

Sergey A. Tikhonov^{a,*}, Ilya S. Samoilov^b

^aRussian Federation Russian Federation Russian Federation Russian Federation

^bSaint-Petersburg State University, Department of Photonics, St. Petersburg 199034, Russian Federation

ARTICLE INFO

Keywords:

Electronic structure
Photoelectron spectroscopy
UPS
Density functional theory
Outer-valence Green's function
(OVGF) method

Аннотация

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

1. Introduction

β -Дикетоны, их тио- и имино-аналоги [1, 2, 3] используются как прекурсоры при синтезе хелатных комплексов p-, d- и f-элементов [4], которые обладают важными потребительскими свойствами и находят применение в качестве материалов для нужд фотоники [5, 6], сенсорики [7], лазерной техники, биомедицины [8, 9, 10, 11, 12, 13], полимерной инженерии [14] и солнечной энергетики [15].

Понимание взаимосвязей «строение-свойство» даёт возможность осуществлять направленный синтез материалов с заранее заданными физическими свойствами. Выявление корреляций между электронной структурой валентных уровней и физическими характеристиками материала, с использованием современных методов квантовохимического моделирования, позволяет улучшить понимание взаимосвязей «строение-свойство». Поэтому подбор оптимального метода расчёта электронной структуры β -дикетонов и их производных является актуальной задачей.

Наиболее популярным расчётным методом является метод теории функционала плотности (ТФП), однако, ввиду допущений лежащих в основе метода, интерпретация расчётных данных и сопоставление их с экспериментальными результатами бывает затруднено. Подбор оптимального функционала позволяет нивелировать недостатки расчётного метода и получить качественные результаты сопоставимые с более точными и тяжёлыми методами, например методом функций Грина.

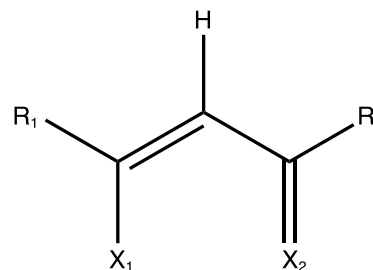


Рис. 1: Schematic representation of the studied complexes.

Compound	X ₁	X ₂	R ₁	R ₂
I	H	O	H	H
II	H	O	CH ₃	CH ₃
III	NH ₂	O	CH ₃	CH ₃
IV	NHCH ₃	O	CH ₃	CH ₃
V	SCH ₃	O	CH ₃	CH ₃
VI	SH	O	CH ₃	CH ₃
VII	OH	S	CH ₃	CH ₃
VIII	CF ₃	CH ₃	OH	O
IX	CF ₃	CF ₃	OH	O
X	OH	O	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅

Таблица 1: Исследованные соединения

orcid(s):

- 2. Experimental and theoretical methods
- 3. Result and discussion
- 3.1. First subsection
- 3.2. Second subsection
- 3.3. Third subsection
- 4. Summary

Credit authorship contribution statement

Declaration of competing interests

Acknowledgements

Appendix A. Supplementary data

Список литературы

- [1] E. McAlduff, D. Bunbury, Photoelectron spectra of some aromatic mono- and di-ketones, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 17 (1979) 81–89.
- [2] S. Evans, A. Hamnett, A. Orchard, D. Lloyd, Study of the metal-oxygen bond in simple tris-chelate complexes by (i) photoelectron spectroscopy, *Faraday Discussions of the Chemical Society* 54 (1972) 227–250.
- [3] F. S. Joergensen, L. Carlsen, F. Duus, The electronic structure of β -thioxoketones. a photoelectron spectroscopic study of the enol-enethiol tautomerism of thioacetylacetone and related compounds, *Journal of the American Chemical Society* 103 (1981) 1350–1353.
- [4] M. A. Lutoshkin, A. I. Petrov, Y. N. Malyar, A. S. Kazachenko, Interaction of rare-earth metals and some perfluorinated β -diketones, *Inorganic Chemistry* (2021).
- [5] N. Zolotareva, V. V. Semenov, β -diketones and their derivatives in sol-gel processes, *Russian Chemical Reviews* 82 (2013) 964.
- [6] H. Sasabe, K. Sasaki, M. Mamiya, Y. Suwa, T. Watanabe, N. Onuma, K. Nakao, M. Yamaji, J. Kido, Unique solid-state emission behavior of aromatic difluoroboronated β -diketones as an emitter in organic light-emitting devices, *Chemistry—An Asian Journal* 12 (2017) 2299–2303.
- [7] L. D. Lavis, R. T. Raines, Bright building blocks for chemical biology, *ACS chemical biology* 9 (2014) 855–866.
- [8] F. Wang, D. Song, D. A. Dickie, C. L. Fraser, Multi-stimuli responsive luminescent β -diketones and difluoroboron complexes with heterocyclic substituents, *Journal of Fluorescence* 31 (2021) 39–49.
- [9] L. D. Lavis, R. T. Raines, Bright ideas for chemical biology, *ACS chemical biology* 3 (2008) 142–155.
- [10] A. S. Klymchenko, Solvatochromic and fluorogenic dyes as environment-sensitive probes: design and biological applications, *Accounts of chemical research* 50 (2017) 366–375.
- [11] Z. R. Grabowski, K. Rotkiewicz, W. Rettig, Structural changes accompanying intramolecular electron transfer: focus on twisted intramolecular charge-transfer states and structures, *Chemical reviews* 103 (2003) 3899–4032.
- [12] O. A. Kucherak, S. Oncul, Z. Darwich, D. A. Yushchenko, Y. Arntz, P. Didier, Y. Mély, A. S. Klymchenko, Switchable Nile red-based probe for cholesterol and lipid order at the outer leaflet of biomembranes, *Journal of the American Chemical Society* 132 (2010) 4907–4916.
- [13] A. S. Klymchenko, R. Kreder, Fluorescent probes for lipid rafts: from model membranes to living cells, *Chemistry & biology* 21 (2014) 97–113.
- [14] P. Chen, J. Shi, Y. Zhang, K. Wang, J. Nie, Eva film doped with β -diketones macromolecular lanthanide complexes:

preparation, characterization and application, *European polymer journal* 58 (2014) 191–200.

- [15] G. F. de Sá, S. Alves Jr, B. J. da Silva, E. F. da Silva Jr, A novel fluorinated eu (iii) β -diketone complex as thin film for optical device applications, *Optical Materials* 11 (1998) 23–28.