

Н. Н. Крук, зав. кафедрой физики, д-р физ.-мат. наук;
Д. В. Кленицкий, доц., канд. физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

ВЗАИМОСВЯЗЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ КОНФОРМАЦИИ И ФОТОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОРРОЛОВ

Выполнен сравнительный анализ структуры тетрапиррольного макроцикла свободных оснований корролов, различающихся типом периферического замещения. Установлено, что три- и тетразамещенные производные корролов обнаруживают неплоскостные искажения макроцикла волнообразного типа, а ундеказамещенное (по *мезо*-положениям и всем пиррольным кольцам) производное характеризуется седлообразно искаженным макроциклом. Величина неплоскостных искажений макроцикла корролов определена с использованием параметра $\Delta 23$, представляющего собой среднеквадратичное отклонение одного макроциклического атома от средней плоскости макроцикла 7С.

В то время как три- и тетразамещенные производные корролов с арильными заместителями в *мезо*-положениях обнаруживают близкие значения параметра $\Delta 23$ в диапазоне от 0,200 до 0,215 Å, ундеказамещение макроцикла индуцирует существенное увеличение амплитуды отклонений атомов от средней плоскости макроцикла ($\Delta 23 = 0,503$ Å). Сильное стерическое взаимодействие между периферическими заместителями приводит к тому, что плоскости пиррольных колец *A*, *B* и *C* имеют существенный наклон относительно средней плоскости макроцикла 7С.

Данные различия указывают на то, что тетрапиррольный макроцикл свободных оснований корролов в отсутствие стерических взаимодействий с периферическими заместителями имеет волнообразную конформацию, которая сохраняется при слабых стерических взаимодействиях. При введении в пиррольные кольца восьми объемных заместителей в результате усиления стерических взаимодействий происходит конформационный переход от волнообразного к седлообразному конформеру. Установлено, что величина энергетического зазора между нижними возбужденными синглетным и триплетным состояниями пропорциональна значению параметра $\Delta 23$.