

Химия

Научная статья

УДК: 544.23.022.346

ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ β -ДИКЕТОНАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ Eu(III) и Ga(III)

М. С. Груздев*, А. А. Ксенофонтов, У. В. Червонова, В. А. Мозгова, С. А. Догадаева

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

ИНФОРМАЦИЯ

История статьи:

Поступила 17.06.2025

Одобрена 6.10.2025

Принята 13.10.2025

Ключевые слова:

β -дикетоны,
комплексы европия (III) и
галлия (III),
флуоресценция,
квантовый выход,
DFT расчеты

АННОТАЦИЯ

Работа направлена на изучение спектральных свойств гетеролептических β -дикетонатных комплексов Ga(III) и Eu(III). Методами УФ/видимой и флуоресцентной спектроскопии установлено, что образцы проявляют эмиссию в растворах и в твердом состоянии. Раствор комплекса Ga(III) в дихлорметане имеет слабую флуоресценцию ($\phi_{\text{фл}} = 7\%$) с максимумом испускания при 435 нм. Значение $\phi_{\text{фл}}$ для раствора комплекса с ионом Eu^{3+} составило 3 %. В твердом состоянии наблюдается снижение эффективности флуоресценции комплекса $[\text{GaL}_2\text{Vipy}]\text{Cl}$ в сравнении с растворами до значения $\phi_{\text{фл}} = 1\%$. На эффективность эмиссии комплекса $[\text{EuL}_2\text{Vipy}]\text{Cl}$ в твердом виде существенное влияние оказывает эффект молекулярной упаковки. В спектрах отсутствует полоса, относящаяся к $S_n - S_0$ электронному переходу лигандов. Это свидетельствует об увеличении эффективности переноса энергии от лигандов к иону Eu(III) со значением $\phi_{\text{фл}} 15\%$ и способствует высокомонокроматическому красному испусканию комплекса Eu в твердом состоянии. На основе квантово-химических расчетов проведен анализ природы электронных переходов и установлены геометрические параметры координационных центров комплексов.

DOI:

10.18083/LCAppl.2025.4.16

EDN:

<https://elibrary.ru/mkdmao>

Supplementary:

http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/articles/suppl_2025_4_16-24

Для цитирования:

Груздев М. С., Ксенофонтов А. А., Червонова У. В., Мозгова В. А., Догадаева С. А. Флуоресцентные β -дикетонатные комплексы Eu(III) и Ga(III) // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2025. Т. 25, № 4. С. 16–24.

Chemistry

Original Article

FLUORESCENT β-DIKETONATE COMPLEXES OF Eu(III) AND Ga(III)

M. S. Gruzdev*, A. A. Ksenofontov, U. V. Chervonova, V. A. Mozgova, S. A. Dogadaeva

G. A. Krestov Institute of Solution Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia

ARTICLE INFO:

ABSTRACT

Article history:

Received 17 June 2025

Approved 6 October 2025

Accepted 13 October 2025

Key words:

β-diketones, europium(III)
and gallium(III) complexes,
fluorescence,
quantum yield,
DFT calculations

The work is aimed at studying the spectral properties of heteroleptic β-diketonate complexes of Ga(III) and Eu(III). UV/visible and fluorescence spectroscopy showed that the complexes exhibit emission in solutions and in the solid state. A solution of the Ga(III) complex in dichloromethane has a weak fluorescence ($\varphi_{\text{fl}} = 7\%$) with an emission maximum at 435 nm. The value of φ_{fl} for the solution of the complex with the Eu^{3+} ion is 3 %. In the solid state, a decrease in the fluorescence efficiency of the $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ complex is observed compared to solutions to a value of φ_{fl} of 1 %. The emission efficiency of the $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ complex in solid form is significantly affected by the molecular packing effect. The spectra do not contain a band related to the $S_{\text{n}} - S_0$ electron transition of the ligands. This indicates an increase in the efficiency of energy transfer from the ligands to the Eu(III) ion with a φ_{fl} value of 15 % and promotes highly monochromatic red emission of the Eu complex in the solid state. Based on quantum chemical calculations, an analysis of the nature of electronic transitions was carried out and the geometric parameters of the coordination centers of the complexes were established.

DOI:

10.18083/LCAppl.2025.4.16

EDN:

<https://elibrary.ru/mkdmao>

Supplementary:

http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/articles/suppl_2025_4_16-24

For citation:

Gruzdev M. S., Ksenofontov A. A., Chervonova U. V., Mozgova V. A., Dogadaeva S. A. Fluorescent β-diketonate complexes of Eu(III) and Ga(III). *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2025, **25** (4), 16–24 (in Russ.).

Введение

Металлокомплексы дикетонов – это координационные соединения, в которых дикетоны выступают в роли лигандов, связываясь с ионами металлов. Они привлекают большое внимание благодаря своей широкой области применения, от катализа до медицины и материаловедения [1]. Дикетоны содержат две карбонильные группы ($C=O$), разделенные метиленовой группой ($-CH_2-$). Соединения демонстрируют кето-енольную таутомерию в растворах, последняя, енольная форма, способна координироваться с ионами металлов через оба атома кислорода. Координационное число и геометрия металлокомплекса зависят от иона металла, дикетона и других лигандов. β -Дикетонатные комплексы лантаноидов впервые синтезированы и описаны в 1897 году [2]. Сами по себе трехзарядные ионы лантаноидов обладают слабым поглощением, поскольку при возбуждении ультрафиолетовым (УФ) излучением реализуется внутриконфигурационный $f-f$ переход, запрещенный по четности правилами отбора. В свою очередь это приводит к низким коэффициентам экстинкции (ϵ) и низкой эффективности люминесценции [3]. Одним из способов снятия запрета на f -переходы является химическое связывание ионов лантаноидов с сильно поглощающими органическими лигандами [4, 5]. Альтернатива этому – использование вспомогательных нейтральных лигандов [6], дополняющих координационную сферу, обеспечивающих жесткость и улучшающих термические и оптические свойства металлокомплексов. Соединение таких лигандов с дикетонатами лантаноидов облегчает излучательные переходы, наделяя комплексы люминесцентными свойствами [7]. Например, использование вспомогательного лиганда 1,10-фенантролина [8] или 2,2'-бипиридина [9] препятствует проникновению в координационную сферу соединения молекул воды.

Цель данной работы – изучение гетеролептических трехвалентных комплексов ионов европия (Eu) и галлия (Ga). Металлокомплексы с дикетонами, представленные в работе, сочетают уникальные свойства Ga и Eu с возможностью молекулярного дизайна, которую предоставляют дикетонатные лиганды. Ионы галлия имеют относительно высокий заряд и маленький ионный радиус, что способствует образованию стабильных координационных комплексов с уве-

личением квантового выхода флуоресценции. Наличие Eu^{3+} , типичного представителя лантаноидов, обуславливает люминесцентные свойства координационных молекулярных систем, расширяя спектральный диапазон оптического отклика образцов.

Эксперимент

Материалы и методы исследования

Исходные реагенты, выбранные для синтеза, были коммерчески доступны и использовались без дополнительной очистки. β -Дикетон – 1-(4-фторфенил)-3-(4-бромфенил)-пропан-1,3-дион (L) – синтезирован авторами [10, 11] по реакции конденсации Кляйзена.

Оптические свойства

Электронные спектры поглощения (ЭСП) комплексов в растворе дихлорметана (ДХМ) записаны на спектрометре CM 2203 (SOLAR, Беларусь) в диапазоне молярных концентраций 10^{-6} моль/л при $T = 298$ К. Флуоресцентные характеристики комплексов в растворах ДХМ и в твердом виде зарегистрированы на спектрометре FluoTime 300 (PicoQuant, Германия) при длине волны возбуждения 350 нм. Значения абсолютного квантового выхода флуоресценции образцов в растворах ДХМ и в твердом состоянии определены с помощью интегрирующей сферы.

Квантово-химические расчеты

Конформационный скрининг проведен для всех молекул с помощью программы GFN2-xTB в пакете CREST [12]. Затем геометрия наиболее стабильного конформера была оптимизирована в основном состоянии с помощью ω B97X-D/def2-SVP/def2-TZVPP (Eu, Ga) [13, 14] в программном пакете Gaussian 16 [15]. Отсутствие мнимых частот подтвердило наличие энергетических минимумов оптимизированной геометрии. Кроме того, на том же уровне теории был проведен TDDFT-анализ, в ходе которого были рассчитаны первые 50 синглетных возбужденных состояний. Влияние хлороформа на спектральные характеристики было учтено с использованием модели SMD (solvation model based on density) [16]. Для анализа и визуализации результатов использовались программы UCSF Chimera v. 1.18 [17] и ChemCraft 1.8 [18].

Результаты и их обсуждение

Реакции комплексообразования проведены на основе β -дикетонатного лиганда и хелатирующего бидентатного лиганда 2,2'-бипиридина (Bipy) с солями $\text{EuCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и GaCl_3 согласно методике [11], с образованием гетеролептических координационных соединений с общей формулой $[\text{XL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$, где L – 1-(4-фторфенил)-3-(4-бромфенил)-пропан-1,3-дион, Bipy – 2,2'-бипиридин, X – Ga^{3+} и Eu^{3+} (рис. 1).

Оптические свойства комплексов Ga(III) и Eu(III) изучены как для разбавленных растворов в ДХМ (10^{-6} моль/л), так и для порошкообразных образцов. В электронных спектрах поглощения

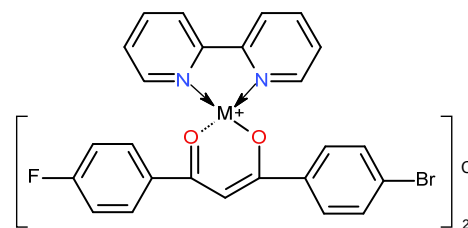


Рис. 1. Схематическое изображение структуры комплексов, $\text{M} = \text{Ga}^{3+}, \text{Eu}^{3+}$

Fig. 1. Schematic representation of the structure of the complexes, $\text{M} = \text{Ga}^{3+}, \text{Eu}^{3+}$

растворов комплексов наблюдается две полосы при 271 нм, 355 нм для $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ и 249 нм, 353 нм для $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ (рис. 2, а).

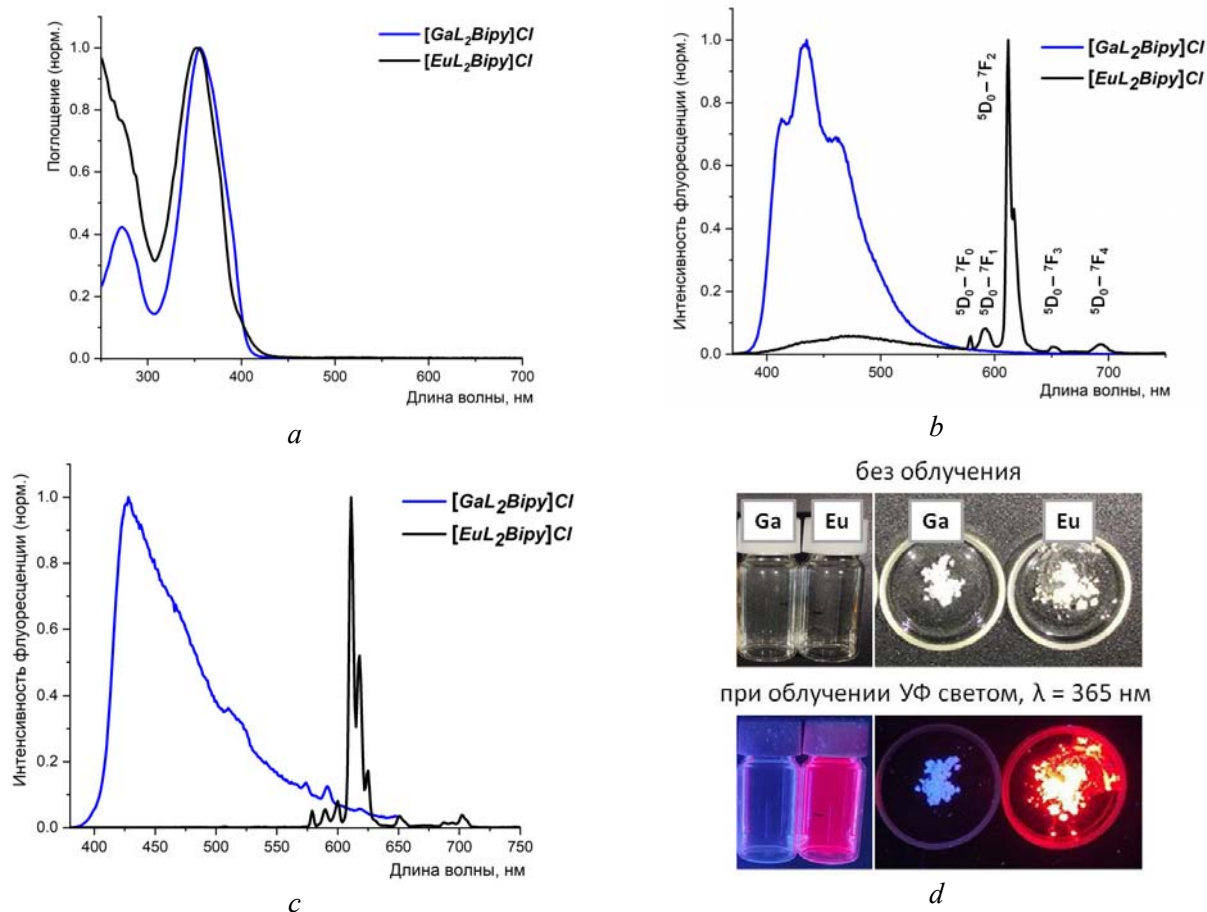


Рис. 2. Нормированные спектры поглощения (а), спектры испускания комплексов в растворе ДХМ (b), спектры испускания комплексов в твердом состоянии (с). Фотографии растворов комплексов и твердых образцов, полученные при дневном свете и при УФ-облучении (365 нм) (d)

Fig. 2. Normalized UV-vis absorption (a), emission spectra of complexes in DCM solution (b), normalized emission spectra of complexes in solid state (c). Photographs of solutions of complexes and solid samples obtained under daylight and UV light (365 nm) (d)

В основном эти полосы обусловлены хелатирующими β -дикетонатными и 2,2'-электронными переходами π - π^* -типа бипиридинового лигандов (рис. 3).

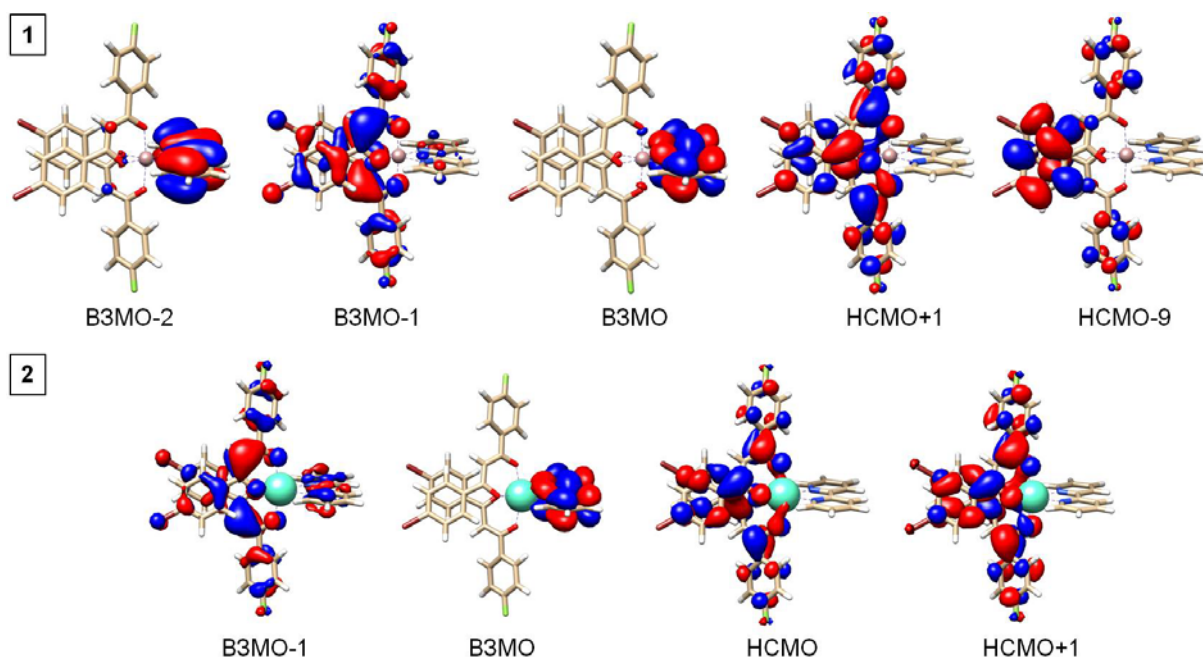


Рис. 3. Вид граничных молекулярных орбиталей комплексов $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ (1) и $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ (2)

Fig. 3. The FMOs type of $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ (1) and $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ (2) complexes

Раствор комплекса $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ в ДХМ проявляет слабую синюю флуоресценцию ($\phi_{\text{фл}} = 7\%$) с максимумом испускания при 435 нм (рис. 2, б). Эмиссионные спектры комплекса $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ в ДХМ ($\phi_{\text{фл}} = 3\%$) демонстрируют характерные переходы $\text{Eu}(\text{III})$ из состояния $^5\text{D}_0$ в состояние $^7\text{F}_J$ ($J = 0 - 4$) с максимумами 579 нм, 592 нм, 612 нм, 651 нм и 693 нм и преобладанием электродипольного перехода $^5\text{D}_0 - ^7\text{F}_2$ (рис. 2, б). Кроме того, в спектре комплекса Eu идентифицируется полоса испускания с максимумом при 473 нм, относящаяся к $\text{S}_n - \text{S}_0$ электронному переходу лигандов, что может свидетельствовать о неполном переносе энергии от лигандов к иону $\text{Eu}(\text{III})$ [19].

Исследование образцов в твердом состоянии (рис. 2, с) выявило снижение эффективности флуоресценции комплекса $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ в сравнении с растворами до значения $\phi_{\text{фл}} 1\%$. Полоса испускания комплекса в твердом состоянии уширена и смещена на 7 нм в синюю область спектра. На эффективность эмиссии комплекса $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ в

твердом состоянии существенное влияние оказывает эффект молекулярной упаковки. В сравнении со спектрами испускания в ДХМ, в спектрах твердого образца $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ отсутствует полоса, относящаяся к $\text{S}_n - \text{S}_0$ электронному переходу лигандов. Это свидетельствует об увеличении эффективности переноса энергии от лигандов к иону $\text{Eu}(\text{III})$ со значением $\phi_{\text{фл}} 15\%$ [20–22]. Более того, отсутствие синего испускания лигандов способствует высокомонохроматическому красному испусканию комплекса $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ в твердом состоянии, что соответствует координатам CIE: 0,66; 0,335 на диаграмме цветности (рис. 4). В растворе ДХМ комплекс Eu проявляет розовато-красное испускание (CIE 0,464; 0,306). На основании полученных данных можно предположить, что комплекс $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ в твердом состоянии может выступать в качестве компонента субпикселей, испускающего красный цвет при изготовлении белых OLED на основе RGB, а также эмиссионного слоя при изготовлении R-OLED [19, 23].

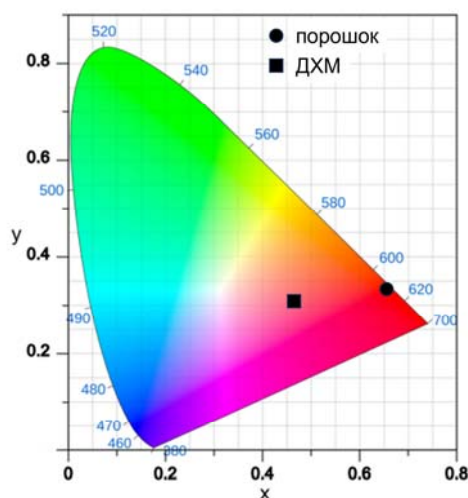


Рис. 4. Диаграмма цветности CIE [24] комплекса $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ в твердом состоянии и в растворе ДХМ

Fig. 4. CIE chromaticity diagram [24] of the $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ complex in solid state and DCM solution

Моделирование структуры методом функционала плотности

В комплексах Ga и Eu атом комплексообразователя координирует два β -дикетонатных лиганда и один 2,2'-бипиридиновый лиганд с геометрией координационного узла в виде искаженного октаэдра (рис. 3). Искажение координационного полиэдра увеличивается при переходе от комплекса Ga к комплексу Eu. Средние значения длин координационных связей М – О и М – N аналогично увеличиваются и составляют соответственно 1,995 Å и 1,989 Å для Ga и 2,292 Å и 2,409 Å для Eu (табл. 1). Кроме того, с увеличением ионного радиуса иона комплексообразователя уменьшается значение валентных углов координационного полиэдра (О – М – О, N – М – N, О – М – N) (табл. 1). Анализ внутримолекулярных взаимодействий показывает, что для металлокомплексов характерно наличие π -стекинга (3,792 Å – $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$, 3,672 Å – $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$) и C–H $\cdots$ Br взаимодействий (3,901 Å – $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$, 3,676 Å – $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$) между бромфенильными фрагментами β -дикетонатных лигандов. Стоит отметить наличие слабых C–H $\cdots$ π -контактов (4,204 Å – $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$, 4,909 Å – $[\text{EuL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$) между фторфенильными фрагментами

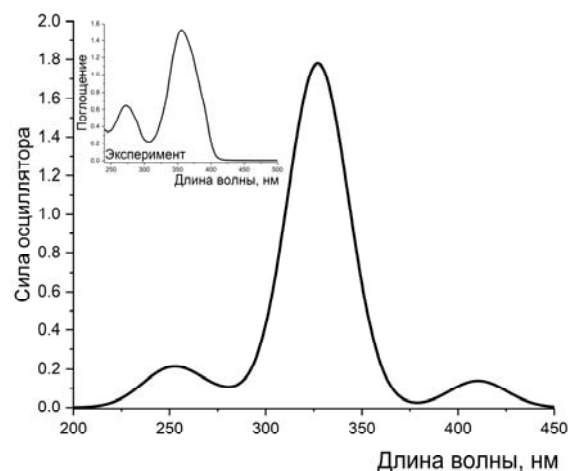


Рис. 5. TDDFT-спектр комплекса $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$. Вставка: экспериментальный спектр поглощения в ДХМ

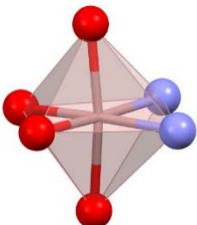
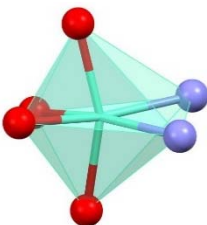
Fig. 5. TDDFT spectrum of $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ complex. Insert: experimental UV/Vis spectrum in DCM

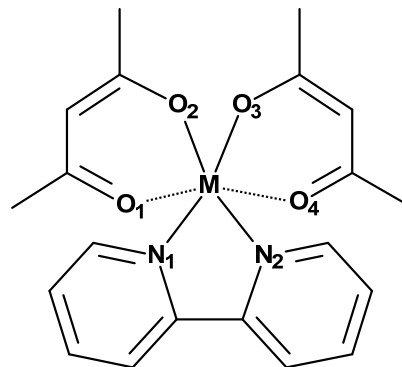
ми β -дикетонатных лигандов и 2,2'-бипиридиновым лигандом.

Анализ природы электронных переходов для комплекса $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ выполнялся при помощи TDDFT (рис. 3). Полученные TDDFT-спектры находятся в хорошем согласии со спектральным профилем экспериментальных спектров поглощения комплекса (*Supplementary, Table 1S*, рис. 5).

Результаты TDDFT-анализа показали, что комплекс $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ характеризуется вертикальным возбуждением с наибольшей силой осциллятора, связанным с ВЗМО-1 – НСМО+1 электронным переходом, обусловленным делокализацией электронной плотности на обоих β -дикетонатных лигандах. В области меньших энергий находится два вертикальных возбуждения, связанных с ВЗМО – НСМО+9 (3,02 эВ) и ВЗМО-2 – НСМО+1 (3,67 эВ) электронными переходами, обусловленных внутримолекулярным переносом заряда с 2,2'-бипиридинового лиганда на β -дикетонатные лиганды. Вид граничных молекулярных орбиталей для комплекса $[\text{GaL}_2\text{Bipy}]\text{Cl}$ свидетельствует о возможности реализации внутримолекулярного переноса энергии при фотовозбуждении молекулы.

Таблица 1. Геометрические параметры координационного центра для комплексов [GaL₂Bipy]Cl и [EuL₂Bipy]ClTable 1. Geometrical parameters of the coordination center of [GaL₂Bipy]Cl and [EuL₂Bipy]Cl complexes

Вид связи	[GaL ₂ Bipy]Cl	[EuL ₂ Bipy]Cl
M – O ₁ , Å	1,997	2,293
M – O ₂ , Å	1,992	2,291
M – O ₃ , Å	1,997	2,293
M – O ₄ , Å	1,992	2,291
M – N ₁ , Å	1,989	2,409
M – N ₂ , Å	1,989	2,409
O ₁ – M – O ₂ , °	85,9	74,3
O ₃ – M – O ₄ , °	85,9	74,3
N ₁ – M – N ₂ , °	82,5	67,9
O ₁ – M – O ₄ , °	172,5	158,8
O ₂ – M – N ₂ , °	176,4	167,8
O ₃ – M – N ₁ , °	176,4	167,6
Координационный полиэдр		



Выводы

Спектрально-люминесцентные свойства комплексов Ga и Eu исследованы в растворе ДХМ и в твердом состоянии. В отличие от комплекса [GaL₂Bipy]Cl, эффективность флуоресценции которого в твердом состоянии значительно падает, комплекс [EuL₂Bipy]Cl характеризуется интенсивным высокомонокроматическим красным излучением. Увеличение эффективности флуоресценции комплекса [EuL₂Bipy]Cl в твердом состоянии, вероятно, связано с существенным искажением координационного полиэдра, обуславливающим усиление ⁵D₀ – ⁷F₂ перехода и внутримолекулярного переноса энергии. Обнаруженное высокомонокроматическое красное излучение комплекса Eu³⁺ в твердом состоянии позволяет рассматривать его в качестве компонента субпикселей, испускающего красный цвет при изготовлении белых OLED на основе RGB, а также эмиссионного слоя при изготовлении R-OLED.

Благодарность: авторы выражают благодарность Центру коллективного пользования научным оборудованием «Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований» за техническую поддержку проведенных исследований. Работа выполнена

при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-13-00015).

Acknowledgments: the authors express their gratitude to the Centre for joint use of scientific equipment "The Upper Volga Region Center of Physico-Chemical Research" for technical support of the research conducted. This work was financially supported by the Russian Science Foundation (Project No. 23-13-00015).

Список источников / References

1. Шокова Э. А., Ким Дж. К., Ковалев В. В. 1,3-Дикетоны. Синтез и свойства // Журнал органической химии. 2015. Т. 51, № 6. С. 773–847. [Shokova E.A., Kim J.K., Kovalev V.V. 1,3-Diketones. Synthesis and properties. *Russ. J. Org. Chem.*, 2015, **51**(6), 755–830. DOI: 10.1134/S1070428015060019].
2. Urbain G., Budischovsky E. Recherches sur les sables monazites. *Comptes Rendus*, 1897, **124**, 618.
3. Bünzli J.-C.G. Benefiting from the unique properties of lanthanide ions. *Acc. Chem. Res.*, 2005, **39** (1), 53–61. DOI: 10.1021/ar0400894.
4. Bünzli J.-C.G. Lanthanide luminescence for biomedical analyses and imaging. *Chem. Rev.*, 2010, **110** (5), 2729–2755. DOI: 10.1021/cr900362e.
5. Bünzli J.-C.G. On the design of highly luminescent lanthanide complexes. *Coord. Chem. Rev.*, 2015, **293–294**, 19–47. DOI: 10.1016/j.ccr.2014.10.013.

6. Dalal A., Nehra K., Hooda A., Singh D., Jakhar K., Kumar S. Preparation and photoluminescent characteristics of green Tb(III) complexes with β-diketones and N donor auxiliary ligands. *Chem. Commun.*, 2022, **139**, 109349. DOI: 10.1016/j.inoche.2022.109349.
7. Lin P.H., Leclère M., Long J., Burchell T.J., Korobkov I., Clérac R., Murugesu M. Fluorescent dialdehyde ligand for the encapsulation of dinuclear luminescent lanthanide complexes. *Dalton Trans.*, 2010, **39**, 5698–5704. DOI: 10.1039/C000978D.
8. Deun R.V. Strong erbium luminescence in the near-infrared telecommunication window. *Chem. Phys. Lett.*, 2004, **397** (4–6), 447–450. DOI: 10.1016/j.cplett.2004.09.011.
9. Essahili O., El Azzaoui A., Ilsouk M., Moudam O. Investigating the long-term stability of photoluminescence lifetimes in PMMA films doped with β-diketonate europium complexes based on bipyridine and terpyridine derivatives. *J. Photochem. Photobiol. A*, 2024, **447**, 115211. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2023.115211.
10. Chervonova U.V., Ksenofontov A.A., Gruzdev M.S. Synthesis, thermal, and spectroscopic properties of high-temperature photoactive halogen-substituted boron difluoride β-diketonate. *Russ. J. Phys. Chem. A*, 2024, **98**(14), 3474–3480. DOI: 10.1134/S0036024424703059.
11. Стариченко Д. В., Груздев М. С., Червонова У. В., Воробьева В. Е., Волегов А. С., Яцык И. В. Новый функциональный ряд смешаннолигандных β-дикетонатных комплексов Fe(III), Ga(III) и Eu(III): эволюция магнитных состояний // *Известия Академии Наук. Серия Физическая*. 2025. Т. 89, № 10. С. 1597–1606. [Starichenko D. V., Gruzdev M.S., Chervonova U.V., Vorobyeva V.E., Volegov A.S., Yatsyk I.V. New functional series of mixed-ligand β-diketonate complexes of Fe(III), Ga(III) and Eu(III): evolution of magnetic states. *Bulletin of the Academy of Sciences. Series Physical*, 2025, **89** (10), 1783–1791. DOI: 10.1134/S1062873825713029.
12. Bannwarth C., Ehlert S., Grimme S. GFN2-xTB—An accurate and broadly parametrized self-consistent tight-binding quantum chemical method with multipole electrostatics and density-dependent dispersion contributions. *J. Chem. Theory Comput.*, 2019, **15** (3), 1652–1671. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b01176.
13. Schäfer A., Horn H., Ahlrichs R. Fully optimized contracted Gaussian basis sets for atoms Li to Kr. *J. Chem. Phys.*, 1992, **97**, 2571–2577. DOI: 10.1063/1.463096.
14. Chai J.-D., Head-Gordon M. Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2008, **10**, 6615–6620. DOI: 10.1039/B810189B.
15. 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*. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
16. Marenich A.V., Cramer C.J., Truhlar D.G. Universal solvation model based on solute electron density and on a continuum model of the solvent defined by the bulk dielectric constant and atomic surface tensions. *J. Phys. Chem. B*, 2009, **113** (18), 6378–6396. DOI: 10.1021/jp810292n.
17. Pettersen E.F., Goddard T.D., Huang C.C., Couch G.S., Greenblatt D.M., Meng E.C., Ferrin T.E. UCSF Chimera – A visualization system for exploratory research and analysis. *J. Comput. Chem.*, 2004, **25** (13), 1605–1612. DOI: 10.1002/jcc.20084.
18. Zhurko G.A. *Chemcraft – graphical program for visualization of quantum chemistry computations*. Version 1.8, build 648. Ivanovo, Russia, 2005. Available at: <https://chemcraftprog.com>
19. Al-Busaidi I.J., Ilmi R., Zhang D., Dutra J.D.L., Oliveira W.F., Al Rasbi N.K., Zhou L., Wong W.-Y., Raithby P.R., Khan M.S. Synthesis and photophysical properties of ternary β-diketonate europium(III) complexes incorporating bipyridine and its derivatives. *Dyes and Pigments*, 2022, **197**, 109879. DOI: 10.1016/j.dyepig.2021.109879.
20. Iwanaga H., Aiga F. Quantum yield and photoluminescence intensity enhancement effects of a diphosphine dioxide ligand on a 6-coordinate Eu(III)-β-diketonate complex with low luminescence. *ACS Omega*, 2021, **6** (1), 416–424. DOI: 10.1021/acsomega.0c04826.
21. Lima N.B.D., Gonçalves S.M.C., Júnior S.A., Simas A.M. A comprehensive strategy to boost the quantum yield of luminescence of europium complexes. *Sci. Rep.*, 2013, **3**, 2395. DOI: 10.1038/srep02395.
22. Lima N.B.D., Dutra J.D.L., Gonçalves S.M.C., Freire R.O., Simas A.M. Chemical partition of the radiative decay rate of luminescence of europium complexes. *Sci. Rep.*, 2016, **6**, 21204. DOI: 10.1038/srep21204.

23. Ilmi R., Zhang D., Dutra J.D.L., Dege N., Zhou L., Wong W.-Y., Raithby P.R., Khan M.S. A tris β -diketonate europium(III) complex based OLED fabricated by thermal evaporation method displaying efficient bright red emission. *Org. Electron.*, 2021, **96**, 106216. DOI: 10.1016/j.orgel.2021.106216.
24. Hasabeldaim E.H.H., Swart H.C., Kroon R.E. Luminescence and stability of Tb doped CaF₂ nanoparticles. *RSC Adv.*, 2023, **13**, 5353–5366. DOI: 10.1039/D2RA07897J.

Вклад авторов:

¹*Груздев М. С.* – разработка концепции научной работы, консультация по вопросам планирования, методологии и реализации исследования.

²*Ксенофонов А. А.* – проведение исследований, подготовка иллюстраций, написание и редактирование текста статьи.

³*Червонова У. В.* – проведение исследований, подготовка иллюстраций, написание и редактирование текста статьи.

⁴*Мозгова В. А.* – проведение исследований.

⁵*Догадаева С. А.* – проведение исследований.

Contribution of the authors:

¹*Gruzdev M. S.* – development of the concept of scientific work, consultation on planning, methodology and research implementation.

²*Ksenofontov A. A.* – conducting research, preparing illustrations, editing the text of the article.

³*Chervonova U. V.* – conducting research, preparing illustrations, editing the text of the article.

⁴*Mozgova V. A.* – conducting research.

⁵*Dogadaeva S. A.* – conducting research.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare no conflicts of interest.

¹<https://orcid.org/0000-0001-8408-0092>

²<https://orcid.org/0000-0001-8681-0335>

³<https://orcid.org/0000-0003-0649-4737>

⁴<https://orcid.org/0000-0001-9837-5529>

⁵<https://orcid.org/0000-0003-2415-9625>

Поступила 17.06.2025; одобрена 6.10.2025; принята 13.10.2025.

Received 17.06.2025; approved 6.10.2025; accepted 13.10.2025