

ФОТОЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ШЕСТИЧЛЕННЫХ ХЕЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ БОРА СО СВЯЗЯМИ В-О И В-N

Тихонов С.А., Вовна В.И.

*Дальневосточный федеральный университет, 690091, Владивосток, Суханова 8,
e-mail: allser@bk.ru*

Хелатные комплексы бора находят применение в лазерных и OLED-технологиях, оптической сенсорике, солнечных системах отопления, нелинейной оптике и полимерной инженерии. Это обусловлено широким спектром фотофизических свойств соединений данного класса¹. Подробное изучение электронной структуры хелатов бора открывает возможности для направленного синтеза новых комплексов с заданными спектральными характеристиками. Совместное применение методов фотоэлектронной спектроскопии и квантовой химии позволяет получать однозначные данные об электронной структуре химических соединений².

Ультрафиолетовые фотоэлектронные спектры паров 30 хелатов бора получены на модифицированном электронном спектрометре ЭС-3201 с монохроматическим источником излучения He(I)³⁻⁵. Рентгеновские фотоэлектронные спектры молекулярных кристаллов β-дикетонатов бора сняты на высоковакуумном фотоэлектронном спектрометре (Omicron) с источником излучения Mg-Kα^{4,6}. Фотоэлектронные спектры интерпретированы с использованием DFT аналога теоремы Купманса⁷.

В настоящей работе систематизированы данные о влиянии заместителей на электронную структуру 50 хелатных комплексов бора. Рассчитанные энергетические интервалы между электронными уровнями хорошо согласуются с данными фотоэлектронной спектроскопии. Это позволило успешно использовать полученные результаты для установления взаимосвязей «строение-свойство»⁵⁻⁶.

Литература

1. Tanaka K., Chujo Y. NPG Asia Materials, 2015, 7, e223.
2. Нефедов В.И., Вовна В.И. Электронная структура химических соединений. – М.: Наука, 1987. – 347 с.
3. Tikhonov S.A., Vovna V.I., Borisenko A.V. Journal of Molecular Structure, 2016, 1115, 1.
4. Тихонов С.А., Вовна В.И. Известия Академии наук. Серия химическая, 2018, 7, 1153.
5. Tikhonov S.A., Vovna V.I., L'vov I.B., Osmushko I.S., Borisenko A.V., Fedorenko E.V., Mirochnik A.G. Journal of Luminescence, 2018, 195, 79.
6. Tikhonov S.A., Vovna V.I., Osmushko I.S., Fedorenko E.V., Mirochnik A.G. Spectrochimica Acta, Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2018, 189, 563.
7. Osmushko I.S., Vovna V.I., Tikhonov S.A., Chizhov Y.V., Krauklis I.V. International Journal of Quantum Chemistry, 2016, 116, 325.