



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

Минск, БЕЛАРУСЬ

Молекулярная структура и ароматичность свободных  
оснований тетрапиррольных макроциклов

Д.В. Кленецкий<sup>а</sup>, Л.Л. Гладков<sup>б</sup>, Н.Н. Крук<sup>а</sup>

<sup>а</sup> УО "Белорусский государственный технологический университет", 220006,  
ул. Свердлова, 13а, Минск, Республика Беларусь; e-mail: klen@belstu.by

<sup>б</sup> УО "Белорусская государственная академия связи", 220114,  
ул. Ф.Скорины, 8, к.2, Минск, Республика Беларусь

В докладе обобщаются результаты исследований [1-3] взаимосвязи архитектуры периферического замещения свободных оснований корролов и молекулярной конформации макрогетероцикла в основном синглетном  $S_0$  нижнем возбужденном синглетном  $T_1$  состояниях. Анализируется роль асимметрии макроцикла свободного основания коррола и специфика связи  $C_1C_{19}$  в дипиррольном фрагменте макроцикла.

С помощью модели гармонического осциллятора НОМО [4-5] проанализирована форма контура сопряжения и индекс ароматичности и для двух NH-таутомеров. Показана инверсия ароматичности макроцикла при заселении нижнего триплетного  $T_1$  состояния. Предложенный подход применен для анализа ароматичности других тетрапиррольных макроциклов в нижнем триплетном  $T_1$  состоянии и показано, что для них также выполняется правило Берда инверсии ароматичности.

#### 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. М.М. Kruk, D.V. Klenitsky, W. Maes. *Macroheterocycles*. **12** (2019) 58 – 67.
2. Н. Н. Крук, Д. В. Кленецкий, В. Маес. *Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика*. **1** (2018) 36–42.
3. М. М. Kruk, D. V. Klenitsky, L. L. Gladkov, W. Maes. *J. Porph. Phthal.* **24** (2020) 765 – 774.
4. Л. Л. Гладков, Д. В. Кленецкий, И. В. Вершиловская, Д.В. Птерова, А.С. Семейкин, В. Маес, Н. Н. Крук. *Журн. прикл. спектр.* **88** (2021) 836 – 844.
5. Л. Л. Гладков, Д. В. Кленецкий, И. В. Вершиловская, В. Маес, Н. Н. Крук. *Журн. прикл. спектр.* **89** (2022) 323 – 329.