

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ

Учреждение образования
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»



**3-Й МЕЖДУНАРОДНЫЙ СЕМИНАР
ПО СПЕКТРОСКОПИИ И ФОТОХИМИИ
МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ**

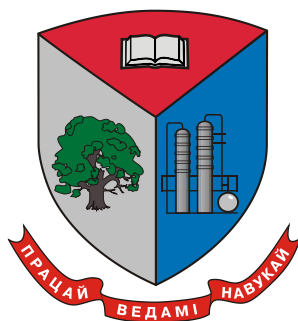
ПРОГРАММА И ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ



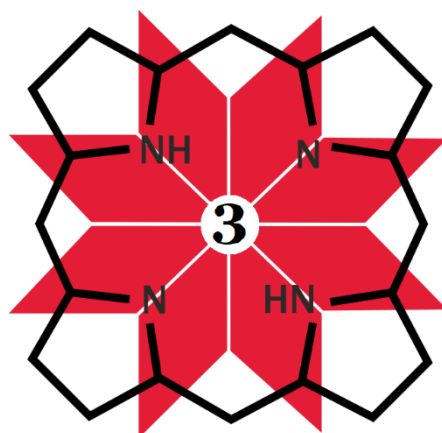
16–18 октября 2024 г.
Минск

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ

Учреждение образования
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»



**3-й МЕЖДУНАРОДНЫЙ СЕМИНАР
ПО СПЕКТРОСКОПИИ И ФОТОХИМИИ
МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ**



ПРОГРАММА И ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

16–18 октября 2024 г.
Минск

УДУ 535.37; 544.1; 547.7

3-й Международный семинар по спектроскопии и фотохимии макрогетероциклических соединений : программа и тез. докл. – Минск : БГТУ, 2024. – 40 с. – ISBN 978-985-897-220-2.

В издании приведены программа и тезисы докладов участников 3-го Международного семинара по спектроскопии и фотохимии макрогетероциклических соединений, состоявшегося 16–18 октября 2024 г. Доклады охватывают широкий круг фундаментальных вопросов молекулярной спектроскопии и фотохимии макрогетероциклических соединений, а также проблемы их практического использования в современных технологиях.

Сборник предназначен для ученых, работающих в областях молекулярной спектроскопии и фотохимии макрогетероциклических соединений, преподавателей, аспирантов, магистрантов и студентов учреждений высшего образования.

Главный редактор

ректор, д-р техн. наук, профессор

И.В. Войтов

Редакционная коллегия:

проректор по научной работе, канд. техн. наук, доцент

В.Л. Флейшер

декан факультета ИТ, канд. техн. наук, доцент

Д.В. Шиман

заведующий кафедрой физики, д-р физ.-мат. наук, профессор

Н.Н. Крук

ISBN 978-985-897-220-2

© УО «Белорусский государственный
технологический университет», 2024

Важнейшая роль макрогетероциклических тетрапиррольных соединений в формировании биосферы нашей планеты позволяет по праву называть их Молекулами Жизни. Результаты изучения строения и свойств этих соединений получили высокую оценку мирового научного сообщества – более десяти Нобелевских премий в области химии и физики, и лежат в основе многих современных технологий и материалов. Огромный потенциал, заложенный природой в данных структурах, постоянно приумножается трудами химиков-синтетиков, создающих новые соединения, обладающие уникальными свойствами.

Среди прикладных направлений исследования макрогетероциклических тетрапиррольных соединений, прежде всего следует отметить фотодинамическую терапию, фотокатализ, создание сенсibilизированных макрогетероциклическими соединениями солнечных батарей. Полимерные макрогетероциклические системы с различной архитектурой представляют собой базу для создания новых материалов.

Наряду с решением множества прикладных задач по совершенствованию уже имеющихся и созданию новых процессов и материалов, не теряют актуальности фундаментальные исследования физико-химических и спектрально-люминесцентных характеристик макрогетероциклических соединений, процессов дезактивации энергии фотовозбуждения и фотохимических реакций, в которых они принимают участие. Прогрессу работ в этом направлении способствуют развитие методов квантовой химии, совершенствование и расширение экспериментальных методов исследования.

В 2018 году в Белорусском государственном технологическом университете состоялся 1-й Международный семинар по фотохимии органических молекул, приуроченный к 85-летию со дня рождения одного из основателей белорусской школы фотохимии макрогетероциклических соединений академика Г.П. Гуриновича. Решению в дальнейшем проводить Семинар раз в два года помешала пандемия Ковид-19, и 2-й Международный семинар по спектроскопии и фотохимии макрогетероциклических соединений состоялся только в 2022 году.

Организационный комитет приветствует в Минске участников очередного 3-го Международного семинара по спектроскопии и фотохимии макрогетероциклических соединений и желает вам плодотворной работы!



От имени Оргкомитета
заведующий кафедрой физики,
доктор физ.-мат. наук, профессор
Н. Н. Крук

16 ОКТЯБРЯ		
8.30 -11.00	РЕГИСТРАЦИЯ УЧАСТНИКОВ (Ауд.505, корп.1)	
11.00-11.30	ТОРЖЕСТВЕННОЕ ОТКРЫТИЕ (Ауд.502, корп.1)	
ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ Председатель: Крук Н.Н.		
11.30 -12.00	Д.ф.-м.н. Зенькевич Эдуард Иосифович	Peculiarities of singlet oxygen $^1\Delta_g$ generation by nanoassemblies containing porphyrin macrocycles
12.00-12.30	К.ф.-м.н. Плавский Виталий Юльянович	Роль эндогенных порфиринов в реализации биологического действия оптического излучения на клетки различных типов
12.30-13.00	Д.х.н. Березин Дмитрий Борисович	Перспективы применения препарата метиленового синего как фотосенсибилизатора для антимикробной и противоопухолевой фотодинамической терапии
13.00-15.00	ОБЕД	
15.00-17.00	СЕКЦИОННОЕ ЗАСЕДАНИЕ Председатель: Стужин П.А.	
15.00-15.15	К.б.н. Зорин Владимир Петрович	Особенности процессов комплексообразования 5,10,15,20-тетра(м-гидроксифенил)хлорина с полимерными циклодекстринами
15.50-15.30	Д.ф.-м.н. Зенькевич Эдуард Иосифович	Interface effects and excitation energy relaxation in hybrid nanoassemblies based on semiconductor quantum dots AgInS/ZnS and porphyrin macrocycles
15.30-15.45	Д.х.н. Любимцев Алексей Васильевич	Применение фоточувствительной катионной композиции бактериохлорина для ФДТ
15.45-16.00	Д.х.н. Кустов Андрей Владимирович	Генерация синглетного кислорода хлориновыми фотосенсибилизаторами в водном и псевдо-липидном окружении
16.00-16.15	Д.ф.-м.н. Гладков Лев Львович	Влияния архитектуры NH ₂ -периферического замещения производных порфина на энергию интеркомбинационного T ₁ →S ₀ перехода
16.15-16.30	Д.ф.-м.н. Крук Николай Николаевич	Механизмы формирования спектров поглощения и люминесценции NO ₂ -замещенных порфиринов
16.30-16.45	Кулёв Вячеслав Александрович	Спектральное исследование взаимодействия разнозаряженных тетрапиррольных макрогетероциклических соединений
16.45-17.00	Рычихина Екатерина Дмитриевна	Спектрально-люминесцентные свойства Si(IV) комплексов порфиразина и корролазина
18.00-22.00	ТОРЖЕСТВЕННЫЙ УЖИН (Столовая БГТУ)	

17 ОКТЯБРЯ		
ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ Председатель: Березин Д.Б.		
9.00-9.30	Д.х.н. Стужин Павел Анатольевич	Галогенированные порфиразины и субпорфиразины
9.30-10.00	Д.х.н. Кустов Андрей Владимирович	Фотодинамическая терапия – назад в будущее
10.00-10.30	Д.х.н. Жабанов Юрий Александрович	Строение, спектроскопические и термодинамические свойства комплексов тетрапиррольных макроциклов
10.30-11.15	КОФЕ-БРЕЙК	
11.15-13.00	СЕКЦИОННОЕ ЗАСЕДАНИЕ Председатель: Кустов А.В.	
11.15-11.30	К.ф.-м.н. Лепешкевич Сергей Вольдемарович	Monitoring the CO and O ₂ rebinding to human hemoglobin and its subunits with time-resolved visible and mid-infrared spectroscopy
11.30-11.45	Чуфарин Алексей Евгеньевич	Карбокситетрапиразинопорфиразин как перспективный строительный блок для органических каркасов
11.45-12.00	К.х.н. Скворцов Иван Александрович	Фотохимические свойства и каталитическая активность субфталоцианинов и гибридных материалов на их основе с оксидом графена и нитридом углерода
12.00-12.15	Осокин Владимир Сергеевич	Синтез и изучение свойств мезо-фторированных кобаламинов
12.15-12.30	Шакель Антон Юрьевич	Роль периферического замещения и строения макрогетероцикла в формировании основности порфиринов в нижнем возбужденном синглетном S ₁ состоянии
12.30-12.45	Мельник Алексей Дмитриевич	Изучение возможности формирования J-агрегатов монодепротонированных форм гидрофильных катионных порфиринов
12.45-13.00	К.ф.-м.н. Кленицкий Дмитрий Викентьевич	Формирование четырех NH-таутомеров асимметрично замещенных 5,10-диарил-корролов
13.00-15.00	ОБЕД	
15.00-17.00	СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ Председатель: Зенькевич Э.И.	
	К.ф.-м.н. Пархоц Марина Викторовна	Фотостабильность Zn-замещенного гемоглобина при лазерном облучении
	Кальвинковская Юлия	Исследование фотодинамической активности в условиях <i>in vitro</i> комплексов порфиринов с

	Анатольевна	наноразмерными алмазами
	Лазовская Олеся Ильгамовна	Межхромоморфные взаимодействия витамина В ₁₂ в возбужденном состоянии
	Кустова Татьяна Владимировна	Феноксизамещенные триазолсодержащие макрогетероциклические соединения различного строения. Синтез, свойства и перспективы применения
	Петрова Ульяна Артемовна	Геометрическое и электронное строение молекул порфиразинов и их комплексов с элементами IV группы
	Березина Надежда Михайловна	Фотоустойчивость гидрофильных катионных пиридилпорфиринов
	Вьялкин Дмитрий Александрович	Квантово-химическое моделирование масс-спектров комплекса гемипорфиразина кобальта
	Жеглова Наталья Всеволодовна	Смешанно-замещенные порфирины – предшественники гибридных синтетических фотосенсибилизаторов
	Князева Алина Алексеевна	Молекулярная структура и электронные спектры окта(4-пропилфенокси)фталоцианина и его металлокомплексов с Al(III) и Ga(III)
	Погонин Александр Евгеньевич	Геометрическое и электронное строение молекул этиопорфирината-II кобальта
	Кузьмин Илья Алексеевич	Влияние гетероатомного замещения на электронные спектры поглощения порфиринов по данным квантово-химических расчетов
	Ерошин Алексей Валерьевич	Структурные и термодинамические характеристики субфталоцианинов
17.00-18.00	ЗАКРЫТИЕ СЕМИНАРА	
18 ОКТЯБРЯ		
Индивидуальное ознакомление участников с достопримечательностями Минска, посещение музеев и выставок, знакомство с национальной белорусской кухней, приобретение сувениров. При регистрации участникам будет дополнительно доведена информация о возможностях и условиях экскурсионной программы по посещению исторических мест вне Минска (с учетом краткосрочного прогноза погоды и длительности светового дня). ОТЪЕЗД УЧАСТНИКОВ		



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Peculiarities of singlet oxygen $^1\Delta_g$ generation by nanoassemblies containing porphyrin macrocycles

E.I.Zenkevich^{a,c}, M.V.Parkhats^b, B.M.Dzhagarov^b, C. von Borczyskowski^c

^aBelarussian National Technical University, Prospect Nezavisimosti 65, 220013 Minsk, Belarus, e-mail: zenkevich@bntu.by

^bB.I. Stepanov Institute of Physics, National Acad. Sci. of Belarus, 68-2 Prospect Nezavisimosti Ave., 220072 Minsk, Belarus

^cInstitute of Physics, Chemnitz University of Technology, Reichenhainer Str. 70, 09107 Chemnitz, Germany

To date, it was evidently shown that tetrapyrrolic macrocycles (porphyrins, chlorins, bacteriochlorins, phthalocyanines) are used as photosensitizers with exceptional properties, multifunctional abilities and excellent biocompatibility for the photodynamic therapy (PDT) as anticancer drugs.

Here, we discuss some principal aspects which should be taken into account upon quantitative analysis of the interaction with molecular oxygen O_2 and the singlet oxygen $^1\Delta_g$ generation by various tetrapyrrolic photosensitizers (including monomers, chemical dimers, triads, pentads and organic-inorganic nanoassemblies). In all cases, the direct experimental measurements of 1O_2 emission at $\lambda_{\max} = 1.27 \mu$ need to be corrected to the solvent influence (refractive indexes, molecular polarizability) on the rate constant of the radiative transition $^1\Delta_g \rightarrow ^3\Sigma_g^-$ in a 1O_2 molecule. For porphyrin and chlorin chemical dimers, T_1 states quenching by O_2 followed by 1O_2 generation depends on donor-acceptor interactions between the dimer halves, extra-ligation effects as well as on the spacer flexibility. For self-assembled triads and pentads containing Zn-porphyrin dimers and pyridyl substituted porphyrin free bases (H_2P), quenching rate constants of H_2P T_1 states by O_2 are smaller compared to those found for individual monomeric H_2P molecules which is explained by the spatial screening influence of a strongly quenched Zn-porphyrin dimer in multiporphyrin complexes. Finally, at 293 K for nanoassemblies of two types (semiconductor quantum dots CdSe/ZnS + coordinative linked tetrapyrrolic porphyrins, and semiconductor negatively charged quantum dots AgInS/ZnS + positively charged porphyrin molecules) it was quantitatively shown that non-radiative energy transfer FRET quantum dot $\rightarrow$ porphyrin (competing with electron tunneling under conditions of quantum confinement) is only responsible for the singlet oxygen 1O_2 generation.

This work was supported by BSPSR program “Photonics and Electronics for Innovations (Belarus, 2021-2025)” (Projects 1.8 and 2.1) and Visiting Scholar Program of TU Chemnitz, Germany (E.Z., 2020-2021).



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Роль эндогенных порфиринов в реализации биологического
действия оптического излучения на клетки различных типов**

**В.Ю.Плавский, А.В.Микулич, А.И.Третьякова, Л.Г.Плавская,
А.Н.Собчук, Р.К.Нагорный, О.Н.Дудинова, Т.С.Ананич,
Н.Д.Прокопенко, С.В.Якимчук, И.А.Леусенко**

*Институт физики НАН Беларуси, пр-т Независимости, 68-2, г. Минск,
Республика Беларусь, e-mail: v.plavskii@ifanbel.bas-net.by*

В работе представлены данные, свидетельствующие об определяющей роли эндогенных порфиринов (свободных оснований: протопорфирин IX, копропорфирин III, уропорфирин III, и их цинковых комплексов) в реализации регуляторного и деструктивного действия оптического излучения низкой интенсивности на клетки различных типов (соматические клетки, в том числе раковые, грамотрицательные и грамположительные бактерии, грибки, клетки крови, сперматозоиды различного видового происхождения).

Впервые зарегистрирована флуоресценция эндогенных порфиринов в живых раковых клетках, живых сперматозоидах животных (осел) и осетровых рыб. Разработаны методы экстрагирования порфиринов из клеток, обеспечивающие тушение интенсивного свечения флавинов (затрудняющих регистрацию порфириновой флуоресценции) и увеличивающих квантовый выход флуоресценции порфиринов. Оценена концентрация протопорфирина IX в раковых (~0,5 нМ) и в микробных (~5 нМ) клетках. Установлена более высокая чувствительность раковых клеток (по сравнению с нормальными нетрансформированными клетками) к действию излучения синей области спектра. Одной из причин повышенной фоточувствительности раковых клеток являются более высокие концентрации содержащихся в них эндогенных порфириновых сенситизаторов, что подтверждено методами флуоресцентного анализа. Это приводит к более высоким уровням светоиндуцированного образования активных форм кислорода, регистрируемых с помощью хемилюминесценции, и более высокой скорости светоиндуцированного снижения метаболической активности раковых клеток по сравнению с нормальными. Об определяющей роли эндогенных порфиринов в эффектах сенситизации клеток свидетельствуют более высокая скорость фотоинактивации раковых и микробных клеток и более интенсивный хемилюминесцентный сигнал при воздействии лазерного излучения с длиной волны $\lambda = 405$ нм, соответствующей максимуму спектра поглощения порфиринов и локальному минимуму в спектре поглощения флавинов, по сравнению с $\lambda = 445$ нм, соответствующей максимуму спектра поглощения флавинов.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Перспективы применения препарата метиленового синего
как фотосенсибилизатора для антимикробной и
противоопухолевой фотодинамической терапии**

**Д.Б.Березин^a, Т.В.Бондарева^a, О.В.Шухто^a, В.А.Гунина^a,
Ф.К.Моршнева^b, М.А.Крестьянинов^b, Е.В.Лялякина^c, А.В.Кузовов^b**

^a ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет», Иваново, Россия, e-mail: berezin@isuct.ru

^b ФГБУН «Институт химии растворов им Г.А. Крестова РАН», Иваново, Россия

^c ОБУЗ «Ивановская областная клиническая больница», Иваново, Россия

Метиленовый синий (МС) – давно и хорошо зарекомендовавший себя малотоксичный ($LD_{50} = 1250$ мг/кг) широко применяемый в клинической практике препарат антисептического действия, перспективный также для лечения ряда заболеваний [1,2]. Вместе с тем, МС – это краситель, интенсивно поглощающий в области прозрачности биологических тканей ($\lambda^{\max} \sim 660$ нм), а значит – потенциальный недорогой сенсибилизатор (ФС) для фотодинамической терапии (ФДТ) [1-4]. Он эффективно генерирует активные формы кислорода (АФК, $\Phi_{\Delta}^{H_2O} = 0.38$), хорошо растворим ($S^{298} = 43.6$ г/л) и слабо агрегирован в воде, образуя субнаноразмерные ассоциаты, в основном, ди-, три- и тетрамерной структуры [5]. Согласно величине коэффициента его распределения ($P = 0.11$) [2] МС обладает выраженной гидрофильностью. Исследования МС в области противоопухолевой ФДТ МС продолжаются [3,4]. В частности, нами было показано, что МС не переносится ни с одним типом транспортных белков крови, реализуя иные механизмы транспорта.

Катионная природа МС в сочетании с генерацией им АФК является залогом его применения в антимикробной ФДТ, несмотря на то, что интенсивная окраска пигмента, зачастую, создает экранирующий эффект, препятствующий эффективному лечению [4]. В докладе представлены результаты сравнительного исследования фотоиндуцированной активности МС и хлориновых ФС ионного типа в отношении ряда антибиотикорезистентных штаммов патогенов *in vitro*.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства образования и науки РФ, проект № FZZW-2023-0009.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Wainwright. Photodiagn. Photodyn. Ther., 2 (2005) 263 – 272.
2. K.J. Mellish, R.D. Cox, et al. Photochem. Photobiol., 75 (2002) 392 – 397.



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

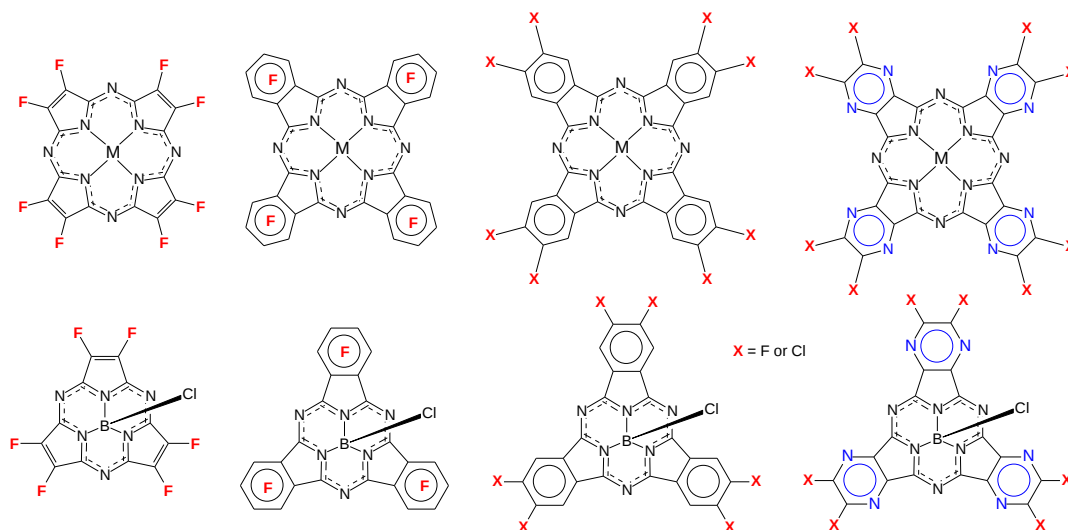
Минск, БЕЛАРУСЬ

Галогенированные порфиразины и субпорфиразины

П.А.Стужин

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский проспект д. 7, г. Иваново, Россия, e-mail: Stuzhin@isuct.ru*

В докладе обобщаются данные по влиянию эффекта периферического галогенирования (F, Cl) в порфиразинах, субпорфиразинах и их бензо и/или пиразинаннелированных аналогах на особенности электронного строения, спектрально-люминесцентных, электрохимических и некоторых других свойств.



Рассматриваются также низкосимметричные субпорфиразины, сочетающие галогенированные пиррольные кольца, аннелированные бензольные, пиразиновые или 1,2,5-тиа/селенадiazольные фрагменты.

Показаны перспективы применения периферически галогенированных порфиразиноидов в органической электронике и получении супрамолекулярных ковалентно-связанных пористых каркасных материалов

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант РФФ 23-43-00136)



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

Фотодинамическая терапия – назад в будущее

**А.В. Кустов^а, Д.Б.Березин^б, В.П.Зорин^в,
Т.Е.Зорина^в, О.И.Койфман^б**

^а *ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 153045
Иваново, ул. Академическая, д. 1, e-mail: kustov26@yandex.ru*

^б *ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический
университет», 15300 Иваново, Шереметевский пр., д. 7*

^в *Белорусский государственный университет, 220030 Минск, пр.
Независимости, д. 4*

Фотодинамическая терапия (ФДТ) является малоинвазивной альтернативой традиционным методам лечения локализованных опухолей и микробных инфекций. Она может быть использована как в виде монотерапии, так и как мощное дополнение к хирургическому вмешательству, лучевой, химио- или антибиотикотерапии, поскольку наряду с эффективной элиминацией опухолевых и микробных клеток, позволяет проводить флуоресцентную диагностику (ФД) границ опухолей и вызывать выраженный иммунный ответ. Последний, по всей видимости, состоит в переполаризации опухоль-ассоциированных макрофагов, активации после проведения ФДТ естественных киллеров, дендритных клеток и через их посредство опухоль специфичных Т-лимфоцитов, активность которых необходима для профилактики рецидива заболевания. Использование ФД и ФДТ с фотосенсибилизаторами (ФС) 2 поколения на основе природных хлоринов как в качестве монотерапии, так и, особенно, при комбинированном лечении предраковых и опухолевых заболеваний кожи, а также полых органов показало высокую эффективность используемых методик. Следует, однако отметить, что существуют объективные недостатки как самого метода, так и используемых на практике ФС которые следует преодолеть.

В настоящем докладе будет представлен персональный взгляд авторов на историю, развитие и современное состояние ФДТ, проведен анализ основных достоинств и недостатков метода, рассмотрены как уже используемые на практике, так и тестируемые в научных лабораториях: (а) способы комбинирования ФДТ с другими методами лечения злокачественных новообразований; (б) новые ФС и способы их активации в глубине тела; (в) способы повышения эффективности противоопухолевой ФДТ, сопровождаемые, где возможно, пилотными результатами клинических или лабораторных исследований.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Строение, спектроскопические и термодинамические свойства
комплексов тетрапиррольных макроциклов**

Ю.А. Жабанов

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, д. 7, Иваново, Россия, e-mail: zhabanov@gmail.com*

Расширение сфер практического применения тетрапиррольных макроциклов, таких, как нелинейная оптика, производство полупроводниковых и жидкокристаллических материалов, сенсорных устройств, требует не только расширения спектра их молекулярной архитектуры и способов ее конструирования, но и расширения исследований взаимосвязи геометрического и электронного строения молекул и их реакционной способности, спектроскопических свойств, как фундаментальной основы для реализации процессов разработки и получения новых материалов с заданными свойствами.

В данной работе проведено экспериментальное и теоретическое исследование геометрического и электронного строения молекул макроциклов с целью установления и теоретического объяснения общих закономерностей в их строении, а также расширения справочной информации. Для комплексного изучения структуры и энергетики макрогетероциклических соединений использован набор теоретических и экспериментальных методов. Состав пара и термодинамические характеристики тетрапиррольных макроциклов определялись методом высокотемпературной масс-спектрометрии. Молекулярная структура свободных молекул экспериментально изучалась методом газовой электронографии, а теоретически с помощью квантово-химических расчетов. Электронографические исследования приобретают особое значение в связи с тем, что получаемая молекулярная структура свободна от коллективных взаимодействий, характерных для рентгеновской и нейтронной дифракции, что позволяет с высокой достоверностью установить мелкие детали геометрического строения молекул, необходимые для надежного предсказания газофазных процессов, используемых в современной микро- и наноэлектронике, а также в оптоэлектронике. Важной составляющей проведенных исследований является теоретическое определение геометрического и электронного строения макроциклов с помощью квантово-химических расчетов, что позволило определить влияние заместителей на структуру и спектральные свойства этих соединений. Квантово-химические расчеты проведены для ряда металлокомплексов с макрогетероциклическими лигандами, например, для порфиринов, фталоцианинов, незамещенных и аннелированных порфиразинов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 24-73-10107



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Конформационный анализ и расчет колебательного спектра
молекулы 28-гомокастастерона в возможных конформациях**

В.М.Андрианов, М.В.Королевич

*УО «Белорусский государственный аграрный технический университет»,
Проспект Независимости 99, г. Минск, Беларусь
e-mail: v.andrianov71@gmail.com*

Брассиностероиды (БС) - класс растительных фитогормонов, проявляющих высокую биологическую активность. Они известны своей ростостимулирующей способностью, а также рассматриваются как потенциальные антиканцерогенные фармакологические средства.

В рамках оригинального комбинированного подхода, сочетающего классический анализ нормальных колебаний методом молекулярной механики с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, проведен согласованный расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний одного из представителей стероидных фитогормонов, обладающего биологической активностью – молекулы 28-гомокастастерона (RR конфигурация).

В результате проведенного конформационного анализа получено 20 конформеров боковой цепи молекулы 28-гомокастастерона, два из которых по энергетическому критерию могут реализоваться в растворе. Проведен расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний исследуемой молекулы в двух конформациях боковой цепи. По этим данным смоделированы спектральные кривые оптической плотности исследуемой молекулы. Теоретический спектр удовлетворительно описывает основные, наиболее интенсивные характеристические полосы поглощения экспериментального спектра 28-гомокастастерона в спектральном диапазоне 1500–900 см⁻¹.

На основе сопоставления экспериментальной и теоретической спектральных кривых поглощения дана интерпретация полос поглощения ИК спектров и изучено влияние структурных различий в пределах боковой цепи конформеров этой молекулы на формирование ИК спектра в области 1500–950 см⁻¹. Сопоставительный анализ результатов расчета колебательных спектров двух конформеров молекулы 28-гомокастастерона в рассматриваемом диапазоне частот показал, что различия конформации боковой цепи приводят к изменениям формы колебания в ряде нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, следствием чего является изменение интенсивностей соответствующих полос поглощения.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Фотоустойчивость гидрофильных катионных
пиридилпорфиринов**

Н.М.Березина^а, М.Б.Березин^б, М.И.Базанов^а

^аФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет», пр. Шереметевский, 7, Иваново, Россия

^б Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, ул. Академическая, 1, Иваново, Россия, e-mail: berezina_nm@isuct.ru

Устойчивость к фотоокислительной деструкции является одной из ключевых характеристик хромофора, характеризующая кинетическую стабильность соединения в растворе под воздействием УФ-облучения в условиях кислорода воздуха. К настоящему времени в литературе имеется мало информации о фотоустойчивости соединений порфиринового ряда.

В связи с этим, изучено влияние изомерии Ру-заместителя и природы аниона (иодид-, тозилат-) на устойчивость 3N- и 4N-метил замещенных тетрапиридилпорфиринов к фотоокислительной деструкции в водных растворах. На основании зависимости изменения текущей оптической плотности (A_t) от времени освещения, известной начальной (A_0) и конечной (A_∞), рассчитывали наблюдаемую (k_{obs}) константу скорости фотоокислительной деструкции порфирина из соотношения: $k_{obs} = 1/t \cdot \ln[(A_0 - A_t)/(A_t - A_\infty)]$, а также время его полувыведения ($t_{1/2}$). Расчет проводили для полосы Соре порфирина.

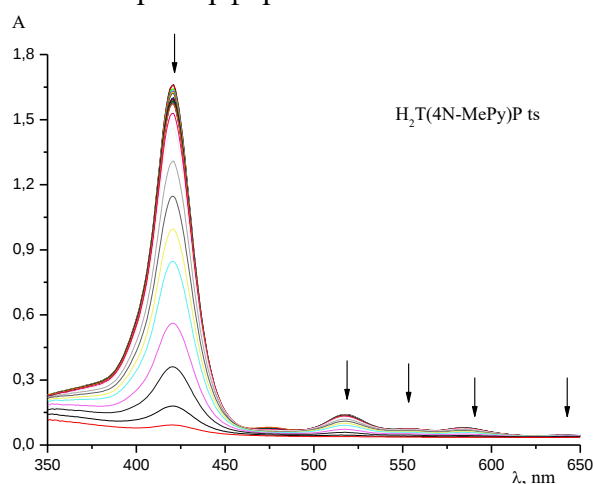


Рис. Изменение ЭСП порфирина мезо-тетракис-(1'-метил-пирид-4-ил)порфирина тетратозилата при УФ-облучении.

Конечную оптическую плотность (A_∞) определяли после длительного облучения раствора порфирина УФ-светом. Полученные результаты свидетельствуют о том, что N-метил-пиридилпорфирины в водных растворах стабильны и медленно деградируют под воздействием светового излучения. Из величин k_{obs} следует, что 4N-замещенные порфирины существенно устойчивее своих 3N-замещенных аналогов.



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Квантово-химическое моделирование масс-спектров
комплекса гемипорфирина кобальта

Д.А.Вьялкин, И.В.Рыжов, Ю.А.Жабанов, А.В.Ерошин.

Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, д. 7, Иваново, Россия, e-mail: vyalkinda@gmail.com

Ранее был зарегистрирован масс-спектр электронного удара гемипорфирина кобальта, полученный при $U_{\text{ion}} = 50$ В. Максимумы с $m/z=494$ и $m/z=247$ соответствуют одно- и двухзарядному молекулярному иону, в то время, как достаточно интенсивные пики с $m/z=467$ и $m/z=185$ относятся к ионам, образовавшимся в результате ионизации с разрывом преимущественно связей с атомами азота, располагающимися между соседними ароматическими фрагментами.

В данной работе мы применили программу QСхMS, которая позволяет моделировать масс-спектры с использованием молекулярной динамики Борна-Оппенгеймера, реализованной в программе хТВ. Метод электронной ионизации (EI), реализованный в программе QСхMS, с $U_{\text{ion}}=35$ эВ и $U_{\text{ion}}=50$ эВ при температуре 540К (Рисунок 1(б)) помог смоделировать теоретические масс-спектры. Как видно из рисунка 1(б), молекулярный ион с относительной массой 497 соответствует однозарядному молекулярному иону, полученному в ходе масс-спектрометрического исследования. Как видно из рисунка 1 теоретический масс-спектр качественно описывает экспериментальный, но содержит группу пиков с малыми массами, отсутствующую в экспериментальном масс-спектре.

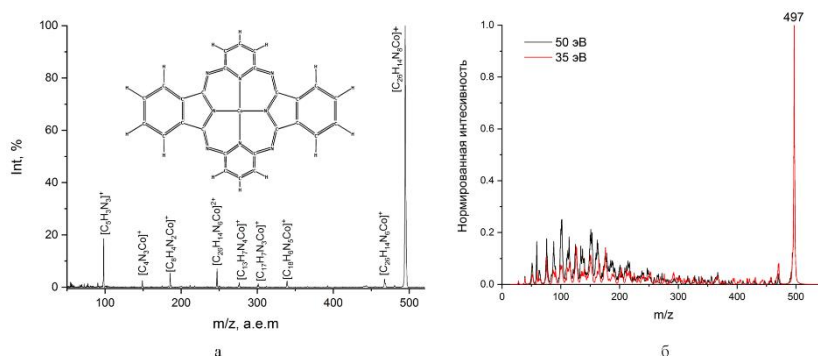


Рисунок 1. а – экспериментальный масс-спектр комплекса гемипорфирина кобальта; б – теоретический масс-спектр гемипорфирина кобальта.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-73-10107



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Влияние архитектуры NH₂-периферического замещения
производных порфина на энергию интеркомбинационного
T₁→S₀ перехода**

Л.Л.Гладков^а, Н.Н.Крук^б, Г.А.Гладкова^в

^а УО "Белорусская государственная академия связи", 220114, ул. Ф.Скорины, 8, к. 2,
Минск, Республика Беларусь, e-mail: Gladkovlev0@gmail.com

^б УО "Белорусский государственный технологический университет", 220006,
ул. Свердлова, 13а, Минск, Республика Беларусь

^в УО «Военная академия Республики Беларусь», 220057, пр. Независимости,
220, Минск, Республика Беларусь

В докладе представлены результаты теоретического изучения влияния архитектуры NH₂-периферического замещения производных порфина на энергию интеркомбинационного T₁→S₀ перехода. С использованием методов квантовой химии оптимизирована молекулярная конформация 15 производных порфина и 8 производных Zn-порфина в основном синглетном S₀ и нижнем триплетном T₁ состояниях, определены энергии молекулярных орбиталей, рассчитаны энергии T₁→S₀ перехода.

Установлено, что энергия T₁→S₀ перехода уменьшается от 11700 до 6200 см⁻¹ при увеличении количества NH₂-групп в C_m-положениях макроцикла, причем энергия T₁→S₀ перехода является линейной функцией взвешенной суммы индуктивной и резонансной констант Гаммета 0,2σ_I + 0,8σ_R заместителей. Соотношение индуктивного и резонансного вкладов NH₂-группы зависит от способа присоединения к макроциклу, с увеличением длины спейсера вклад резонансных взаимодействий уменьшается. Показано, что основной причиной батохромного сдвига T₁→S₀ перехода является значительное возрастание энергии b₁-орбитали, которая имеет пучности на C_m-атомах макроцикла. Зависимость сохраняется также для Zn-порфиринов с той же архитектурой периферического замещения. Отмечено, что энергия T₁→S₀ перехода отличается как для NH-таутомеров, так и для конформеров, различающихся ориентацией NH₂-групп относительно средней плоскости макроцикла. На основании полученных результатов предложен способ прогнозирования энергии T₁→S₀ перехода для синтеза соединений с требуемыми спектрально-люминесцентными характеристиками.

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



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Комплексообразование диэтиленгликольных производных
пирофеофорбида *a* с водорастворимыми полимерами**

М.А.Градова^а, О.В.Градов^а, О.М.Старцева^б, Д.В.Белых^в

^а*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, 119991, Россия, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4, e-mail: m.a.gradova@gmail.com*

^б*Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина, 167001, Россия, г. Сыктывкар, Октябрьский пр., д. 55*

^в*Институт химии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук, 167000, Россия, г. Сыктывкар, ул. Первомайская, д. 48*

Амфифильные этиленгликольные производные пирофеофорбида *a* являются эффективными фотосенсибилизаторами (ФС) для фотодинамической терапии и фотодиагностики новообразований. По данным биологических испытаний, одним из наиболее перспективных олигоэтиленгликольных производных является 17-диэтиленгликолевый эфир пирофеофорбида *a* (1), обладающий низкой темновой и высокой фотоиндуцированной цитотоксичностью [1-3].

В данном докладе рассматривается влияние водорастворимых полимеров, в частности, поливинилпирролидона (ПВП) и поливинилового спирта (ПВС), на фотофизические свойства и фотохимическую активность (1) в водных растворах. В фосфатном буфере в отсутствие полимерных стабилизаторов флуоресценции и генерации синглетного кислорода для (1) не наблюдается по причине образования молекулярных агрегатов ФС [4]. Однако, уже в 0.1-1% растворе ПВП и ПВС происходит резкое возрастание интенсивности флуоресценции (1) и генерации ¹O₂ за счет стабилизации фотоактивной мономолекулярной формы ФС при комплексообразовании с полимерной матрицей. В присутствии тушителей синглетного кислорода эффективность его генерации снижается, в то время как в среде D₂O она заметно возрастает, что подтверждает механизм фотодинамического действия II типа. В отличие от ПВП (10 кДа) и частично гидролизованного ПВС (30-70 кДа), в растворе полиэтиленгликоля (ПЭГ, 40 кДа) подобных эффектов не наблюдалось, что исключает аддитивное влияние вязкости на фотофизические свойства (1) и указывает на ключевую роль водородных связей в координации молекул ФС.

ЛИТЕРАТУРА

1. M.B. Sokol, et al. *Pharmaceutics*, 16 (2024) 126.
2. M.R. Mollaeva, et al. *Antioxidants*, 10 (2021) 1985.
3. Y.I. Pylina, et al. *Int. J. Mol. Sci.*, 18 (2017) 103.
4. M.A. Gradova, et al. *J. Porphyrins Phthalocyanines*, 26 (2022) 708-718.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Структурные и термодинамические характеристики
субфталоцианинов**

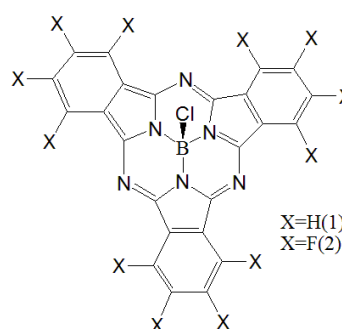
**И.Ю.Курочкин, А.Е.Погонин, А.В.Ерошин, Ю.А.Жабанов,
О.Г.Краснова, Г.В.Гиричев**

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, д. 7, Иваново, Россия,
e-mail: Alexey.Yeroshin@yandex.ru*

Геометрическое и электронное строение определяют весь спектр физических и химических свойств веществ и позволяют прогнозировать их поведение в различных процессах. В данной работе исследовано строение и термодинамика сублимации незамещенного субфталоцианина **1** и его перфторированного аналога **2**, которые нашли ряд применений в органической электронике [1].

Изучение геометрического строения было проведено методами газовой электронографии (ЭГ) и квантовой химии (B3LYP-D3BJ/pcseg-2 и B3LYP/pcseg-2). В ходе ЭГ эксперимента состав пара контролировался с помощью монополярного масс-спектрометра АПДМ-1. В масс-спектрах обоих соединений наиболее интенсивным ионом является $[M-Cl]^+$ ($m/z = 395$ и 611 а.е.м. для **1** и **2** соответственно), который образуется за счет отщепления аксиального лиганда ($-Cl$). Кроме того, на масс-спектрометре МИ-1201, модифицированном для термодинамических исследований, были получены температурные зависимости величины ионного тока I молекулярного иона $[M]^+$ для обоих соединений. Величины энтальпий сублимации, вычисленные с использованием уравнения Клапейрона-Клаузиуса, составили 135 ± 5 и 189 ± 3 кДж/моль для **1** и **2**, соответственно. Данные величины коррелируют с вычисленными с помощью квантово-химических расчетов энергиями межмолекулярного взаимодействия кристаллической решетки, 96 и 163 кДж/моль соответственно.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 20-13-00359 ЭГ/МС эксперимент проводился на УНУ «ЭГ/МС» (рег. номер 501980) ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (<https://www.isuct.ru/departament/ckp/structure/ged-ms>)



ЛИТЕРАТУРА

T.M. Grant, D.S. Josey, K.L. Sampson, T. Mudigonda, T.P. Bender, B.H. Lessard. The Chemical Record, 19 (2019) 1093–1112.



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

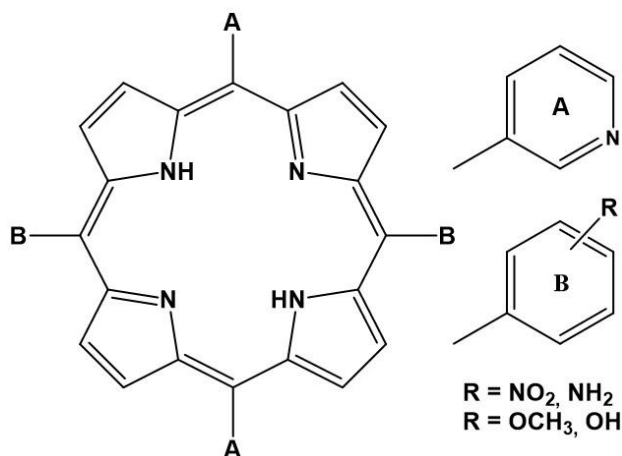
Смешанно-замещенные порфирины – предшественники гибридных синтетических фотосенсибилизаторов

Н.В.Жеглова, М.А.Еськин, А.С.Гусев, А.В.Любимцев

ФГБОУ ВО «ИГХТУ» г. Иваново, Россия, e-mail: zh_natalia_86@mail.ru

Большинство порфириновых соединений, предложенных в качестве фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии (ФДТ) обладают высокой гидрофобностью, что ограничивает их практическое применение в этой области. Перспективным направлением изменения свойств тетрапиррольных макрогетероциклов является их модификация, заключающаяся во введении в один или несколько *мезо*-арильных фрагментов активных атомов и/или групп, способных к дальнейшей модификации, в том числе и биологически активными структурными единицами (аминокислоты, пептиды, гликозиды).

Целью настоящей работы явилось получение замещенных порфиринов, содержащих в *мезо*-положениях одновременно 3-пиридилные и арильные фрагменты с активными к модификации группы (-OH, -NO₂, -NH₂).



Получение смешанно-замещенных порфиринов осуществляли модифицированными методами Адлера-Лонго и Линдсея. Были определены условия получения порфиринов с заданным количеством пиридилных и арильных фрагментов. Все смешанно-замещенные порфирины выделены в индивидуальном виде и охарактеризованы методами

электронной и ЯМР спектроскопии и масс-спектрометрии.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (соглашение № 23-23-00600).

Работа проведена с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

Interface effects and excitation energy relaxation in hybrid nanoassemblies based on semiconductor quantum dots AgInS/ZnS and porphyrin macrocycles

E.I.Zenkevich^{a,b}, V.B.Scheinin^c, O.M.Kulikova^c

^a*Belarussian National Technical University, Prospect Nezavisimosti 65, 220013
Minsk, Belarus, e-mail: zenkevich@bntu.by*

^b*Institute of Physics, Chemnitz University of Technology, Reichenhainer Str. 70,
09107 Chemnitz, Germany*

^c*G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry, Russian Acad. of Sci., Sheremetyev
Prospect 7, 153000 Ivanovo, Russia*

At the moment, the self-assembly process is considered as the fundamental phenomenon leading to the formation of desirable nanostructures with material properties on all scales through the organization of designed organic or inorganic building blocks. The study of self-organized systems plays a pivotal role in nano/bio/info technology by creating new interfaces between multiple disciplines.

In this report, we present comparative experimental spectral-kinetic data and results of quantum chemical calculations (method MM+) describing electrostatic interactions of positively charged 5,10,15,20-(tetra-N-methyl-4-pyridyl)porphyrin molecules with negatively charged glutathione stabilized core/shell semiconductor quantum dots (QD) AgInS/ZnS leading to the formation of stable QD-porphyrin nanoassemblies in water (pH 7.5) at 295 K. Using elaborated size-consistent quantum chemical atomistic 3D model for glutathione stabilized AgInS/ZnS QD, we propose a detailed physico-chemical mechanism for the interaction of the porphyrin molecule with the QD surface. It includes electrostatic interactions of the positively charged porphyrin free base molecule with negatively charged capping ligand (glutathione), followed by a very fast metalation of porphyrin free base (formation of ligated Zn-porphyrin complex) which is directly fixed on the QD surface. Correspondingly, spectral properties of attached Zn-porphyrin reflect the interaction of central Zn ion of the porphyrin macrocycle with a strong ligand on QD surface. The presented studies demonstrate that the combination of experimental techniques and molecular-level insight into surface morphology of QD-porphyrin nanoassemblies may increase our molecular-level understanding of the surface chemistry and photophysical events in QD-dye nanoassemblies.

This work was supported by Russian Science Foundation (Project № 18-73-00234), RFBR grant № 18-53-00035 (Russia-Belarus), BSPSR program “Photonics and Electronics for Innovations (Belarus, 2021-2025)” and Visiting Scholar Program of TU Chemnitz (Germany 2020-2021).



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Особенности процессов комплексообразования
5,10,15,20-тетра(м-гидроксифенил)хлорина
с полимерными циклодекстринами**

В.П.Зорин^{а,б}, И.В.Коблов^а, И.Е.Кравченко^а, Т.Е.Зорина^а

^аБелорусский государственный университет, 220030, пр. Независимости 4,
Минск, Беларусь, e-mail: vpzorin@mail.ru

^бМеждународный государственный экологический институт
им. А.Д. Сахарова БГУ, 220070, ул. Долгобродская 23/1, Минск, Беларусь

Фотосенсибилизатор (ФС) 5,10,15,20-тетра(м-гидроксифенил)хлорин (мТГФХ) обладает, вероятно, наиболее высокой фотодинамической активностью при фотодинамической терапии (ФДТ) в клинике. Одной из основных проблем при использовании данного ФС является его агрегация при введении в организм, снижающая биодоступность препарата и, как следствие, результативность ФДТ. Решение данной проблемы возможно посредством использования специализированных фармакологических форм, обычно применяемых для введения неполярных лекарственных соединений.

Перспективной фармакологической формой для введения мТГФХ являются препараты на основе циклодекстринов (ЦД). Ряд производных β -циклодекстрина эффективно образует комплексы включения с мТГФХ за счёт встраивания его боковых заместителей во внутреннюю полость ЦД. Характерной особенностью комплексов включения ЦД-ФС являются высокие значения констант скоростей их образования и распада, вследствие чего основным фактором, контролирующим транспорт ФС в составе комплексов, является концентрация ЦД. В данной работе методами спектрально-флуоресцентного анализа проведено исследование особенностей взаимодействия мТГФХ с полимерными циклодекстринами. Установлено, что взаимодействие молекулы мТГФХ одновременно с двумя циклодекстриновыми звеньями полимера оказывает значительное влияние на скорость диссоциации молекул ФС из состава комплекса. Показано, что применение полимерных ЦД позволяет значительно увеличить время нахождения молекул ФС в составе комплексов, что может быть использовано для контролируемого изменения процессов биораспределения ФС при проведении ФДТ.

Работа выполнена при поддержке ГПНИ «Биотехнологии-2» (задание 1.29) и ГПНИ «Конвергенция-2025» (задание 3.03.7.2).



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Spectral properties and aromaticity of pyrazinannelated hemihexapyrazine

E.N.Ivanov, A.A.Belyaev, M.K.Islyaikin

*Research Institute of Macrocyclics, Ivanovo State University of Chemistry
and Technology, 153000 Ivanovo, Russia*

To date, research on the chemistry of macrocyclic compounds is one of the most important and promising areas of science. Special attention is paid to hemihexaphyrins (Hhp) [1], which are six-membered macrocycles with thiadiazole and pyrrole rings are linked together through nitrogen atoms. These compounds have a promising potential for the discovery of substances with valuable properties, such as biological activity. Modification of hemihexaphyrins with different substituents and metal atoms in their coordination backbones opens up new possibilities for obtaining compounds with desired properties. Replacing benzene rings with electron-deficient groups such as pyrazines leads to a reduction in the electron density and total aromaticity of the compound, affecting its spectral properties. To confirm the non-aromatic character of the macrocycles, AICD method was used. According to the macrocyclic conjugation system, diamagnetic currents are observed in some parts of the molecule, but they do not cover the entire conjugation circuit. At the same time, paramagnetic currents occur on the thiadiazole subunits.

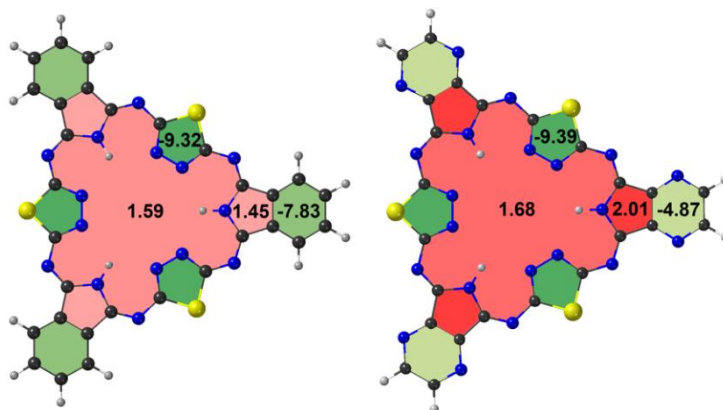


Fig.1 Calculated NICS criteria of benzoannelated (left), pyrazinannelated (right) hemihexapyrazines at the CAM-B3LYP/6-31G(d,p)/GIAO theory level.

ЛИТЕРАТУРА

M.K. Islyaikin, E.N. Ivanov, O.I. Koifman, D.V. Konarev. J. Porphyr. Phthalocyanines., 27, 01n04 (2023) 55–67.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Исследование фотодинамической активности в условиях
in vitro комплексов порфиринов с наноразмерными алмазами**

**Ю.А.Кальвинковская^a, В.А.Лапина^a, Т.А.Павич^a,
Р.К.Нагорный^a, С.Б. Бушук^a**

^a *Институт физики им Б.И.Степанова Национальной академии наук
Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь,
e-mail: juliet@ifanbel.bas-net.by*

Порфирины являются бесценными синтетическими строительными блоками для синтеза различных комплексов, благодаря широким возможностям, как для химической модификации координационной сферы, так и периферии макроциклов с целью создания разнообразных химических структур. Кроме того, они обладают замечательными фотофизическими свойствами, которые могут быть использованы как для оптической визуализации, так и для фотодинамической терапии (ФДТ) [1]. Развитие нанотехнологий открывает новые возможности в использовании порфиринов [2]. В данной работе исследовано взаимодействие комплексов тетрааминофенилпорфирина (ТАРР) и тетракарбоксифенилпорфирина (ТСРР) с наноалмазами (ND) и гиалуроновой кислотой (НА) с клетками HeLa *in vitro* методами конфокальной лазерной микроскопии. На рис.1 показано, что эти комплексы могут приводить к гибели клеток при их освещении.

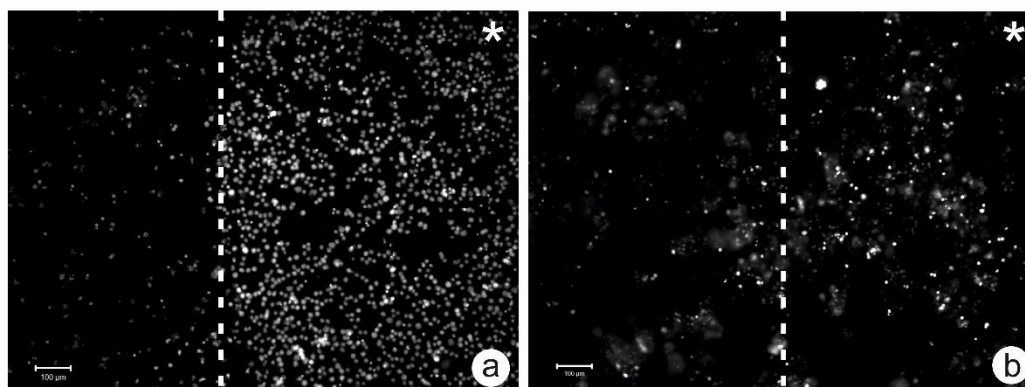


Рис.1 Изображения клеток HeLa в свете флуоресценции пропидий иодида после фотосенсибилизирующего воздействия (*) с ND-TCPP-НА комплексом (a) и ND-TAPP-НА комплексом (b).

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Constantin, M. Neagu. *Nanomedicine*, 5 (2010) 307-317.
2. Y. Liu, X. Dong. P. Chen. *Chem. Soc. Rev.*, 41 (2012) 2283–2307.



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Формирование четырех NH-таутомеров асимметрично замещенных 5,10-диарил-корролов

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

^аУО «Белорусский государственный технологический университет»

220006, ул. Свердлова, 13а, Минск, Республика Беларусь; e-mail: klen@belstu.by

^бУО «Белорусская государственная академия связи»

220114, ул. Ф.Скорины, 8, к.2, Минск, Республика Беларусь

В работе изучено образование четырех NH-таутомеров в асимметрично замещенных свободных основаниях 5,10-диарилкорролов [1]. С использованием теории функционала плотности выполнена оптимизация молекулярной конформации для четырех NH-таутомеров в основном синглетном S_0 и в нижнем возбужденном триплетном T_1 состояниях, оценены наборы интегральных и локальных структурных параметров. Результаты однозначно свидетельствуют о том, что каждый из четырех NH-таутомеров имеет свою собственную уникальную молекулярную конформацию. Обнаружено, что энергии основного состояния NH-таутомеров сильно различаются в зависимости от степени свободы вращения арильных заместителей. У коррола с мезитильными заместителями энергии основного состояния всех NH-таутомеров оказались практически одинаковыми, а при замещении свободно вращающимися фенильными группами обнаружен значительный энергетический зазор между двумя парами NH-таутомеров. В первом случае относительные населенности всех четырех NH-таутомеров близки и все четыре NH-таутомера сосуществуют, а во втором случае при комнатных температурах наблюдаются только два NH-таутомера. Определены степень ароматичности и контуры π -сопряжения для каждого из четырех NH-таутомеров и обнаружено аналогичное поведение для пар NH-таутомеров с локализацией протонов либо в дипиррометеновом, либо в дипиррольном фрагменте макроцикла. Все NH-таутомеры являются ароматическими в S_0 состоянии, но в T_1 состоянии происходит инверсия ароматичности.

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

ЛИТЕРАТУРА

M.M. Kruk, D.V. Klenitsky, L.L. Gladkov J. Porph. Phthal. 28 (2024) DOI: 10.1142/S1088424624500251.



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Молекулярная структура и электронные спектры окта(4-пропилфенокси)фталоцианина и его металлокомплексов с Al(III) и Ga(III)

А.А.Князева, У.А.Петрова, А.В.Ерошин, Е.В.Шагалов,
М.Н.Завалишин, Ю.А.Жабанов

Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, д. 7, Иваново, Россия, e-mail: knyazeva_alina1@mail.ru

В данной работе проведено исследование геометрического и электронного строения молекулы окта(4-пропилфенокси)фталоцианина и его металлокомплексов с Al(III) и Ga(III) методами квантовой химии. Квантово-химические расчеты проводились методом теории функционала плотности DFT в приближении CAM-B3LYP в комбинации с базисным набором def2-TZVPD.

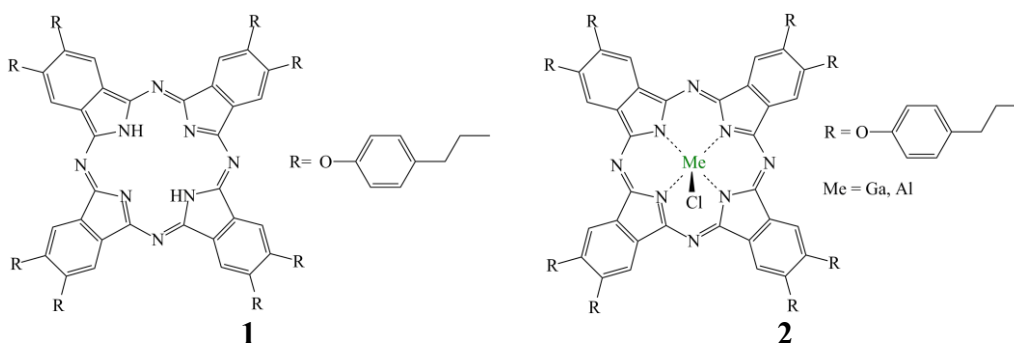


Рисунок 1 – Структурные формулы окта(4-пропилфенокси)фталоцианина (1) и его металлокомплекса с Al(III) и Ga(III) (2)

Установлено, что окта(4-пропилфенокси)фталоцианин (1) обладает плоской структурой макроцикла, в то время как металлокомплексы с Al(III) и Ga(III) (2) характеризуются куполообразным искажением макроциклического остова. Также можно отметить, что все полученные структуры относятся к точечной группе симметрии C_1 вследствие наличия объемных периферических заместителей. Также выполнено моделирование электронных спектров поглощения на основе результатов TDDFT расчетов. Было выявлено, что у окта(4-пропилфенокси)фталоцианина (1) в видимой области спектра самая интенсивная полоса поглощения находится при 630 нм, в то время как у металлокомплексов с Al(III) и Ga(III) (2) наблюдается батохромный сдвиг максимума поглощения на 17 и 14 нм соответственно.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-73-10107



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Механизмы формирования спектров поглощения
и люминесценции NO₂-замещенных порфиринов**

**Н.Н. Крук^а, Л.Л. Гладков^б, О.И. Лазовская^а, В.Н. Леонтьев^а,
О.С. Игнатовец^а, С.А. Сырбу^в**

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

^бУО «Белорусская государственная академия связи»
220114, ул. Ф.Скорины, 8, к.2, Минск, Республика Беларусь

^вФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
153000, Шереметевский пр-т, 7, Иваново, Российская Федерация

В работе изучены механизмы спектральных изменений, обусловленных присоединением NO₂ групп(ы) к макроциклу порфина. Методом функционала плотности оптимизирована молекулярная конформация C_m-замещенной молекулы порфина, определены энергии молекулярных орбиталей и рассчитаны электронные спектры поглощения как функция двугранного угла θ [1]. Установлено, что ориентация NO₂ относительно макроцикла существенно модулирует электронное взаимодействие с макроциклом, причем нитрозамещение в C_m-положении макроцикла селективно по отношению к молекулярным орбиталям, участвующим в формировании электронных переходов: энергия НВМО и ВЗМО–1 орбиталей существенно возрастает при переходе от копланарных конформеров к ортогональному, в то время как энергия НВМО+1 орбитали слабо возрастает, а энергия ВЗМО орбитали слабо уменьшается. В результате полосы S₀→S₁ и S₀→S₂ электронных переходов испытывают батохромные сдвиги, величина которых различна, а сила осциллятора f переходов изменяется в противоположных направлениях при увеличении двугранного угла θ . При этом силы осцилляторов и энергии электронных переходов могут быть представлены как функции $\cos^2\theta$ и/или $\cos^2 2\theta$. Анализируются сдвиги и уширение полос в спектрах поглощения семейства ди- и тетра-NO₂-замещенных производных порфиринов с различной архитектурой периферического замещения.

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

ЛИТЕРАТУРА

Л.Л. Гладков, Н.Н. Крук Журн. прикл. спектр. 91 (2024) 623–629.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Влияние гетероатомного замещения на электронные спектры
поглощения порфиринов по данным квантово-химических
расчетов**

И.А.Кузьмин, Ю.А.Жабанов

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский проспект д.7, г. Иваново, Россия, e-mail: wonderful_37@list.ru*

Фотофизические свойства порфиринов, а именно их способность поглощать энергию в видимом диапазоне длин волн, важный параметр для их применения в медицинской, энергетической и каталитической промышленности.

В данной работе квантово-химически было исследовано влияние гетероатомного замещения внутри макроциклической полости порфирина, на электронные спектры поглощения. В качестве объектов исследования были выбраны 21-оксапорфирин, 21-тиапорфирин и 21,23-дитиапорфирин. Квантово-химические расчеты молекулярной структуры и электронных спектров поглощения проводились в приближении B3LYP/cc-pVTZ

При замене внутрициклического атома азота на гетероатом (O, S), происходит bathochromic смещение максимумов поглощения, что свидетельствует об уменьшении энергии необходимой для перевода молекулы в возбужденное состояние, рисунок 1.

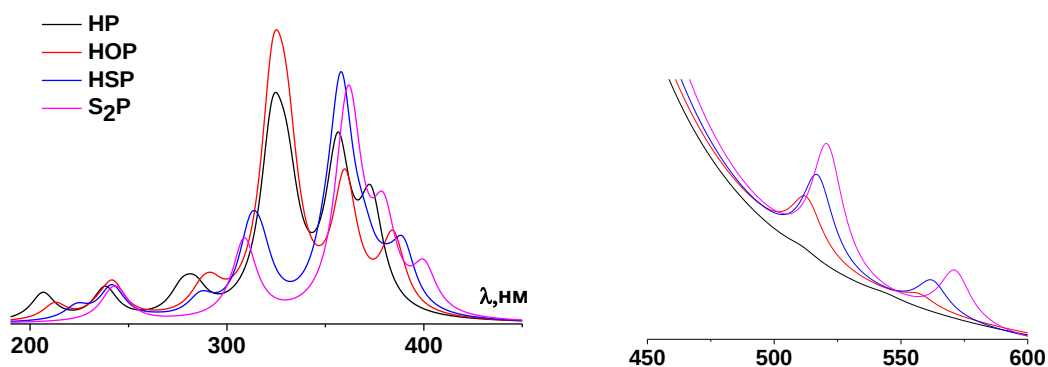


Рисунок 1. Теоретические электронные спектры поглощения порфирина, 21-оксапорфирина, 21-тиапорфирина и 21,23-дитиапорфирина

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-73-10107



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

Спектральное исследование взаимодействия
разнозаряженных тетрапиррольных макрогетероциклических
соединений

В.А.Кулёв, Н.Л.Печникова, Т.А.Агеева

*Ивановский государственный химико-технологический университет, пр.
Шереметьевский, г. Иваново, Российская Федерация, e-mail: slava.kulev@mail.ru*

Интересной областью исследований тетрапиррольных макрогетероциклических соединений является образование супрамолекулярных димерных системах с переносом заряда, которые могут стать основой для создания органических проводников, каталитических и сенсорных систем, а также для изучения процессов фотосинтеза.

В данной работе были исследованы процессы, протекающие при взаимодействии 5,10,15,20-тетракис(1-гексилпиридиний-4-ил)порфина тетрабромида ($\text{H}_2\text{P}(\text{Py}^+\text{C}_6\text{H}_{13}\text{Br}^-)_4$) и его кобальтового комплекса ($\text{CoP}(\text{Py}^+\text{C}_6\text{H}_{13}\text{Br}^-)_4$) с карбоксифталоцианинатами металлов в среде диметилсульфоксида. Установлены структуры полученных гетерокомплексов и характер межмолекулярного взаимодействия макроциклов.

Показано, что в случае взаимодействия $\text{CoP}(\text{Py}^+\text{C}_6\text{H}_{13}\text{Br}^-)_4$ и фталоцианинатов металлов получают гетерокомплексы эквимольного состава. В то время как с участием $\text{H}_2\text{P}(\text{Py}^+\text{C}_6\text{H}_{13}\text{Br}^-)_4$ происходит образование комплексов, в которых на одну молекулу порфирина проходятся две молекулы фталоцианина. Данный факт объясняется сильной координационной способностью диметилсульфоксида, в виду чего ион металла в составе комплексов макроциклов находится в виде пятикоординированной квадратной пирамиды и лишь одна сторона макроцикла остаётся доступной для образования гетерокомплекса.

Обнаружено, что в процессе получения гетерокомплекса происходит сильное снижение интенсивности полос поглощения в ЭСП и флуоресценции, соответствующих исходным соединениям и ответственных за π - π^* переходы. Данный факт демонстрирует наличие взаимодействия π -систем макроциклов.

По результатам квантово-химического моделирования можно утверждать, что в гетерокомплексе молекула фталоцианината металла выступает в качестве сильного акцептора, а молекула порфирина – донора. При этом наблюдается смещение электронной плотности в сторону координационной полости фталоцианината металла. Из чего следует, что внутри полученного гетерокомплекса протекают процессы с переносом заряда. Работа выполнена при поддержке Государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации (тема № FZZW-2023-0009)



3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.

Минск, БЕЛАРУСЬ

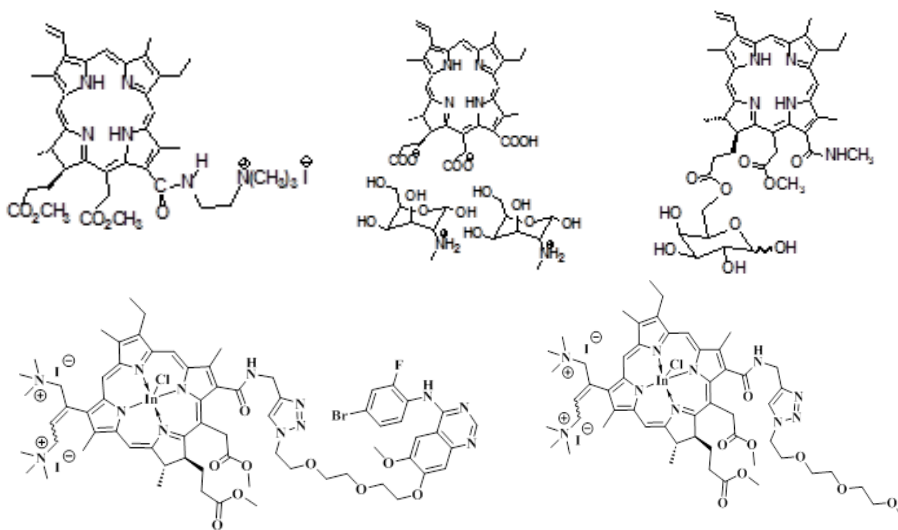
Генерация синглетного кислорода хлориновыми
фотосенсибилизаторами в водном и псевдо-липидном
окружении

Ф.К.Моршнева^а, А.В.Кустов^{а,б}, Т.В.Кустова^б, Д.Б.Березин^б

^а ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 153045
Иваново, ул. Академическая, д. 1, e-mail: kustov26@yandex.ru

^б ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический
университет», 15300 Иваново, Шереметевский пр., д. 7

В докладе представлены результаты определения квантовых выходов синглетного кислорода (Φ_{Δ}) в водных и октанольных растворах большой группы хлориновых фотосенсибилизаторов (ФС) (часть структур представлена ниже). Установлено, что в 1-октаноле определенные химическим методом величины Φ_{Δ} хорошо согласуются с данными прямых измерений за исключением ФС, имеющих в 3-м положении макроцикла содержащую иодид-ионы заряженную группу. Показано, что завышенные значения Φ_{Δ} возникают из-за увеличения скорости окисления ловушки вследствие протекания радикальных реакций, приводящих к образованию I_2 .



Установлено, что в водном растворе величины Φ_{Δ} ощутимо уменьшаются, главным образом, вследствие гидрофобной ассоциации молекул ФС. Добавление в раствор пассивных носителей, которые образуют комплексы с хлороинами, позволяет ослабить ассоциацию и существенно повысить величины Φ_{Δ} .

Работа выполнена в рамках госзадания (Проект FZZW-2023-0009)



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Феноксизамещенные триазолсодержащие
макрогетероциклические соединения различного строения.
Синтез, свойства и перспективы применения**

Т.В.Кустова, Н.С.Фомин, Е.И.Демидова, С.А Знойко

*ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический
университет», 15300 Иваново, Шереметевский пр., д. 7*

Макрогетероциклические соединения, в силу уникальных фотофизических, сольватационных, каталитических и рецепторных свойств находят применение в различных областях прикладной науки. Модификация макросистемы проходит путем введения фрагмента-фармакофоров или введением заместителей по периферии, а также введением различных биогенных металлов. В данной работе, строительными блоками для синтеза функциональных материалов с заданными свойствами служат триазольный фрагмент-фармакофор и феноксипроизводные фталонитрила. Сочетая такие ценные свойства прекурсоров, можно создавать функциональные материалы с практически полезными свойствами.

Нами продолжен синтетический ряд новых триазолсодержащих трехзвенных продуктов с ионами галлия, цинка, меди, который позволит в дальнейшем расширить возможность их практического применения и получить различного строения макрогетероциклы. Показана возможность использования оценок *in silico* для экспериментальной разработки состава фармкомпозиции на основе ациклических продуктов с галлием в качестве потенциального антибактериального лекарственного препарата к грамотрицательным штаммам. Высокая вероятность проявления биологических, антибактериальных и противогрибковых свойств говорит о целесообразности синтеза выбранных молекул. Прогноз проводили с использованием программных комплексов PASS, AntiBac-Pred и CLC-Pred. Оказалось, что некоторые из синтезированных соединений в ходе *in vitro* исследований проявили умеренную антибактериальную и фунгицидную активности.

Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671). Работа выполнена в рамках Государственного задания, тема № FZZW-2023-0009.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Межхромовые взаимодействия витамина В₁₂
в возбужденном состоянии**

**О.И.Лазовская^а, Л.Л.Гладков^б, В.Н.Леонтьев^а,
О.С.Игнатовец^а, Н.Н.Крук^а**

^аУО «Белорусский государственный технологический университет»
220006, ул. Свердлова, 13а, Минск, Республика Беларусь; e-mail: m.kruk@belstu.by
^бУО «Белорусская государственная академия связи»
220114, ул. Ф.Скорины, 8, к.2, Минск, Республика Беларусь

Витамин В₁₂ относится к семейству кобаламинов - макроциклических тетрапиррольных соединений с ионом кобальта, хелатированным корриновым фрагментом. К иону кобальта присоединен диметилбензимидазольный аксиальный лиганд, ковалентно связанный с корриновым кольцом. Второе координационное положение иона кобальта может быть занято различными аксиальными лигандами. Установлено, что кобаламины играют важную роль в биологических процессах и обладают уникальными спектрально-люминесцентными и фотохимическими характеристиками.

Вместе с тем, до настоящего времени ряд вопросов, касающихся орбитальной природы полос в спектре поглощения и механизмов дезактивации энергии электронного возбуждения, остаются невыясненными. Витамин В₁₂ представляет собой бихромовую систему, состоящую из корринового макроцикла и диметилбензимидазольного фрагмента. Если люминесценция последнего исследовалась неоднократно, то слабая флуоресценция витамина В₁₂ с квантовым выходом $\Phi_{\text{фл}} \sim 10^{-5}$ впервые была зарегистрирована недавно [1].

В настоящей работе методами абсорбционной и люминесцентной спектроскопии исследованы межхромовые взаимодействия в витамине В₁₂ в возбужденном состоянии, методом функционала плотности оптимизирована молекулярная конформация макроцикла, проанализирована форма возможного контура π -сопряжения и природа полос поглощения в видимой области спектра.

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

ЛИТЕРАТУРА

E.V. Salerno, N.A. Miller, A. Konar, Y. Li, C. Kieninger, B. Kräutler, R.J. Sension
J. Phys. Chem., B. 124 (2020) 6651–6656.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

Monitoring the CO and O₂ rebinding to human hemoglobin and its subunits with time-resolved visible and mid-infrared spectroscopy

**S.V.Lepeshkevich,^a I.V.Sazanovich,^b M.V.Parkhats,^a S.N.Gilevich,^c
A.V.Yantsevich,^c J.A.Weinstein,^d M.Towrie,^b B.M.Dzhagarov^a**

^a*B.I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus,
68 Nezavisimosti Ave, Minsk 220072, Belarus, e-mail: s.lepeshkevich@ifanbel.bas-net.by*

^b*Central Laser Facility, Research Complex at Harwell, STFC Rutherford Appleton Laboratory, Harwell Campus, OX11 0QX, UK*

^c*Institute of Bioorganic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus, 5 Academician V. F. Kuprevich Street, Minsk 220141, Belarus*

^d*University of Sheffield, Department of Chemistry, Dainton Building, Brook Hill, Sheffield S3 7HF, UK*

Human hemoglobin (Hb) is a tetramer consisting of two α and two β subunits. Each subunit contains one identical ferrous heme group which can reversibly bind one ligand molecule (CO or O₂). Up to now, there has been no definitive agreement on how ligand-induced conformational changes influence individual ligand binding properties of the α and β subunits in the different conformational forms of tetrameric Hb. In the present study we attempted to answer that question. We used time-resolved laser spectroscopy approach in that study, followed by the kinetic modeling. Picosecond to millisecond time-resolved spectra in the mid-infrared and visible regions were measured at the Central Laser Facility (STFC Rutherford Appleton Laboratories, Harwell, UK). We introduced the kinetic model, which describes the geminate ligand rebinding in the ferrous hemoglobin subunits, ligand migration between the primary and secondary docking site(s), and nonexponential tertiary relaxation within the liganded quaternary structure [1]. Our results reveal significant functional differences in the α and β subunits in both the geminate ligand rebinding and concomitant structural relaxation. The conformational relaxation following the ligand photodissociation in the α and β subunits was found to decrease the rate constant for the geminate ligand rebinding, this effect being more than one order of magnitude greater for the β subunits than for the α subunits. We observed the modulation of the ligand rebinding within Hb by the intrinsic heme reactivity through a change in proximal constraints upon the relaxation of the tertiary structure on a picosecond to microsecond time scale.

REFERENCE(S)

S.V. Lepeshkevich, I.V. Sazanovich, M.V. Parkhats, S.N. Gilevich, B.M. Dzhagarov. Chem. Sci., 12 (2021) 7033–7047.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Применение фоточувствительной
катионной композиции бактериохлорина для ФДТ**

**А.В.Любимцев^а, Г.С.Замай^{б,в}, Д.А.Кириченко^б, Е.В.Давыдов^г,
А.С.Кичкайло^{б,в}, А.А.Кошманова^б**

^а ФГБОУ ВО «ИГХТУ», Иваново, Россия, e-mail: alexlyubimtsev@mail.ru

^б ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого, Красноярск, Россия

^в ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

^г ФГБОУ ВО «РОСБИОТЕХ», Москва, Россия

Фотодинамическая терапия (ФДТ) обладает значительным потенциалом в области лечения онкологических заболеваний. Хотя на настоящее время ФДТ используется для уничтожения очагов поверхностных новообразований, таких как рак кожи, шейки матки и др., есть перспектива использования этих соединений для лечения и других типов рака, например, для удаления микрометастазов во время операции. Перспективными агентами для ФДТ признаны фотосенсибилизаторы синтетической природы.

Настоящее исследование посвящено применению синтетической катионной фоточувствительной композиции бактериохлорина (ФЧК) для фотодинамической терапии.

Исследования ФЧК на культурах глиальных опухолей показали, что после воздействия лазера через три часа наблюдается разрушение клеточных мембран. Эффект от ФДТ развивался в течении трех дней. Установлено, что при однократном введении терапевтической дозы препарата биохимические показатели крови лабораторных мышей остаются в норме. Показано, что препарат специфически накапливается в опухоли мышей через 20 минут после введения, выведение происходит через систему почечной фильтрации.

Дана оценка безопасности применения ФЧК для лечения животных, в результате которой определены безопасные дозы введения препарата в организм животных. Проведены сеансы фотодинамической терапии с композицией бактериохлорина спонтанных фибросарком и спонтанного рака молочной железы у домашних животных (кошек), а также ФДТ спонтанного плоскоклеточного рака ротовой полости у домашних животных (собак). Также проведены клинические исследования по комбинированному использованию ФДТ с химиотерапией для лечения рака молочной железы у животных.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (соглашение № 23-23-00600).



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Спектральный контроль образования
изопорфиринов металлов**

М.Е.Матис, К.С.Пухарин, Т.А.Агеева

*ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический
университет», 153000, пр. Шеремевский, г. Иваново, Россия,
e-mail: mega2010@mail.ru*

Изучение методов синтеза и модификации порфириновых и родственных им соединений, а также исследование их свойств не теряет актуальности на протяжении ряда последних десятилетий. Известно, что под действием различных окислителей, например, органических пероксидов, металлопорфирины окисляются до изопорфиринов соответствующих металлов [1].

Нами разработаны методики контроля образования изопорфиринов цинка, кобальта, меди в растворе [2], в мономере [3] и полимерной матрице [4] с применением спектроскопии в видимой и ближней ИК (БИК) области. Для всех изученных систем характерно исчезновение полос поглощения в видимой части спектра и рост полос поглощения в БИК-области, в районе 800-1000 нм.

Установлено, что на процесс окисления металлопорфиринов в значительной степени влияют: структура макрогетероциклов и пероксидов, природа растворителя, соотношение реагентов и температура, наличие координирующих добавок в системе.

Полученные закономерности нашли применение для контроля технологических процессов полимеризации виниловых мономеров и модификации полимерных материалов макрогетероциклическими соединениями с целью получения функциональных материалов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания (проект № FZZW-2023-0009).

ЛИТЕРАТУРА

1. Bhuyan J. Dalton Trans., 44(36) (2015) 15742-157
2. Глазкова М.Е., Агеева Т.А., Николаева О.И., Румянцева Ю.В., Койфман О.И. Изв. вузов. Химия и хим. технология, 54(3) (2011) 104-108
3. Глазкова М.Е., Агеева Т.А., Александровский В.В., Койфман О.И. Макрогетероциклы, 4(1) (2011) 22-25
4. Глазкова М.Е., Петрова М.В., Родина Ю.С., Родина С.С., Агеева Т.А. Изв. вузов. Химия и хим. технология, 63(10) (2020) 110-116



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Изучение возможности формирования J-агрегатов
монодепротонированных форм гидрофильных
катионных порфиринов**

А. Д. Мельник, А.Ю. Шакель, Н.Н. Крук

*УО «Белорусский государственный технологический университет»
220006, ул. Свердлова, 13а, Минск, Республика Беларусь,
e-mail: alex.mel.am99@gmail.com*

В работе изучены спектрально-люминесцентные характеристики монодепротонированных форм двух изомерных гидрофильных катионных порфиринов: 5,10,15,20-(4-*N*-метилпиридил)-порфирина и 5,10,15,20-(3-*N*-метилпиридил)-порфирина и исследована возможность формирования J-агрегатов при увеличении их концентрации в растворах. [1]. Установлено, что, несмотря на выполнение необходимого требования, заключающегося в биполярном характере распределения заряда в мономерах, монодепротонированные формы не формируют J-агрегаты.

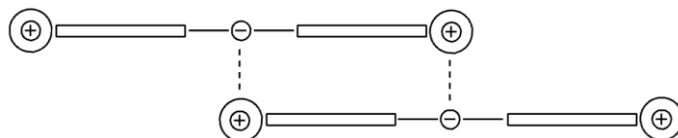


Схема предполагаемых взаимодействий между двумя мономерами в J-агрегате

Предложено, что устойчивость монодепротонированных мономеров исследованных порфиринов к агрегации обусловлена двумя факторами: во-первых, положительный заряд в периферических заместителях делокализован по всему фрагменту, что не позволяет обеспечить точечное кулоновское взаимодействие; во-вторых, протон в ядре макроцикла также делокализован, причем находится в плоскости макроцикла, что увеличивает расстояние между взаимодействующими центрами. В результате, сила кулоновских взаимодействий оказывается недостаточной, чтобы обеспечить связывание.

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

ЛИТЕРАТУРА

А.Ю. Шакель, А. Д. Мельник, Н. Н. Крук Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика 278 (2024) 26 – 31.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

Синтез и изучение свойств мезо-фторированных кобаламинов

В.С. Осокин, И.А.Деревеньков

*Ивановский государственный химико-технологический университет, пр.
Шереметевский 7, Иваново, Россия, e-mail: osokin.vladimir33@gmail.com*

Витамин В12 является эссенциальным соединением, необходимым для жизнедеятельности человека. Организм человека может получать этот витамин в форме цианокобаламина, который затем легко переходит в другие формы, участвующие в метаболизме. Модифицированные по корриновому макроциклу формы витамина В12 представляют интерес как активные коферменты в клетках людей с генетическими нарушениями, затрагивающими функции кобаламинов, однако их редокс-свойства изучены относительно слабо.

В данной работе были получены мезо-фторированные циано- и аквакобаламины. Мезо-фторированный цианокобаламин был получен в результате взаимодействия цианокобаламина с фторирующим реагентом. Фторированный аквакобаламин получен из цианокобаламина путём его децианирования с помощью сульфита с дальнейшим окислением сульфитного лиганда с помощью периодата натрия. Изучена кинетика реакции фторированных кобаламинов с глутатионом, восстановленным никотинамидом динуклеотидом и хлоридом титана (III). Структура модифицированных кобаламинов была оптимизирована методом DFT/M06L и базис def2-TZVP.

По результатам расчётов было найдено, что атом фтора сильно смещает электронную плотность на себя, что приводит к ослаблению связи с диметилбензимидазолом и как следствие увеличивается реакционная способность модифицированных комплексов. Определена цитотоксичность полученных комплексов на клетках крупного рогатого скота. Так же было установлено влияние мезо-фторированных кобаламинов на рост *S. aureus* ATCC 29213 при их различных концентрациях. Все полученные данные были сравнены с нативными кобаламинами.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Фотостабильность Zn-замещенного гемоглобина
при лазерном облучении**

М.В.Пархоц^а, С.В.Лепешкевич^а, М.В.Веремейчик^б, Б.М.Джагаров^а

^а*Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, Минск,
Беларусь, e-mail: m.parkhots@dragon.bas-net.by*

^б*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, Минск,
Беларусь*

Согласно современным представлениям, активные формы кислорода (АФК) являются необходимым элементом физиологического состояния всех типов клеток человека. Знание механизмов действия АФК важно как для понимания закономерностей функционирования клеток организма в норме, так и особенностей протекания многих патологических, в том числе онкологических, процессов. Несмотря на большое число исследований в данной области, молекулярные механизмы действия АФК в биологических системах, до сих пор до конца не ясны. Поэтому актуальной задачей является разработка и исследование биообъектов, позволяющих отслеживать появление и дезактивацию АФК, в том числе синглетного кислорода. Одним из интенсивно развивающихся направлений в этой области является создание систем, состоящих из модифицированных белковых структур и фотосенсибилизаторов (ФС), которые под воздействием света запускают цепь фотохимических реакций, приводящих к образованию АФК. С другой стороны, такой подход используется при разработке ФС нового поколения, для повышения селективности накопления и эффективности действия ФС.

Целью данной работы было синтезировать Zn-замещенный гемоглобин (ZnHb), в каждой субъединице которого гем был заменен на Zn-протопорфирин IX (ZnPP), являющийся эффективным фотосенсибилизатором и исследовать фотостабильность такой системы при лазерном облучении в буферных растворах.

Показано, что при взаимодействии ZnPP с апогемоглобином наблюдаются изменения спектральных и фотофизических характеристик порфирина и триптофановых остатков белка, свидетельствующие о встраивании ZnPP в белковую матрицу. Обнаружено, что при лазерном облучении происходит фотодеструкция Zn-замещенного гемоглобина, при этом ZnPP не выходит из гемового кармана гемоглобина. Установлено, что выход ZnPP из белковой матрицы происходит при повышении кислотности среды, что приводит к агрегации порфирина в водном окружении и существенному уменьшению эффективности фотосенсибилизированного образования синглетного кислорода.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

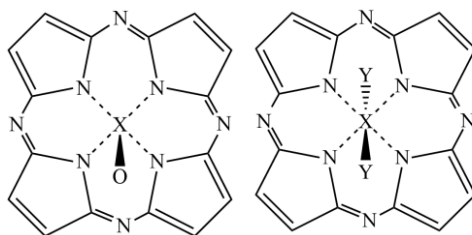
Минск, БЕЛАРУСЬ

**Геометрическое и электронное строение молекул
порфиразинов и их комплексов с элементами IV группы**

У.А.Петрова, А.А.Князева, А.В.Ерошин, А.Е.Погонин, Ю.А.Жабанов

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, д. 7, Иваново, Россия, e-mail: petrowa.ulya2015@yandex.ru*

В данной работе проведены квантово-химические расчеты для исследования геометрического и электронного строения молекул порфиразинов и их комплексов с элементами IVA группы в степени окисления +4: $XOPz$ ($X=Si, Ge, Sn, Pb$), XY_2Pz ($X=Si, Ge, Sn, Pb$; $Y=F, Cl, Br$). Оптимизация геометрии с последующим расчетом частот гармонических колебаний проводились методом теории функционала плотности (DFT) в приближении PBE0 в сочетании с набором базисных функций def2-TZVP. Также проведены TDDFT расчеты в приближении CAM-B3LYP/def2-TZVP в целях моделирования электронных спектров поглощения рассмотренных комплексов.



Установлено, что порфиразиновый остов в XY_2Pz ($X=Si, Ge, Sn$; $Y=F, Cl, Br$) является плоским, а сами структуры характеризуются точечной группой симметрии D_{4h} . В случае PbY_2Pz , данная D_{4h} -структура соответствует седловой точке на поверхности потенциальной энергии (ППЭ), а минимуму на ППЭ соответствует строение C_{2v} симметрии, согласно которому оба атома галогена располагаются с одной стороны от плоскости макрогетероцикла в плоскости мезоатомов углерода и оси симметрии C_2 . В рядах $SiY_2Pz \rightarrow GeY_2Pz \rightarrow SnY_2Pz$ теоретические электронные спектры поглощения незначительно отличаются друг от друга. Спектры PbY_2Pz имеют большие отличия в связи с понижением симметрии и снятием вырождения у низших свободных орбиталей. В ряду фториды $\rightarrow$ хлориды $\rightarrow$ бромиды наблюдается батохромный сдвиг Q-полосы поглощения в смоделированных спектрах.

Для комплексов $XOPz$ отмечено куполообразное искажение макрогетероцикла. В ряду $Si \rightarrow Ge \rightarrow Sn \rightarrow Pb$ наблюдается батохромный сдвиг Q-полосы поглощения.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 24-73-10107.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Геометрическое и электронное строение молекул
этиопорфирината-II кобальта**

А.Е.Погонин, А.В.Ерошин, Г.В.Гиричев

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, д. 7, Иваново, Россия, e-mail: pogonin@isuct.ru*

В настоящей работе на основе результатов совместного электронографического/масс-спектрального эксперимента исследовано строение свободных молекул этиопорфирината-II кобальта (CoEP-II).

Ранее отмечено [1], что существует неоднозначность в определении мультиплетности основного состояния порфирината кобальта. Поэтому в настоящей работе квантово-химические расчеты проводились как на уровне метода DFT (с использованием наборов базисных функций pVTZ (C, N, H) и cc-pVTZ (Co) и различных DFT функционалов - B3LYP, BP86, B97D, LC-wPBE, M05, M06, M06HF, mPW1PW91, PBE, PBE0, TPSSh, X3LYP), так и CASSCF/NEVPT2. Расчеты CASSCF проводились с использованием волновых функций, усредненных по дублетным и квартетным электронным состояниям с одинаковыми весами, причем их количество выбиралось на основе анализа относительных энергий электронных состояний. Для анализа статической электронной корреляции проведены расчеты с использованием метода FOD.

Для квартетного состояния с электронной конфигурацией кобальта $d^2_{xy}d^2_{z^2}d^1_{xz}d^1_{yz}d^1_{x^2-y^2}$ характерно удлинение связи Co-N на 0,05 Å, что приводит к соответствующей перестройке порфиринового кольца по сравнению с дублетным состоянием (с конфигурацией $d^2_{xy}d^1_{z^2}d^2_{xz}d^2_{yz}d^0_{x^2-y^2}$). Эта особенность позволяет использовать метод газовой электронографии для определения мультиплетности основного состояния CoEP-II.

В настоящей работе показано, что в условиях эксперимента молекулы CoEP-II находятся в дуплетном состоянии. Также электронографически впервые определена r_e -структура CoEP-II. Наиболее близкие к экспериментальным значения межъядерных расстояний в молекуле CoEP-II получаются в ходе M06 и mPW1PW91 расчетов.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 20-13-00359

ЛИТЕРАТУРА

J. R. de Souza, M.M.F. de Moraes, Y. A. Aoto, P. Homem-de-Mello. Phys. Chem. Chem. Phys., 22 (2020) 23886-23898



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Спектрально-люминесцентные свойства Si(IV) комплексов
порфиразина и корролазина**

Е.Д.Рычихина, С.С.Иванова, П.А.Стужин

*Ивановский государственный химико-технологический университет, пр.
Шереметевский, 7, Иваново, Россия, e-mail: katyarychikhina@gmail.com*

Комплексы Si(IV) с порфиразинами (Pz) и их аналогами, в которых отсутствует один мезо-атом азота - корролазинами (Cz), обладают интересными оптическими, электронными и фотосенсибилизирующими свойствами. Возможность варьировать заместители как в аксиальном положении, так и по периферии тетрапиррольного макроцикла позволяет целенаправленно управлять важными свойствами этих комплексов (люминесценция, генерация синглетного кислорода, устойчивость и др.)[1].

В данной работе впервые получены Si(IV) комплексы с арилзамещенными ((SPzAr₈ и SiCzAr₈), а также тетрапиразинаннелированными порфиразинами и корролазинами (SiPzTPyzPh₈, SiCzTPyzPh₈, SiPzTPyzCamph₄ и SiCzTPyzCamph₄) (Рис. 1) [2]. Обсуждается влияние аксиального лиганда, а также «сжатия» макроциклического лиганда на спектрально-люминесцентные и фотохимические свойства Si(IV) комплексов. Все октаарилзамещенные комплексы показывают низкую флуоресценцию ($\Phi_F < 0,03$), в то время как аннелирование пиразиновых фрагментов приводит к значительному росту квантового выхода флуоресценции (Φ_F до 0,55). Самую высокую способность к генерации синглетного кислорода среди полученных комплексов проявляет октафенилкорролазин SiCzPh₈ ($\Phi_\Delta=0,76$).

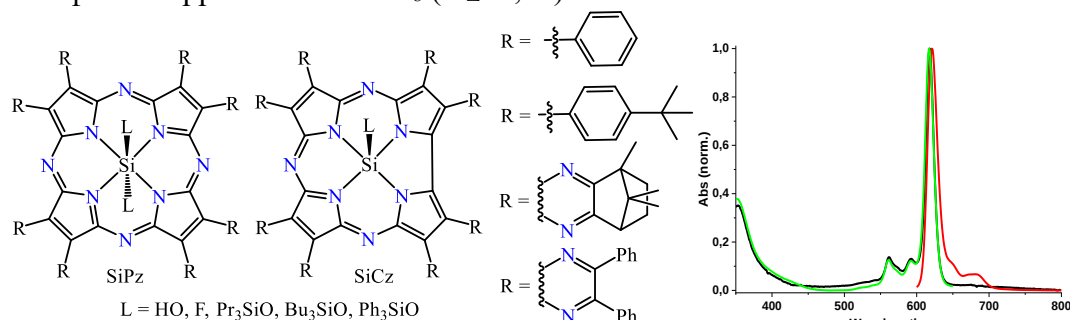


Рис. 1 - Структуры Si(IV) комплексов; ЭСП, флуоресценция и возбуждение флуоресценции (Pr₃SiO)₂SiPzTPyzCamph₄

ЛИТЕРАТУРА

1. X.-F. Zhang. Coord. Chem. Rev., 285 (2015) 52-64.
2. E.D. Rychikhina et al. Dalton Transactions, 52, 2023, 6831.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Фотохимические свойства и каталитическая активность
субфталоцианинов и гибридных материалов на их основе с
оксидом графена и нитридом углерода**

**И.А.Скворцов^а, М.Д.Лебедев^а, Д.А.Лапшина^а, К.А.Мартынова^а,
А.А.Гончаренко^а, К.П.Бирин^б, П.А.Стужин^а**

^а*НИИ Макрогетероциклических соединений, Ивановский государственный
химико-технологический университет, Шереметевский проспект 7, Иваново,
Россия, e-mail: ivanskvortsov@mail.ru*

^б*Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН,
Ленинский проспект 31, Москва, Россия*

Разработка фотокатализаторов, способных эффективно генерировать активные формы кислорода (например, синглетный кислород $^1\text{O}_2$), поглощать видимое излучение и быть фотостабильными в условиях катализа является актуальной задачей с точки зрения удешевления и оптимизации различных процессов (например, разложение различных токсичных водных загрязнителей).

Перспективными соединениями макроциклической природы для данных приложений являются субфталоцианины (sPcs) [1] – трипиррольные комплексы, в которых центральный атом бора координирован между тремя изоиндолными фрагментами. sPcs обладают интенсивным поглощением в видимой области (500–600 нм), имеют высокие значения молярного коэффициента экстинкции и квантового выхода $^1\text{O}_2$, а также проявляют высокую фотостабильность в растворах, что позволяет рассматривать их в качестве фотокатализаторов окисления различных субстратов [2].

В докладе будут представлены первые результаты, посвященные изучению спектрально-люминесцентных и фотохимических свойств ряда аксиально модифицированных sPcs [3] как селективных катализаторов гомогенного фотоокисления сульфидов в аэробных условиях с TON ~1000 и конверсией >99%. На основе полученных sPcs с оксидом графена (GO) или с графитоподобным нитридом углерода (g- C_3N_4) были впервые получены гибридные материалы, эффективно генерирующие $^1\text{O}_2$.

Работа поддержана Российским научным фондом, № гранта 23-73-01234.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Torres et al. Chem. Soc. Rev. 51 (2022), P. 9482–9619.
2. B. Wang et al. Chem. Eng. J. 473 (2023), 145290
3. I.A. Skvortsov et al. ChemPlusChem. (2024), P. e202400319.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Тетрафенилпорфин и его медный комплекс как индукторы
спиральной жидкокристаллической фазы**

**И.П. Трифонова, А.А. Буданова, И.В. Новиков,
В.А. Бурмистров**

*Ивановский государственный химико-технологический университет, 153000,
Шереметевский проспект, д.7, Иваново, Россия, e-mail: trifonova@isuct.ru*

Порфирины и другие тетрапирролы являются привлекательными строительными блоками для функциональных наноструктур, а также интересными хромофорами для исследований, связанных с индукцией хиральности. Повышенный интерес здесь представляют жидкокристаллические смеси с порфиринами, позволяющими закручивать нематическую фазу, индуцировать спиральную структуру, тем самым изменять физические свойства жидкокристаллической матрицы. В связи с этим в настоящей работе исследованы мезоморфные и оптические свойства жидкокристаллических систем на основе бинарной смеси (СВ-2) и порфиринов. Жидкокристаллическая эвтектическая смесь алкоксицианобифенилов $C_nH_{2n+1}-O-CH_4-CH_4-CN$ ($n=5; 7$) проявляет нематическую фазу в довольно широком температурном интервале от 22,0 до 71,5 °С. В качестве хиральных допантов использовали 5,10,15,20-тетрафенилпорфин ТФП и его медный комплекс CuТФП.

Текстуры жидкокристаллических композиций были изучены методом поляризационной микроскопии. При допировании нематика порфиринами образуется либо мраморная текстура, либо текстура отпечатков пальцев. Последняя означает образование хиральной нематической фазы в определенных температурных и концентрационных пределах композиций.

Также были определены температуры просветления (фазового перехода хиральный нематик – изотропная жидкость). Важной характеристикой влияния немезоморфной добавки на жидкокристаллические свойства мезоморфных соединений является степень воздействия на термостабильность мезофазы, оцениваемая по наклону зависимости температуры просветления (T_{N-I} , °С) от содержания добавки. Для ТФП величина $d(T/T_{(N-I)})/dC$ составила $-0,46 \text{ мол.доли}^{-1}$, для CuТФП $-0,61 \text{ мол.доли}^{-1}$.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

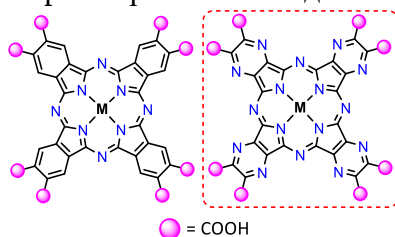
Минск, БЕЛАРУСЬ

**Карбокситетрапиразинопорфиразин как перспективный
строительный блок для органических каркасов**

А.Е.Чуфарин, И.А.Скворцов, Д.А.Лазовский, П.А.Стужин

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский проспект д. 7, г. Иваново, Россия, e-mail: a-chufarin@bk.ru*

Фталоцианины (Pcs) и их азааналоги (тетрапиразинопорфиразины, TPyzPzs), широко изучаются благодаря уникальным спектральным, фотофизическим и координационным свойствам. Они используются в качестве ключевых строительных блоков для дизайна функциональных материалов и молекулярных устройств [1]. Введение на периферию карбоксильных групп придает макроциклам типа Pс растворимость в воде, а октакарбоксизамещенные Pcs были исследованы в качестве фотосенсибилизаторов, (фото)катализаторов и электродных материалов для литий-ионных аккумуляторов. Pcs с карбоксильными группами также успешно использовались в качестве строительных блоков для дизайна наноматериалов и органических каркасов (COF, MOF) [2, 3]. Замена бензольных колец в Pcs на электронодефицитные пиразиновые фрагменты в TPyzPzs увеличивает акцепторные свойства макроцикла и зачастую улучшает фотофизические и каталитические свойства [1]. Карбоксизамещенные TPyzPz были изучены в [4] как потенциальные фотосенсибилизаторы, однако органические каркасы на основе TPyzPz неизвестны. В этом докладе мы обсуждаем синтез октакарбокси TPyzPzM, идентификацию, спектрально-люминесцентные свойства в водных растворах в зависимости от pH и применение в дизайне органических каркасов.



*Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда
(грант РНФ 23-43-00136)*

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Novakova, et al. Coord Chem Rev., 361 (2018) 361, 1-73.
2. X. Han B, Ding, et al. JACS., 143 (2021), 7104-7113.
3. E.S. Golovashova, et al. Rus J Phys Chem A., 91 (2017), 2122-2125.
4. A.E. Chufarin, et al. JPP A: Chemistry., 452 (2024), 115564-115575.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

**Роль периферического замещения и строения
макрогетероцикла в формировании основности порфиринов
в нижнем возбужденном синглетном S_1 состоянии**

А.Ю. Шакель, А. Д. Мельник, Н.Н. Крук

*УО «Белорусский государственный технологический университет»
220006, ул. Свердлова, 13а, Минск, Республика Беларусь, e-mail: a.shakel@mail.ru*

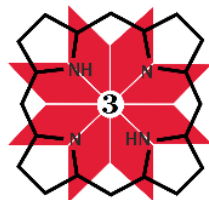
В работе изучена основность гидрофильных 5,10,15,20-тетраарил-замещенных порфиринов в нижнем возбужденном синглетном S_1 состоянии. Установлено, что изменение основности ΔpK_a нижнего возбужденного синглетного S_1 состояния порфиринов по сравнению с основным S_0 состоянием определяется электронными эффектами периферических заместителей. Величина $\Delta pK_a \sim 0$, если заместители обладают только индуктивным эффектом, а если электронное взаимодействие включает в себя резонансную составляющую, то величина ΔpK_a изменяется, причем для электроноакцепторных заместителей основность уменьшается. Кооперативный характер протонирования в S_1 состоянии исследованных порфиринов сохраняется.

При переходе к гетерозамещенным производным основные свойства макрогетероцикла в основном S_0 и нижнем возбужденном синглетном S_1 состояниях существенно изменяются. В 21-тиа-порфирине снижается кооперативность протонирования в основном S_0 и нижнем возбужденном синглетном S_1 состояниях. Обнаружено, что величина ΔpK_a значительно больше, чем у порфирина с той же архитектурой периферического замещения. Предложено, что это обусловлено необходимостью значительной конформационной релаксации и соответствующих изменений в сольватной оболочке молекулы для присоединения протонов. С помощью подхода, основанного на цикле Фёрстера, охарактеризованы термодинамические характеристики протонирования в основном S_0 и нижнем возбужденном синглетном S_1 состояниях и обнаружено значительное изменение энтропии активации $\Delta \Delta S^\ddagger$ протонирования порфиринов в возбужденном состоянии.

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

ЛИТЕРАТУРА

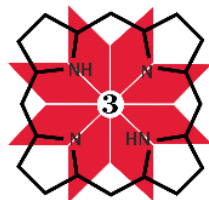
А.Ю. Шакель, А. Д. Мельник, Н. Н. Крук Журн. прикл. спектр. 91 (2024) 327–334.



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

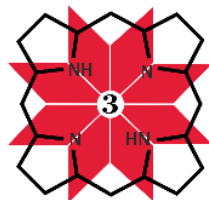
ДЛЯ ЗАМЕТОК



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

ДЛЯ ЗАМЕТОК



**3-й Международный семинар по
спектроскопии и фотохимии
макрогетероциклических соединений
16–18 октября 2024 г.**

Минск, БЕЛАРУСЬ

ДЛЯ ЗАМЕТОК

Научное издание

**3-Й МЕЖДУНАРОДНЫЙ СЕМИНАР
ПО СПЕКТРОСКОПИИ И ФОТОХИМИИ
МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Программа и тезисы докладов

В авторской редакции

Ответственный за выпуск Е.О. Черник
Компьютерная верстка Н.Г. Грода

Подписано в печать 07.10.2024. Формат 60×84 1/8.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать ризографическая.
Усл. печ. л. 2.69. Уч.-изд. л. 2.88
Тираж 40 экз. Заказ 318.

Издатель и полиграфическое исполнение:
УО «Белорусский государственный технологический университет».
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий
№ 1/227 от 20.03.2014.
Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.

