

ФИЗИКА PHYSICS

УДК 535.37+541.65+543.4

А. Ю. Шакель¹, А. М. Сохибова¹, Д. В. Петрова^{2,3}, А. С. Семейкин³, Н. Н. Крук¹

¹Белорусский государственный технологический университет

²Институт физики микроструктур РАН (г. Нижний Новгород, Россия)

³Ивановский государственный химико-технологический университет (г. Иваново, Россия)

ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЯ И ПЕРИФЕРИЧЕСКОГО ЗАМЕЩЕНИЯ НА СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СВОБОДНЫХ ОСНОВАНИЙ И ПРОТОНИРОВАННЫХ ФОРМ КОРРОЛОВ

Методами абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии изучены спектрально-люминесцентные характеристики свободных оснований и протонированных форм двух корролов, замещенных в C_b -положениях макроцикла алкильными группами. Исследованные соединения различаются архитектурой периферического замещения, которая позволяет управлять размерами ядра макроцикла посредством изменения длины связи C_1-C_{19} в дипиррольном фрагменте. Изучена роль природы растворителя в формировании спектрально-люминесцентных характеристик. Установлено, что свободные основания корролов обнаруживают слабую сольватохромную зависимость, обусловленную универсальными взаимодействиями при сольватации. Обнаружено, что квантовый выход флуоресценции в апротонных растворителях выше, чем в протонном растворителе этаноле. При этом величина сдвига Стокса не изменяется, что указывает на отсутствие существенных различий в конформационной релаксации макроцикла при заселении S_1 -состояния. Явление объяснено смещением NH -таутомерного равновесия. При образовании протонированной формы наблюдается гипсохромный сдвиг полос поглощения в видимой области спектра и батохромный сдвиг полосы $Sore$, в отличие от корролов, замещенных арильными группами в C_m -положениях макроцикла, которые характеризуются существенными батохромными сдвигами всех полос поглощения при протонировании. Показано, что величина квантового выхода флуоресценции протонированной формы уменьшается, причем величина изменения зависит от архитектуры замещения. У коррола с большей длиной связи C_1-C_{19} наблюдается падение в 4–5 раз, в то время как у коррола с меньшей длиной связи C_1-C_{19} наблюдается только двукратное уменьшение. Различие предложено объяснить тем, что относительное увеличение вероятностей безызлучательных каналов дезактивации S_1 -состояния, вызванное ростом неплоскостных искажений при протонировании, в последнем случае меньше.

Ключевые слова: коррол, периферическое замещение, протонирование, флуоресценция.

Для цитирования: Шакель А. Ю., Сохибова А. М., Петрова Д. В., Семейкин А. С., Крук Н. Н. Влияние растворителя и периферического замещения на спектрально-люминесцентные характеристики свободных оснований и протонированных форм корролов // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 2 (260). С. 36–42.

A. Yu. Shakel¹, A. M. Sokhibova¹, D. V. Petrova^{2,3}, A. S. Semeikin³, M. M. Kruk¹

¹Belarusian State Technological University

²Institute of Physics of Microstructures of RAS (Nizhny Novgorod, Russia)

³Ivanovo State University of Chemistry and Technology (Ivanovo, Russia)

INFLUENCE OF SOLVENT AND PERIPHERAL SUBSTITUTION ON THE SPECTRAL- LUMINESCENT CHARACTERISTICS OF THE FREE BASE CORROLES AND THEIR PROTONATED FORMS

Absorption and fluorescence spectroscopies were used to study the spectral and luminescent characteristics of free bases and protonated forms of two corroles substituted in the C_b -positions of the macrocycle by alkyl groups. The studied compounds differ in the architecture of peripheral substitution,

which allows to control the size of the macrocycle core by changing the C₁–C₁₉ bond length in the dipyrrole fragment. The role of the nature of the solvent in the formation of spectral-luminescent characteristics has been studied. It has been established that the free bases of corroles exhibit weak solvatochromic dependence due to universal interactions during solvation. It was found that the quantum yield of fluorescence in aprotic solvents is higher than in the protic solvent ethanol. In this case the value of the Stokes shift does not change, which indicates the absence of significant differences in the conformational relaxation of the macrocycle upon the S₁ state population. The phenomenon is explained by a shift in the NH-tautomeric equilibrium. When the protonated form is formed in the solution, a hypsochromic shift of the absorption bands in the visible region of the spectrum and a bathochromic shift of the Soret band are observed, in contrast to the corroles substituted by aryl groups in the C_m-positions of the macrocycle, which are characterized by significant bathochromic shifts of all the absorption bands upon protonation. It is shown that the fluorescence quantum yield of the protonated form decreases, and the magnitude of the change depend on the substitution architecture. A corrole with a longer C₁–C₁₉ bond has a 4–5-fold decrease, while a corrole with a shorter C₁–C₁₉ bond has only a twofold decrease. It is proposed to explain the difference by the fact that the relative increase in the probabilities of non-radiative channels of deactivation of the S₁ state, caused by the growth of out-of-plane distortions during protonation, is smaller in the latter case.

Key words: corrole, peripheral substitution, protonation, fluorescence.

For citation: Shakel A. Yu., Sokhibova A. M., Petrova D. V., Semeikin A. S., Kruk M. M. Influence of solvent and peripheral substitution on the spectral-luminescent characteristics of the free base corroles and their protonated forms. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2022, no. 2 (260), pp. 36–42 (In Russian).

Введение. Сокращенный макроцикл свободных оснований корролов содержит три пиррольных кольца и одно пирролениновое, поэтому он, как и макроцикл свободных оснований порфиринов, является амфотерным – в реакциях кислотных взаимодействий может происходить либо присоединение, либо диссоциация протона(ов). Однако характер кислотных взаимодействий в корролах и порфиринах отличается из-за того, что в первом случае свободное основание содержит три протона и макроцикл имеет существенные неплоскостные искажения волнообразного типа [1, 2], а в последнем случае макроцикл содержит два протона и, при отсутствии стерических возмущений на периферии, является плоским. Это приводит к тому, что как кислотность, так и основность для данных двух типов тетрапиррольных макроциклов существенно различаются. Если для порфиринов более характерными являются основные свойства – присоединение протонов (одного либо двух), а диссоциация пиррольных протонов наблюдалась для ограниченного количества соединений в растворах с большой концентрацией оснований либо «протонных губок» [3, 4], то для свободных оснований корролов, напротив, кислотные свойства являются доминирующими. Диссоциация протона с образованием монодепротонированной формы происходит даже при растворении корролов в чистых полярных апротонных растворителях [5]. Монопротонированная форма легко образуется при добавлении в раствор свобод-

ного основания органических и неорганических кислот [5, 6].

Следует отметить, что кислотно-основные равновесия в свободных основаниях корролом дополнительно усложняются из-за того, что свободные основания корролов существуют в растворах в виде двух NH-таутомеров [1, 2, 5, 7]. Строго говоря, равновесие устанавливается не между молекулами свободного основания коррола и его протонированной (либо депротонированной) формы, а между системой находящихся в равновесии двух NH-таутомеров, с одной стороны, и протонированной (либо депротонированной) формой – с другой (рис. 1).

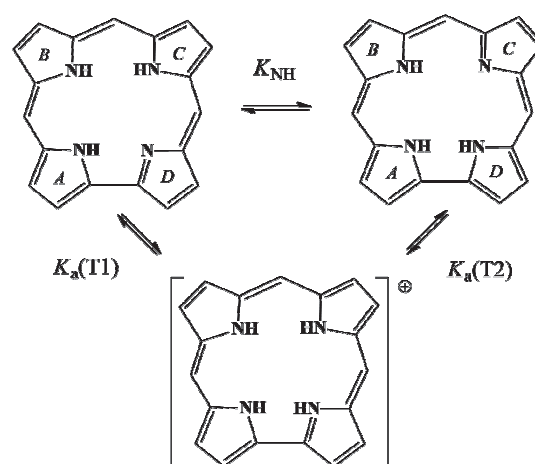


Рис. 1. Схема кислотно-основных равновесий в растворе между равновесной системой двух NH-таутомеров и протонированной формой коррола

В зависимости от соотношения трех констант, указанных на рис. 1, протонирование может происходить посредством присоединения протонов к каждому из NH-таутомеров либо к одному из них, который протонируется с большей скоростью [7].

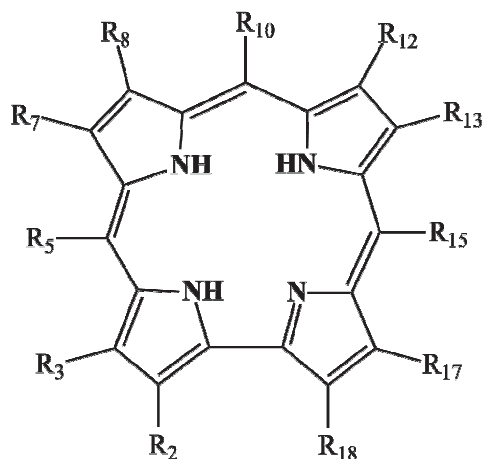
Для объяснения существенных отличий в кислотно-основных свойствах макроцикла коррола и порфирина было предложено [6, 8], что поскольку основные структурные изменения при присоединении протона, требующие значительных энергетических затрат, происходят на стадиях свободное основание порфирина – монопротонированная форма и монодепротонированная форма – свободное основание коррола, то необходимо игнорировать формальный заряд макроцикла и сопоставлять молекулы с одинаковым числом пиррольных NH-протонов. Тогда свободное основание коррола будет соответствовать монопротонированной форме порфирина, протонированная форма коррола – дважды протонированной форме порфирина, а монодепротонированная форма коррола – свободному основанию порфирина. В этом случае становится понятным, почему диапазон концентраций протонов (диапазон pH), в котором стабилизируются свободные основания корролов, очень узок. Он сопоставим с таковым для монопротонированной формы порфиринов, которая стабилизируется в достаточно узком диапазоне pH [9]. Поэтому конформационные изменения, требующиеся для присоединения протона к свободному основанию коррола, не требуют больших затрат энергии, а диссоциация протона вообще сопровождается высвобождением значительного количества энергии, что ведет к необычно высокой кислотности макроцикла корролов.

Ранее нами было показано, что молекулярная конформация макроцикла свободных оснований корролов существенно зависит от архитектуры замещения и типа периферических заместителей [10, 11]. Показано, что длина связи C_1-C_{19} в дипиррольном фрагменте отражает баланс непланарных и планарных структурных изменений в макроцикле [12]. Предложено, что основность свободных оснований корролов, которая связывается с выходом протонируемого кольца из плоскости макроцикла, можно контролировать путем модуляции длины связи C_1-C_{19} [12, 13].

В качестве объектов исследования в настоящей работе выбраны два коррола с различной локализацией стерических взаимодействий на периферии макроцикла, которая обуславливает различную длину связи C_1-C_{19} в дипиррольном фрагменте (рис. 2). У соединения 1

восемь алкильных заместителей присоединены к C_b -положениям всех четырех пиррольных колец, а у соединения 2 четыре алкильные группы расположены в C_b -положениях 7, 8, 12, 13 двух пиррольных колец дипиррометенового фрагмента. Согласно результатам квантово-химических расчетов, выполненных методом функционала плотности, длина связи C_1-C_{19} равна 1,436 и 1,429 Å соответственно для таутомеров T1 и T2 коррола 1 и 1,431 и 1,425 Å соответственно для таутомеров T1 и T2 коррола 2 [14].

В работе нами измерены спектры поглощения и флуоресценции свободных оснований и протонированных форм данных соединений в органических растворителях различного типа: неполярном апротонном (дихлорметан), полярных апротонных (ацетон, ацетонитрил, диметилформамид) и полярном протонном (этанол), а также квантовые выходы флуоресценции Φ_{fl} и сдвиги Стокса. Проанализированы закономерности изменений спектрально-люминесцентных и фотофизических характеристик и их взаимосвязь с архитектурой периферического замещения.



- 1 – $R_8 = R_{12} = n$ -бутил
 $R_2 = R_3 = R_7 = R_{13} = R_{17} = R_{18} =$ метил
 $R_5 = R_{10} = R_{15} = H$
 2 – $R_8 = R_{12} = n$ -бутил
 $R_7 = R_{13} =$ метил
 $R_2 = R_3 = R_5 = R_{10} = R_{15} = R_{17} = R_{18} = H$

Рис. 2. Молекулярная структура свободных оснований (показан таутомер T1) исследованных корролов. Заместители в макроцикле обозначены согласно нумерации атомов по номенклатуре IUPAC

Основная часть. Спектры поглощения и флуоресценции свободных оснований корролов 1 и 2 в различных растворителях сохраняют те же характерные черты, которые были доложены для раствора в дихлорметане [14].

В серии растворов коррола **1** в органических растворителях следует отметить слабые спектральные сдвиги (табл. 1), по нашему мнению, обусловленные универсальными взаимодействиями при сольватации. В спектрах поглощения доминируют полосы, принадлежащие коротковолновому таутомеру Т2. Присутствие в растворе длинноволнового таутомера Т1 проявляется в виде длинноволнового плеча полосы Core. В то же время в спектрах флуоресценции таутомер Т1 виден отчетливо.

Анализ данных, приведенных в табл. 1, показывает, что квантовый выход флуоресценции $\Phi_{\text{фл}}$ свободного основания **1** обнаруживает тенденцию к уменьшению при переходе от апротонных растворителей к этанолу. Отсутствие существенных изменений величины сдвига Стокса $\Delta\lambda_{\text{СТ}}$ не дает оснований объяснить эти изменения конформационными перестройками в нижнем возбужденном синглетном S_1 состоянии. В то же время в спектре флуоресценции наблюдаются изменения относительных интенсивностей полос, принадлежащих таутомерам Т1 и Т2 (табл. 1). Увеличение относительного вклада флуоресценции таутомера Т1 в суммарный спектр флуоресценции коррола **1** сопровождается падением квантового выхода флуо-

ресценции. Очевидно, что индивидуальный квантовый выход флуоресценции $\Phi_{\text{фл}}$ таутомера Т1 меньше, чем у таутомера Т2. Поэтому перераспределение концентраций таутомеров в S_1 -состоянии приводит к наблюдаемым изменениям величины $\Phi_{\text{фл}}$. Можно предположить, что высота энергетического барьера для NH-таутомеризации в S_1 состоянии модулируется сольватной оболочкой молекулы коррола. В протонном растворителе этаноле высота барьера NH-таутомеризации уменьшается, а в апротонных растворителях, напротив, увеличивается. Нельзя исключить, что молекулы этанола непосредственно вовлечены в процесс переноса протона в ядре тетрапиррольного макроцикла. Однако этот вопрос требует дальнейшего изучения.

Образование протонированной формы корролов **1** и **2** сопровождается гипсохромным сдвигом полос в видимой области спектра (табл. 2), в отличие от протонированной формы корролов, замещенных в S_m -положениях макроцикла, которые обнаруживают значительный bathochromный сдвиг Q-полос. Влияние архитектуры периферического замещения на формирование спектра поглощения протонированной формы корролов аналогично тому, которое известно для порфиринов с такой же архитектурой периферического замещения [9].

Таблица 1

Спектрально-люминесцентные и фотофизические характеристики свободных оснований корролов **1** и **2**

Соединение / растворитель	$\lambda_{\text{погл}}^{\text{макс}}$, нм				$\lambda_{\text{фл}}^{\text{макс}}$, нм		$\Delta\lambda_{\text{СТ}}$, см ⁻¹		$\Phi_{\text{фл}} \cdot 10^2$
	Core		Q _x (0,0)		Q _x (0,0)				
	T1	T2	T1	T2	T1	T2	T1	T2	
1 / ацетон	407	394	–	593	620	598	–	141	15,3
1 / ацетонитрил	406	393	–	592	616	597	–	142	12,0
1 / диметилформамид	410	398	–	593	617	598	–	141	14,2
1 / дихлорметан	407	395	–	593	614	598,5	–	155	14,0
1 / этанол	406	395	–	591,5	614	597	–	156	8,3
2 / этанол	400	387	605	583	611	590,5	162	218	5,9

Таблица 2

Спектрально-люминесцентные и фотофизические характеристики протонированной формы корролов **1** и **2**

Соединение / растворитель	$\lambda_{\text{погл}}^{\text{макс}}$, нм		$\lambda_{\text{фл}}^{\text{макс}}$, нм	$\Delta\lambda_{\text{СТ}}$, см ⁻¹	$\Phi_{\text{фл}} \cdot 10^2$
	Core	Q _x (0,0)	Q _x (0,0)		
1 / ацетон	409	599	620	565	3,1
1 / ацетонитрил	408	597,5	618	555	2,7
1 / диметилформамид	412	604	623	505	3,6
1 / дихлорметан	408	593	623	812	4,3
1 / этанол	410	602	619,5	469	3,5
2 / этанол	404	596,5	614,5	491	2,8

Очевидно, что это является результатом инверсии расположения двух верхних заполненных молекулярных орбиталей ВЗМО и ВЗМО-1. В производных, замещенных в C_b -положениях макроцикла, ВЗМО является a_{1u} -подобной, а ВЗМО-1 – a_{2u} -подобной, а при C_m -замещении, напротив, ВЗМО является a_{2u} -подобной, а ВЗМО-1 – a_{1u} -подобной [14].

Величина квантового выхода флуоресценции при образовании протонированной формы корролов **1** и **2** уменьшается. При этом квантовые выходы флуоресценции протонированной формы коррола **1** в различных растворителях различаются незначительно, что указывает на отсутствие специфических эффектов сольватации. Сопоставление квантовых выходов флуоресценции $\Phi_{\text{фл}}$ для корролов **1** и **2** позволяет заключить, что изменение величины $\Phi_{\text{фл}}$ коррелирует с характером периферического замещения. У коррола **1**, для которого длина связи C_1-C_{19} больше, наблюдается падение величины $\Phi_{\text{фл}}$ в 4–5 раз, в то время как у коррола **2** с меньшей длиной связи C_1-C_{19} наблюдается только двукратное уменьшение величины $\Phi_{\text{фл}}$. Квантовые выходы свободных оснований также различаются: величины $\Phi_{\text{фл}}$ равны 0,083 и 0,059 соответственно для корролов **1** и **2**. По-видимому, это вызвано большим вкладом безызлучательных процессов в дезактивацию S_1 -состояния коррола **2**. Поэтому при образовании протонированной формы относительное увеличение вероятностей безызлучательных каналов дезактивации S_1 -состояния, вызванное ростом неплоскостных искажений при протонировании, в случае коррола **2** меньше.

Заключение. Таким образом, нами изучены спектрально-люминесцентные и фотофизические характеристики свободных оснований и протонированных форм двух C_b -алкилированных корролов, различающихся архитектурой периферического замещения, которая определяет размеры ядра макроцикла посредством стерических взаимодействий периферических заместителей. Для свободного основания коррола **1** обнаружен слабый неспецифический сольватохромный эффект. Обнаружено, что квантовый выход флуоресценции в апротонных растворителях выше, чем в протонном растворителе этаноле, что обусловлено влиянием растворителя на высоту энергетического барьера NH-таутомеризации в S_1 -состоянии, которое в результате приводит к смещению NH-таутомерного равновесия в сторону таутомера T1. Охарактеризованы сдвиги полос поглощения при образовании протонированной формы. Сопоставление с картиной спектральных сдвигов, наблюдающихся для C_m -замещенных корролов, подтверждает сделанный ранее вывод о зависимости взаимного расположения двух верхних заполненных молекулярных орбиталей от архитектуры периферического замещения. Величина квантового выхода флуоресценции протонированной формы уменьшается, у коррола **1** наблюдается падение в 4–5 раз, а у коррола **2** наблюдается уменьшение в 2 раза. Предложено, что отличия обусловлены различным вкладом безызлучательных каналов, вызванных ростом неплоскостных искажений при протонировании макроцикла, в дезактивацию S_1 -состояния.

Список литературы

1. Molecular Structures and Absorption Spectra Assignment of Corrole NH Tautomers / W. J. D. Beenken [et al.] // J. Phys. Chem., A. 2014. Vol. 118, no. 5. P. 862–871.
2. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Molecular structure and conformation of free base corroles // Macroheterocycles. 2019. Vol. 12, no. 1. P. 58–67.
3. Андрианов В. Г., Малкова О. В., Березин Д. Б. Кислотно-основные свойства порфиринов // Успехи химии порфиринов: в 5 т. / под ред. О. А. Голубчикова. СПб., 2001. Т. 3. С. 107–129.
4. Электронные и стерические эффекты заместителей как способ управления свойствами тетрапиррольных макроциклов / С. Г. Пуховская [и др.] // Функциональные материалы на основе тетрапиррольных макрогетероциклических соединений / под ред. О. И. Койфмана. М., 2019. С. 63–101.
5. Solvent-Dependent Deprotonation of meso-Pyrimidinylcorroles: Absorption and Fluorescence Studies / M. M. Kruk [et al.] // Journal of Physical Chemistry, A. 2012. Vol. 116, no. 44. P. 10704–10711.
6. How acidic corroles and why? / A. Mahammed [et al.] // Tetrahedr. Lett. 2003. Vol. 44. P. 2077–2079.
7. Corrole NH Tautomers: Spectral Features and Individual Protonation / Yu. B. Ivanova [et al.] // Journal of Physical Chemistry, A. 2012. Vol. 116, no. 44. P. 10683–10694.
8. Quantum chemical insights into the dependence of porphyrin basicity on the meso-aryl substituents: thermodynamics, buckling, reaction sites and molecular flexibility / M. Presselt [et al.] // Phys. Chem. Chem. Phys. 2015. Vol. 17, no. 21. P. 14096–14106.
9. Kruk M. M., Starukhin A. S., Maes W. Influence of macrocycle protonation on the photophysical properties of porphyrins // Macroheterocycles. 2011. Vol. 4, no. 2. P. 69–79.

10. Крук Н. Н., Кленицкий Д. В., Маес В. Квантово-химическое исследование молекулярной структуры алкилированных корролов // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2018. № 1. С. 36–42.

11. Влияние молекулярной структуры на энергию нижних возбужденных электронных синглетных и триплетных состояний свободных оснований корролов / Н. Н. Крук [и др.] // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2019. № 1. С. 20–26.

12. Крук Н. Н., Кленицкий Д. В., Маес В. Исследование структурных факторов, определяющих основность алкилированных производных свободного основания коррола // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2020. № 1. С. 32–47.

13. Влияние асимметрии макроцикла на молекулярную структуру NH-таутомеров производных свободного снования коррола / Н. Н. Крук [и др.] // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2022. № 1. С. 38–43.

14. Спектрально-люминесцентные свойства и NH-таутомерия свободных оснований алкилированных производных корролов / Ю. Х. Ажиб [и др.] // Журн. прикл. спектр. 2020. Т. 87, № 3. С. 377–385.

References

1. Beenken W. J. D., Presselt M., Ngo T. H., Dehaen W., Maes W., Kruk M. M. Molecular Structures and Absorption Spectra Assignment of Corrole NH Tautomers. *J. Phys. Chem., A*, 2014, vol. 118, no. 5, pp. 862–871.

2. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Molecular structure and conformation of free base corroles. *Macroheterocycles*, 2019, vol. 12, no. 1, pp. 58–67.

3. Andrianov V. G., Malkova O. V., Berezin D. B. Acid-base properties of porphyrins. *Uspekhi khimii porfirinov* [Advances in Porphyrin Chemistry]. Ed. by O. A. Golubchikov. St. Petersburg, 2001, vol. 3, pp. 107–129 (In Russian)

4. Pukhovskaya S. G., Ivanova Yu. B., Kruk M. M., Golubchikov O. A., Koifman O. I., Electronic and steric effects of substituents as a tool to control the properties of tetrapyrrolic macrocycles. *Funktsional'nyye materialy na osnove tetrapirrol'nykh makrogeterotsiklicheskih soyedineniy* [Functional materials based on tetrapyrrole macroheterocyclic compounds]. Ed. by O. I. Koifman. M., 2019. pp. 63–101 (In Russian)

5. Kruk M. M., Ngo T. H., Savva V. A., Starukhin A. S., Dehaen W., Maes W. Solvent-Dependent Deprotonation of meso-Pyrimidinylcorroles: Absorption and Fluorescence Studies. *J. Phys. Chem., A*, 2012, vol. 116, no. 44, pp. 10704–10711.

6. Mahammed A., Weaver J. J., Gray G.B., Abdelas M., Gross Z. How acidic corroles and why? *Tetrahedr. Lett.*, 2003, vol. 44, pp. 2077–2079.

7. Ivanova Yu. B., Savva V. A., Mamardashvili N. Zh., Starukhin A. S., Ngo T. H., Dehaen W., Maes W., Kruk M. M. Corrole NH Tautomers: Spectral Features and Individual Protonation. *J. Phys. Chem., A*, 2012, vol. 116, no. 44, pp. 10683–10694.

8. Presselt M., Dehaen W., Maes W., Klamt A., Martinez T. J., Beenken W. J. D., Kruk M. M. Quantum chemical insights into the dependence of porphyrin basicity on the meso-aryl substituents: thermodynamics, buckling, reaction sites and molecular flexibility. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2015, vol. 17, no. 21, pp. 14096–14106.

9. Kruk M. M., Starukhin A. S., Maes W. Influence of macrocycle protonation on the photophysical properties of porphyrins. *Macroheterocycles*, 2011, vol. 4, no. 2. pp. 69–79.

10. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Quantum-chemical study of the molecular structure of alkylated corroles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2018, no. 1, pp. 36–42 (In Russian).

11. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Gladkov L. L., Maes W. Influence of molecular structure on the energy of the lowest excited singlet and triplet states of the free base corroles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2019, no. 1, pp. 20–26 (In Russian).

12. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Study of structural factor determinative for basicity of the alkylated derivatives of the free base corroles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2020, no. 1, pp. 32–47 (In Russian).

13. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Gladkov L. L., Maes W. Macrocycle asymmetry influence on the molecular structure of NH-tautomers of the free base corrole derivatives. / *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2022, no. 1, pp. 38–43 (In Russian).

14. Ajeeb Y. H., Klenitsky D. V., Vershilovskaya I. V., Petrova D. V., Semeikin A. S., Maes W., Gladkov L. L., Kruk M. M. Spectral-luminescent properties and NH-tautomerizam of the alkylated corrole derivatives. / *Zhurnal prikladnoy Spektroskopii* [Journal Applied Spectroscopy], 2020, vol. 87, no. 3, pp. 377–385 (In Russian).

Информация об авторах

Шакель Антон Юрьевич – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: a.shakel@mail.ru

Сохибова Анархан Мухфизуллоқызы – студентка. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: anarhan.soxibova@bk.ru

Петрова Дарья Вадимовна – кандидат химических наук, научный сотрудник. Институт физики микроструктур РАН (603087, г. Нижний Новгород, ул. Академическая, 7, Российская Федерация); Ивановский государственный химико-технологический университет (153000, г. Иваново, пр-т Шереметевский, 7, Российская Федерация). E-mail: dar.isuct@yandex.ru

Семейкин Александр Станиславович – доктор химических наук, профессор. Ивановский государственный химико-технологический университет (153000, г. Иваново, пр-т Шереметевский, 7, Российская Федерация). E-mail: semeikin@isuct.ru

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by

Information about the authors

Shakel Anton Yur'evich – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: a.shakel@mail.ru

Sokhibova Anarkhan Muhfizullokyzy – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: anarhan.soxibova@bk.ru

Petrova Darya Vadimovna – PhD (Chemistry), researcher. Institute of Physics of Microstructures of RAS (7, Akademicheskaya Str., Nizhny Novgorod, 603087, Russian Federation); Ivanovo State University of Chemistry and Technology (7, Ave. Sheremetevsky, 153000, Ivanovo, Russian Federation). E-mail: dar.isuct@yandex.ru

Semeikin Aleksandr Stanislavovich – DSc (Chemistry), Professor, Ivanovo State University of Chemistry and Technology (7, Ave. Sheremetevsky, 153000, Ivanovo, Russian Federation). E-mail: semeikin@isuct.ru

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by

Поступила после доработки 13.05.2022