetimes of excited states. The molecular structure of the chromophoric ligand is a critical determinant for the efficiency of intramolecular excitation energy transfer to the europium(III) ion, thereby directly governing the resultant luminescence intensity of these complexes. In this article, quantum-chemical simulation methods were used to study the influence of the structure of some 1H-imidazo[4,5-f][1,10]phenanthroline derivatives on the luminescence intensity parameters of europium(III) complexes. Optimization of the molecular geometry of the complexes was performed using semiempirical methods. Additionally, calculations of the energies of triplet excited states were performed, which made it possible to estimate the probabilities of energy transfer from the ligands to the europium(III) ion. For each complex, spectroscopic characteristics were determined according to the Judd-Ofelt theory, including the parameters of luminescence intensity, energy transfer rates, and quantum yields. A comparative analysis of these parameters was carried out for complexes of various structures, differing in the nature of the substituents, their number, and the position in the 1H-imidazo[4,5-f][1,10]phenanthroline. Quantitative correlations between the structure of the ligands and the luminescence intensity were established, and promising compounds with effective luminescent properties were selected for the synthesis. The adequacy of the selected computational approaches and simulation data were confirmed by available experimental values. Thus, the effectiveness of quantum-chemical simulation as a tool for the directed molecular design of organic ligands was demonstrated, allowing for the prediction and targeted enhancement of the luminescent characteristics complexes of the rare earths before their experimental production.

Введение

Трехвалентные ионы лантаноидов(III) (Ln(III)) хорошо известны своими фотолюминесцентными свойствами в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах. Из-за низкой поглощающей способности ионов обычно применяют комплексы Ln(III) с

органическими лигандами, которые поглощают свет и передают энергию металлическому центру («эффект антенны»). Кроме того, лиганды вытесняют воду из первой координационной сферы, что позволяет снизить вклад безызлучательной деактивации [1, 2].

Значительные коэффициенты поглощения оснований Льюиса и β -дикетон в УФ-диапазоне способствуют высокоэффективному переносу энергии внутри молекулы на ион Ln(III) [3, 4]. В этом отношении комплексы европия(III) (Eu(III)) с β -дикетонами являются хорошо известными молекулярными люминесцентными материалами, которые характеризуются узкими полосами излучения и длительным временем жизни возбужденного состояния. Рассматриваемые соединения находят применение в роли контрастных агентов при проведении магнитно-резонансной томографии, в области телекоммуникаций, солнечных энергетических преобразователей, а также в биомедицине, при адресной доставке фармацевтических веществ и др.

Несмотря на достижения в исследованиях физико-химических свойств комплексов Ln(III), экспериментальные подходы характеризуются существенными временными и финансовыми затратами. Разработка новых соединений с улучшенными характеристиками и их внедрение в функциональные материалы требует четко установленных корреляций между структурой и свойствами молекул. Это обуславливает особую значимость применения методов квантово-химического моделирования, которые способны эффективно прогнозировать молекулярную структуру и свойства как индивидуальных комплексов Ln(III) [5-8], так и гибридных функциональных материалов, включающих полимеры и различные люминесцентные компоненты [9, 10].

Настоящее исследование включает ряд комплексов Eu(III) (рис. 1), характеризующихся разнообразием лигандного окружения, что позволяет исследовать влияние состава и пространственного расположения лигандов на люминесцентные свойства данных соединений.

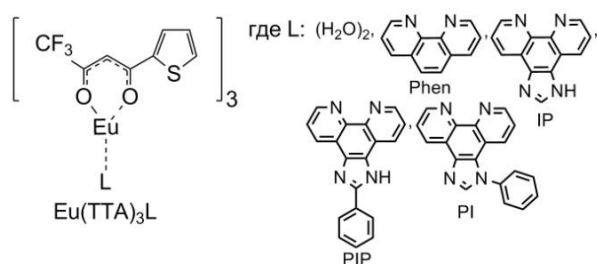


Рис. 1 – Структурные формулы изученных комплексов Eu(III)

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

Лигандное окружение изученных соединений включало следующие лиганды: β -дикетон теноилтрифторацетон (ТТА), 1,10-фенантролин (Phen) и различные производные 1Н-имидазо[4,5-f][1,10]фенантролина (IP, PI, PIP).

Данные соединения были выбраны ввиду более высокой интенсивностью люминесценции комплексов Eu(III) с ТТА и Phen по сравнению с другими соединениями Ln(III). В твердом состоянии

квантовый выход комплекса Eu(ТТА)₃Phen может достигать 69%. Чуть меньшие значения соответствуют измерениям в растворе и варьируются в зависимости от растворителя, метода измерения или природы полимерной матрицы, в которой распределяют комплекс [11, 12]. Меньшая эффективность люминесценции соответствует измерениям в протонных растворителях вследствие тушения излучения молекулами воды.

Методика моделирования

Оптимизация геометрии молекул комплексов (рис. 1) производилась с привлечением полуэмпирической модели SMLC и метода RM1, реализованных в пакете программного обеспечения MOPAC2016 [13]. Выбранная для представления в расчете ионов Eu(III) модель SMLC была параметризована специально для расчета координационных соединений редкоземельных элементов и характеризуется высокой точностью и скоростью вычислений, малыми требованиями к компьютерным ресурсам по сравнению с *ab initio* методами [14-16]. Расчеты производились без учета симметрии в условиях газовой фазы.

Для вычисления энергетических уровней возбужденных состояний использовали метод ZINDO/S в пакете ORCA [17]. Люминесцентные характеристики и значения теоретического квантового выхода были определены в рамках вычислительного подхода [18] в программе LUMPAC [19]. Экспериментальные значения энергий триплетных возбужденных уровней лигандов (2,520 эВ для ТТА [20] и 2,684 эВ для Phen [21]) были заимствованы из литературных данных по фосфоресцентным спектрам комплексов гадолиния(III).

Обсуждение результатов

Начальные геометрии молекул комплексов Eu(ТТА)₃(H₂O)₂ [22], Eu(ТТА)₃Phen [23] и Eu(ТТА)₃PIP [24], использованные для построения других соединений, оптимизации геометрии и последующего моделирования параметров люминесценции, были извлечены из Кембриджской базы данных с результатами рентгеноструктурных исследований.

Оптимизированные геометрические конфигурации молекул комплексов Eu(III), найденные в ходе квантово-химического моделирования в рамках подхода SMLC/RM1 продемонстрированы на рис. 2. Рассчитанные геометрические параметры согласуются с ранее опубликованными данными рентгеноструктурного анализа [22-24]. Различия между средними величинами валентных углов в координационном полиэдре иона Eu(III) и экспериментальными геометрическими параметрами не превышают 5 градусов, а отклонения длин связей Eu–O и Eu–N – в пределах 0,1 Å.

В ходе фотовозбуждения соединений Eu(III) молекула проходит через многостадийный процесс, включающий несколько элементарных стадий с различными скоростями и механизмами (рис. 3).

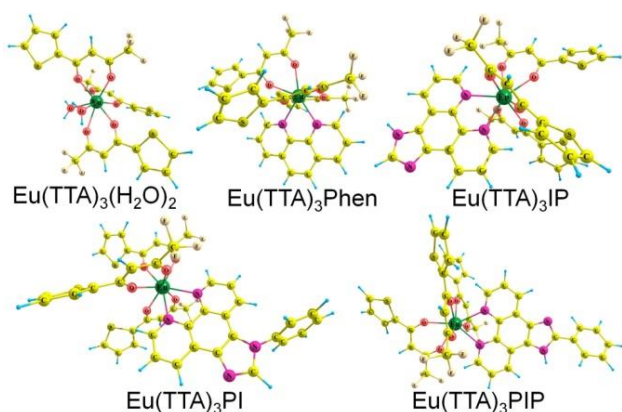


Рис. 2 – Оптимизированные геометрии комплексов Eu(III)

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

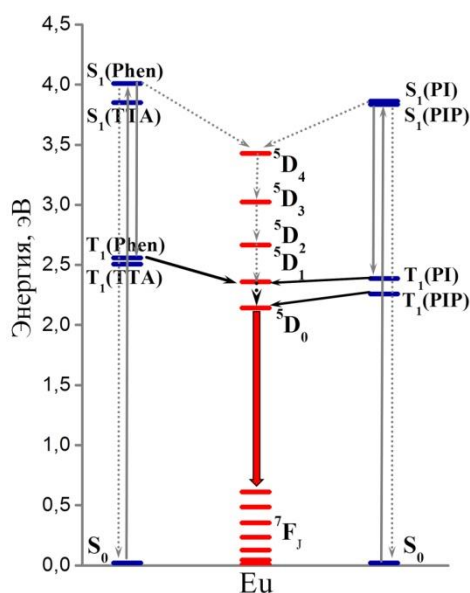


Рис. 3 – Вычисленные энергии возбужденных состояний комплексов Eu(III)

Fig. 3 – Calculated energies of the excited states of the Eu(III) complexes

Первоначальное действие кванта света на молекулу комплекса приводит к синглетному возбуждению, которое локализуется в большей степени на лигандном окружении. Последующая быстрая безызлучательная релаксация приводит к низшему синглетному состоянию S_1 , а затем следует дезактивация либо в результате флуоресценции, либо лигандная часть комплекса может выполнить переход в триплетное состояние и в дальнейшем пройти через релаксацию до низшего триплетного состояния T_1 . Затем наблюдается передача энергии возбуждения на находящие в резонансе с T_1 уровнями лигандов подуровни мультиплета иона Eu(III). Далее при отсутствии или малом вкладе обратного процесса на ионе осуществляется релаксация до излучательного уровня и люминесценция. Поэтому эффективность излучательных свойств и квантовый выход люминесценции комплексов Eu(III) зависят от взаимного расположения соответствующих

возбужденных электронных уровней с преимущественным вкладом T_1 .

Следующим этапом стала оценка влияния структурных особенностей лигандного окружения на люминесцентные свойства исследуемых комплексов путём расчета энергий триплетных состояний (T_1), параметров интенсивности люминесценции (Ω_2 и Ω_4) согласно теории Джадда-Офельта, скоростей внутримолекулярного переноса энергии (W_{ET}) и теоретического квантового выхода (Q). Результаты расчётов представлены в табл. 1 с учётом механизма передачи энергии с триплетных уровней β -дикетонов.

Таблица 1 – Рассчитанные люминесцентные характеристики комплексов Eu(III)

Table 1 – Calculated luminescent characteristics of the Eu(III) complexes

Комплекс	$\Omega_\lambda \cdot 10^{-20}, \text{cm}^2$		W_{ET}, c^{-1}	Q, %
	$\lambda = 2$	$\lambda = 4$		
$\text{Eu}(\text{TTA})_3(\text{H}_2\text{O})_2$	20,66	2,91	$9,30 \cdot 10^8$	22,78
$\text{Eu}(\text{TTA})_3\text{Phen}$	21,44	2,87	$1,19 \cdot 10^9$	42,31
$\text{Eu}(\text{TTA})_3\text{IP}$	19,71	2,96	$9,88 \cdot 10^8$	35,15
$\text{Eu}(\text{TTA})_3\text{PI}$	20,38	2,87	$9,09 \cdot 10^8$	38,07
$\text{Eu}(\text{TTA})_3\text{PIP}$	22,36	3,05	$7,57 \cdot 10^8$	40,72

По расчетам значение квантового выхода для комплекса $\text{Eu}(\text{TTA})_3(\text{H}_2\text{O})_2$ составило 22,78%, что согласуется с диапазоном экспериментальных значений от 23 до 29%, приведенных различными авторами [3, 25].

В рамках теории Джадда-Офельта параметры интенсивности Ω_λ характеризуют силу f-f переходов в ионах Ln(III). Количественно они могут быть использованы для описания симметрии координационного узла иона Ln(III), а также степени ковалентности связи между Ln(III) и лигандами. Высокое значение параметра Ω_2 свидетельствует о низкой симметрии узла. Этот параметр чувствителен к взаимодействиям ближнего порядка и окружения, кратковременным асимметричным возмущениям, стерическим эффектам и ковалентности, тогда как значения Ω_4 отражают вклад взаимодействий дальнего порядка, долгоживущие поля лигандов и жесткость среды. Из приведённых в табл. 1 данных можно предположить, что увеличение параметров интенсивности связано с ростом величин теоретического квантового выхода люминесценции и асимметрии в координационного узла иона Eu(III). Комплексы $\text{Eu}(\text{TTA})_3\text{Phen}$ и $\text{Eu}(\text{TTA})_3\text{PIP}$ демонстрируют более значительную интенсивность излучения и величины квантового выхода (42,31 и 40,72%) среди изученных соединений. Комплекс $\text{Eu}(\text{TTA})_3\text{Phen}$ характеризуется также большей скоростью прямого переноса энергии ($1,19 \cdot 10^9 \text{c}^{-1}$). Фенильные заместители C_6H_5- в лигандах PIP и PI действуют как эффективные хромофорные центры, увеличивающие способность лиганда к поглощению света, по сравнению с IP.

Оценивать эффективность люминесценции комплексов Eu(III) можно, если определить основные каналы внутримолекулярного переноса энергии и

оценить эффективность процессов с учетом соотношения уровней T_1 лигандов и резонансных подуровней $Eu(III)$.

Полученное с помощью метода ZINDO/S значение энергии T_1 составило 2,507 эВ для комплекса $Eu(TTA)_3(H_2O)_2$, что согласуется с экспериментальной величиной 2,520 эВ для TTA [20]. Триплетный уровень Phen соответствует экспериментальному значению 2,684 эВ [21], а в расчете комплекса $Eu(TTA)_3Phen$ величине 2,559 эВ. Таким образом, различие рассчитанных величин энергий низших T_1 состояний от экспериментальных составило не более 0,13 эВ.

Для других комплексов в результате моделирования были определены следующие положения уровней T_1 для оснований Льюиса: 2,535 эВ для $Eu(TTA)_3IP$, 2,387 эВ для $Eu(TTA)_3PI$ и 2,257 эВ для $Eu(TTA)_3PIP$. Следовательно, введение ароматических заместителей в структуру лиганда IP привело к понижению энергии триплета.

Преимущественный перенос энергии с участием β -дикетонных лигандов Phen, IP и PI происходит по каналу $T_1 \rightarrow {}^5D_1$ (рис. 3). При этом комплексу $Eu(TTA)_3Phen$, обладающему наибольшим значением Q , присущ значительный энергетический разрыв между уровнем T_1 лиганда и подуровнем 5D_1 (2,359 эВ) иона $Eu(III)$, что способствует эффективному процессу внутримолекулярного переноса энергии с минимальной вероятностью потерь [26, 27]. Напротив, в комплексе $Eu(TTA)_3PIP$ передача энергии с T_1 состояния лиганда PIP осуществляется преимущественно на подуровень 5D_0 (2,141 эВ), что повышает риск потерь энергии без излучения и снижает общую эффективность люминесценции [5-8].

Реализованный вычислительный алгоритм в программе LUMPAC основан на применении полуэмпирических моделей и усреднённых экспериментальных данных по фотофизическим процессам в комплексах $Eu(III)$. Следовательно, точность результатов в LUMPAC зависит от качества используемой параметризации. Метод расчёта предполагает также использование упрощённой схемы, исключающей учёт воздействия окружающей среды и межмолекулярных взаимодействий, способных значительно изменять конформационные и электронные свойства молекул, влияя таким образом на количественные характеристики люминесценции.

Выводы

С помощью методов квантово-химического моделирования (SMC/RM1, ZINDO/S) и теории Джадда-Офельта было проведено исследование влияния модификаций строения в ряду производных 1Н-имидазо[4,5-f][1,10]фенантролина на количественные характеристики люминесценции комплексов $Eu(III)$. Получены количественные зависимости между характеристиками заместителей в лигандах, их количеством, положением и рассчитанными значениями параметров люминесценции, эффективностью излучения и теоретическим квантовым выходом. Полученные в

работе результаты моделирования позволяют прогнозировать люминесцентные свойства комплексов $Eu(III)$ на основе их молекулярного строения. Расчет энергий триплетных состояний позволил оценить вероятность сенсбилизации иона $Eu(III)$ и выявить наиболее перспективные лиганды для эффективного переноса энергии. Проведенное сравнение расчетных данных с доступными экспериментальными параметрами подтвердило адекватность и надежность примененных вычислительных методов для прогнозирования свойств данного класса соединений. Выбранный подход позволяет целенаправленно подбирать лиганды с усиленными люминесцентными характеристиками для комплексов $Eu(III)$ для оптимизации процесса создания новых люминесцентных материалов.

Работа выполнена за счет гранта, предоставленного Академией наук Республики Татарстан образовательным организациям высшего образования, научным и иным организациям на поддержку планов развития кадрового потенциала в части стимулирования их научных и научно-педагогических работников к защите докторских диссертаций и выполнению научно-исследовательских работ (соглашение №10/2025-ПД-КНИТУ от 22.12.2025).

Литература

1. K. Nehra, A. Dalal, A. Hooda, S. Bhagwan, R.K. Saini, B. Mari, S. Kumar, D. Singh, *Journal of Molecular Structure*, **1249**, 131531 (2022).
2. J. Hayashi, S. Shoji, Y. Kitagawa, Y. Hasegawa, *Coordination Chemistry Reviews*, **467**, 214607 (2022).
3. O.L. Malta, H.F. Brito, J.F.S. Menezes, F.R. Gonçalves e Silva, C. de Mello Donegá, S. Alves, *Chemical Physics Letters*, **282**, 233-238 (1998).
4. J.-C.G. Bünzli, *European Journal of Inorganic Chemistry*, **44**, 5058–5063 (2017).
5. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **18**, 16, 41-43 (2015).
6. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидкие кристаллы и практическое использование*, **16**, 2, 80-89 (2016).
7. К.А. Романова, А.Я. Фрейдзон, А.А. Багатурьянц, М.В. Стрелков, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **15**, 18, 19-22 (2012).
8. К.А. Романова, А.Я. Фрейдзон, А.А. Багатурьянц, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **16**, 14, 43-47 (2013).
9. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **20**, 19, 15-17 (2017).
10. К.А. Романова, А.В. Кремлева, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидкие кристаллы и практическое использование*, **19**, 2, 15-24 (2019).
11. F.R.G. Silva, J.F.S. Menezes, G.B. Rocha, S. Alves, H.F. Brito, R.L. Longo, O.L. Malta, *Journal of Alloys and Compounds*, **303–304**, 364-370 (2000).
12. C. Xu, *Journal of Rare Earths*, **28**, 6, 854-857 (2010).
13. J.J.P. Stewart, MOPAC2016 (2016).
14. К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник Технологического университета*, **19**, 19, 37-40 (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. F. Neese, F. Wennmohs, U. Becker, C. Riplinger, *Journal Chemistry Physics*, **152**, 224108 (2020).
18. R. Gonçalves e Silva, R. Longo, O.L. Malta, C. Piguet, J.-C.G. Bünzli, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2**, 5400-5403 (2000).
19. J. Dutra, T.D. Bispo, R. Freire, *Journal of Computational Chemistry*, **35**, 10, 772-775 (2014).
20. E.E.S. Teotonio, H.F. Brito, G.F. de Sá, M.C.F.C. Felinto, R.H.A. Santos, R.M. Fuquen, I.F. Costa, A.R. Kennedy, D. Gilmore, W.M. Faustino, *Polyhedron*, **38**, 58-67 (2012).
21. W.M. Faustino, O.L. Malta, E.E.S. Teotonio, H.F. Brito, A.M. Simas, G.F.J. de Sa, *The Journal of Physical Chemistry A*, **110**, 2510-2516 (2006).
22. J.G. White, *Inorganica Chimica Acta*, **16**, 159-162 (1976).
23. M.-L. Hu, Z.-Y. Huang, Y.-Q. Cheng, S. Wang, J.-J. Lin, Y. Hu, D.-J. Xu, Y.-Z. Xu, *Chinese Journal of Chemistry*, **17**, 637-643 (1999).
24. T. Cardinaels, J. Ramaekers, P. Nockemann, K. Driesen, K. Van Hecke, L. Van Meervelt, S. Lei, S. De Feyter, D. Guillon, B. Donnio, K. Binnemans, *Chemistry of Materials*, **20**, 1278-1291 (2008).
25. R. Ilmi, A. Haque, M.S. Khan, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **370**, 135-144 (2019).
26. 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).
27. M. Latva, H. Takalo, V.-M. Mikkala, C. Matachescu, J.C. Rodriguez-Ubis, J. Kankare, *Journal of Luminescence*, **75**, 2, 149-169 (1997).
- 8.K. A. Romanova, A. Ya. Freidzon, A. A. Bagaturyants, Yu. G. Galyametdinov, *Herald of Kazan Technological University*, 16, 14, 43-47 (2013).
- 9.K.A. Romanova, Yu. G. Galyametdinov, *Herald of Technological University*, 20, 19, 15-17 (2017).
10. K. A. Romanova, A. V. Kremleva, Yu. G. Galyametdinov, *Liquid crystals and practical application*, 19, 2, 15-24 (2019).
11. F.R.G. Silva, J.F.S. Menezes, G.B. Rocha, S. Alves, H.F. Brito, R.L. Longo, O.L. Malta, *Journal of Alloys and Compounds*, **303-304**, 364-370 (2000).
12. C. Xu, *Journal of Rare Earths*, **28**, 6, 854-857 (2010).
13. J.J.P. Stewart, MOPAC2016 (2016).
14. K.A. Romanova, Yu. G. Galyametdinov, *Herald of Technological University*, 19, 19, 37-40 (2016).M.A.M. Filho, J.D.L. Dutra, G.B. Rocha, R.O. Freire, A.M. Simas, *RSC Advances*, **3**, 37, 16747-16755 (2013).
15. M.R. Nailton, A. Daniel, M. Rodrigues, B. Nivan, F. Gimenez, O. Ricardo, *Journal of Molecular Structure*, **1184**, 310-15 (2019).
16. F. Neese, F. Wennmohs, U. Becker, C. Riplinger, *Journal Chemistry Physics*, **152**, 224108 (2020).
17. R. Gonçalves e Silva, R. Longo, O.L. Malta, C. Piguet, J.-C.G. Bünzli, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2**, 5400-5403 (2000).
18. J. Dutra, T.D. Bispo, R. Freire, *Journal of Computational Chemistry*, **35**, 10, 772-775 (2014).
19. E.E.S. Teotonio, H.F. Brito, G.F. de Sá, M.C.F.C. Felinto, R.H.A. Santos, R.M. Fuquen, I.F. Costa, A.R. Kennedy, D. Gilmore, W.M. Faustino, *Polyhedron*, **38**, 58-67 (2012).
20. W.M. Faustino, O.L. Malta, E.E.S. Teotonio, H.F. Brito, A.M. Simas, G.F.J. de Sa, *The Journal of Physical Chemistry A*, **110**, 2510-2516 (2006).
21. J.G. White, *Inorganica Chimica Acta*, **16**, 159-162 (1976).
22. M.-L. Hu, Z.-Y. Huang, Y.-Q. Cheng, S. Wang, J.-J. Lin, Y. Hu, D.-J. Xu, Y.-Z. Xu, *Chinese Journal of Chemistry*, **17**, 637-643 (1999).
23. T. Cardinaels, J. Ramaekers, P. Nockemann, K. Driesen, K. Van Hecke, L. Van Meervelt, S. Lei, S. De Feyter, D. Guillon, B. Donnio, K. Binnemans, *Chemistry of Materials*, **20**, 1278-1291 (2008).
24. R. Ilmi, A. Haque, M.S. Khan, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **370**, 135-144 (2019).
25. 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).
26. M. Latva, H. Takalo, V.-M. Mikkala, C. Matachescu, J.C. Rodriguez-Ubis, J. Kankare, *Journal of Luminescence*, **75**, 2, 149-169 (1997).

References

- 1.K. Nehra, A. Dalal, A. Hooda, S. Bhagwan, R.K. Saini, B. Mari, S. Kumar, D. Singh, *Journal of Molecular Structure*, **1249**, 131531 (2022).
- 2.J. Hayashi, S. Shoji, Y. Kitagawa, Y. Hasegawa, *Coordination Chemistry Reviews*, **467**, 214607 (2022).
- 3.O.L. Malta, H.F. Brito, J.F.S. Menezes, F.R. Gonçalves e Silva, C. de Mello Donegá, S. Alves, *Chemical Physics Letters*, **282**, 233-238 (1998).
- 4.J.-C.G. Bünzli, *European Journal of Inorganic Chemistry*, **44**, 5058-5063 (2017).
- 5.K.A. Romanova, Yu. G. Galyametdinov, *Herald of Technological University*, 18, 16, 41-43 (2015).
- 6.K.A. Romanova, Yu. G. Galyametdinov, *Liquid crystals and practical application*, 16, 2, 80-89 (2016).
- 7.K. A. Romanova, A. Ya. Freidzon, A. A. Bagaturyants, M. V. Strelkov, Yu. G. Galyametdinov, *Herald of Technological University*, 15, 18, 19-22 (2012).

© **К. А. Романова** – канд. хим. наук, доцент кафедры Физической и коллоидной химии (ФКХ), Казанский национальный исследовательский 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), Kazan, Russia, ksenuya@mail.ru; **Yu. G. Galyametdinov** – Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Full Professor, the PCC department, KNRTU.

Дата поступления рукописи в редакцию – 09.02.26.

Дата принятия рукописи в печать – 16.03.26.