



**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.