

УДК 535.37+541.65+543.4

Д.В. Кленицкий, доц., канд. физ.-мат. наук;

Н.Н. Крук, зав. кафедрой физики, д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

АНАЛИЗ НЕПЛОСКОСТНЫХ ИСКАЖЕНИЙ МАКРОЦИКЛА СВОБОДНОГО ОСНОВАНИЯ КОРРОЛА

Корролы представляют собой класс тетрапиррольных соединений с сокращенным макроциклом, что обусловлено отсутствием одного из четырех атомов углерода в *мезо*-положении, поэтому два пиррольных фрагмента соединены С-С связью и отличаются наличием трех протонов в ядре тетрапиррольного макроцикла вместо двух у порфиринов. В результате, свободные основания корролов обладают пониженной симметрией (C_s) по сравнению со свободными основаниями порфиринов (D_{2h}), так что два NH таутомера обладают различными молекулярной геометрией и электронными свойствами. Обширные новые результаты по спектральным свойствам и фотофизическим характеристикам NH таутомеров корролов доложены нами за последнее время.

В настоящей работе нами изучен характер неплоскостных искажений тетрапиррольного макроцикла двух NH таутомеров коррола. Все предыдущие подходы к анализу молекулярной конформации корролов имеют существенные ограничения, поскольку при определении средней плоскости макроцикла не учитывалась свойственная макроциклу коррола асимметрия и возможность NH таутомеризации. Благодаря асимметрии, не все атомы эквивалентны по их значению для определения средней плоскости. Средняя плоскость макроцикла должна оставаться инвариантной также и при NH таутомеризации. Плоскость τ_C , определяемая как плоскость с минимальными среднеквадратичными отклонениями атомов C1, C4, C5, C6, C9, C16, и C19, удовлетворяет этому требованию. Анализ характера среднеквадратичных отклонений от средней плоскости макроцикла τ_C , выполненный для оптимизированной квантово-химическим методами молекулярной структуры двух NH таутомеров коррола, показал, что оба таутомера обладают выраженной волнообразной конформацией, причем ось симметрии проходит через два противоположных пиррольных кольца. Ось симметрии сохраняет свое направление, а амплитуда отклонений от средней плоскости макроцикла существенно различается для двух NH таутомеров.