



**2-й Международный семинар по спектроскопии
и фотохимии макрогетероциклических
соединений 18–19 октября 2022 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**О критериях стабилизации NH-таутомеров свободных
оснований корролов**

Н.Н. Крук^а, Л.Л. Гладков^б, Д.В. Кленицкий^а

^а УО "Белорусский государственный технологический университет", 220006,
ул. Свердлова, 13а, Минск, Республика Беларусь; e-mail: m.kruk@belstu.by

^б УО "Белорусская государственная академия связи", 220114,
ул. Ф.Скорины, 8, к.2, Минск, Республика Беларусь

Молекулы корролов являются представляют собой сокращенные тетрапиррольные соединения, в макроцикле которых отсутствует один метиновый мостик и два соседних пиррольных кольца соединены C_aC_a связью. В результате того, что макроцикл корролов содержит три пиррольных и одно пирролениновое кольцо, в ядре макроцикла находятся три протона. Данные факторы приводят к асимметрии макроцикла, проводящей к тому, что свободные основания коррола всегда существуют в виде конформеров, отличающихся расположением трех протонов – NH-таутомеров, которые могут претерпевать взаимные превращения в основном и возбужденных электронных состояниях. Хотя NH-таутомеры являются изоэлектронными, распределение электронной плотности у них различается, что приводит к формированию существенно отличающихся спектров поглощения и люминесценции NH-таутомеров.

В докладе обсуждаются критерии стабилизации NH-таутомеров: энергетический, ароматический и сольватационный.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственной программы научных исследований Республики Беларусь «Конвергенция 2025» (подпрограмма «Междисциплинарные исследования и новые зарождающиеся технологии», задание шифр 3.03.10 (НИР 2)).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Preiß, F. Herrmann-Westendorf, T. H. Ngo, T. Martínez, B. Dietzek, J. P. Hill, K. Ariga, M. M. Kruk, W. Maes, M. Presselt. *J Phys. Chem., A.* 121 (2017) 8614–8624.
2. Н. Н. Крук, Д. В. Кленицкий, Л. Л. Гладков, В. Маес. *Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика.* 1 (2019) 20–26.
3. Л. Л. Гладков, Д. В. Кленицкий, И. В. Вершиловская, Д.В. Петрова, А.С. Семейкин, В. Маес, Н. Н. Крук. *Журн. прикл. спектр.* 88 (2021) 836 – 844.
4. Н. Н. Крук. *Журн. прикл. спектр.* 89 (2022) 455 – 462.