

The first example of *ab initio* calculations of f—f transitions for the case of [Eu(DOTP)]⁵⁻ complex - experiment *versus* theory.

Autorzy

Rafał Janicki

Andrzej Kędziorski

Anna Mondry

Rok wydania

2016

CzasopismoPhysical Chemistry Chemical
PhysicsNumer woluminu

18

Strony

27808-27817

DOI

10.1039/C6CP05284C

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Crystal structures and photophysical properties (IR and UV-vis-NIR) of two compounds, [C(NH₂)₃]₅[Eu(DOTP)]·12.5H₂O and K₅[Eu(DOTP)]·11H₂O (DOTP = 1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1,4,7,10-tetrakis (methylenephosphonic acid)), were determined. The DOTP ligand is bonded to Eu³⁺ via four O and four N atoms, filling thus eight coordination sites of Eu³⁺. The experimental structures of two [K₄Eu(DOTP)]⁻ clusters were used as a starting point for theoretical *ab initio* calculations based on a multireference wavefunction approach. Positions of the energy levels of the 4f⁶ configuration of the Eu³⁺ ion have been calculated and compared with those derived from the experimental spectra. This enabled us to tentatively assign energy levels of the Eu³⁺ ion. The relationship between calculated energies of excited states and Eu–N and Eu–O bond lengths was discussed with respect to the nephelauxetic effect.

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>Adres publiczny[http://dx.doi.org/ 10.1039/C6CP05284C](http://dx.doi.org/10.1039/C6CP05284C)Strona internetowa wydawcy<https://www.rsc.org/>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-24 08:55:02

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/26pOkXB>.