

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНО- И БИЯДЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ

ЛАНТАНОИДОВ(III)¹

Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Россия, Казань, ул. Карла Маркса, д. 68, kseniya@mail.ru.*

Одним из наиболее перспективных направлений применения координационных соединений лантаноидов(III) является создание на их основе высокоэффективных люминесцентных материалов с монохроматическим излучением. В качестве объектов исследования были выбраны моно- и биядерные комплексы Eu(III), Gd(III) и Tb(III) с различными замещенными β-дикетонами и основаниями Льюиса. Расчеты геометрии комплексов проводились с использованием прикладной программы Priroda 6 и обменно-корреляционного функционала PBE. Моделирование положений низших триплетных и синлетных возбужденных состояний проводили методами TDDFT (PBE, B3LYP) и CIS в программе Firefly 8, в том числе с учетом релаксации геометрии возбужденного состояния. Полученные расчетные величины возбужденных состояний были подтверждены в эксперименте. На основе рассчитанных величин были установлены корреляции между положением возбужденных уровней и квантовым выходом люминесценции, определены основные каналы внутримолекулярного переноса энергии.

Квантово-химические расчеты были проведены с использованием суперкомпьютера МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН» и вычислительных ресурсов системы «Ломоносов» суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук (№ МК-7320.2016.3)