

УДК 535.34+535.35+535.372

Д. В. Кленецкий¹, Л. Л. Гладков², И. В. Вершиловская¹, Н. Н. Крук¹¹Белорусский государственный технологический университет²Белорусская государственная академия связи

ОБ АРОМАТИЧНОСТИ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В НИЖНЕМ ТРИПЛЕТНОМ T_1 СОСТОЯНИИ

Исследованы степень ароматичности и контуры π -сопряжения незамещенных макроциклических тетрапиррольных соединений, различающихся природой соединительных мостиков между пиррольными фрагментами макроцикла. Оптимизация молекулярной конформации исследованных соединений выполнена методом функционала плотности в основном синглетном S_0 и нижнем возбужденном триплетном T_1 состояниях. Для оценки степени ароматичности использован структурный критерий, основанный на модели гармонического осциллятора ароматичности НОМА. Для всех возможных контуров сопряжения исследованных соединений, удовлетворяющих правилу Хюккеля, вычислены индексы ароматичности $I_{НОМА}$. Показано, что в основном состоянии у соединений наибольшими значениями индекса ароматичности обладают контуры сопряжения, содержащие 18 π -электронов. В нижнем триплетном T_1 состоянии эта тенденция сохраняется, за исключением порфирина, у которого наибольшим значением индекса обладает 22-членный контур Шлейера. Установлено, что для исследованных соединений справедливо правило Берда об инверсии ароматичности в триплетном состоянии. У ароматических соединений (порфирина, тетрагидропорфирина, порфицена, а также NH-таутомеров коррола) степень ароматичности в триплетном T_1 состоянии уменьшается по сравнению с основным состоянием, и наоборот, у неароматических соединений (норкоррола) степень ароматичности увеличивается. Изменения конфигурации контура π -сопряжения электронов в макроцикле и степени ароматичности макроцикла в целом при заселении нижнего триплетного T_1 состояния связано как с конформационными перестройками макроцикла, так и с изменением конфигурационного взаимодействия.

Ключевые слова: тетрапиррольные соединения, триплетное состояние, ароматичность, контур π -сопряжения.

Для цитирования: Кленецкий Д. В., Гладков Л. Л., Вершиловская И. В., Крук Н. Н. Об ароматичности макроциклических тетрапиррольных соединений в нижнем триплетном T_1 состоянии // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2026. № 1 (302). С. 42–51.

DOI: 10.52065/2520-6141-2026-302-5.

D. V. Klenitsky¹, L. L. Gladkov², I. V. Vershilovskaya¹, M. M. Kruk¹¹Belarusian State Technological University²Belarusian State Academy of Communications

ON THE AROMATICITY OF MACROCYCLIC TETRAPYRROLIC COMPOUNDS IN THE LOWEST TRIPLET T_1 STATE

The degree of aromaticity and π -conjugation pathway of unsubstituted macrocyclic tetrapyrrole compounds differing in the nature of the connecting bridges between the pyrrole fragments of the macrocycle were studied. Optimization of the molecular conformation of the studied compounds was performed using the density functional method in the ground singlet S_0 and lower excited triplet T_1 states. To assess the degree of aromaticity, a structural criterion based on the harmonic oscillator model of aromaticity (HOMA) was used. For all possible conjugation pathway of the studied compounds that satisfy the Hückel rule, the $I_{НОМА}$ aromaticity indices were calculated. It has been shown that in the ground state for all compounds, the highest values of the aromaticity index are found in conjugation contours containing 18 π -electrons. In the lower triplet T_1 state, this trend is maintained, with the exception of porphyrin, in which the 22-membered Schleyer circuit has the highest index value. It turned out that Bird's rule on the inversion of aromaticity in the triplet state is valid for the studied compounds. The degree of aromaticity of aromatic compounds (porphyrin, tetrahydroporphyrin, porphycene, as well as corrole tautomers) in the triplet state decreases compared to the ground state, and vice versa, in non-aromatic compounds (norcorrole) the degree

of aromaticity increases. Changes in the configuration of the π -conjugation pathway of electrons in the macrocycle and the degree of aromaticity of the macrocycle when populating the lower triplet T_1 state are associated with both conformational rearrangements of the macrocycle and changes in the configurational interaction.

Keywords: tetrapyrrole compounds, triplet state, aromaticity, π -conjugation pathway

For citation: Klenitsky D. V., Gladkov L. L., Vershilovskaya I. V., Kruk M. M. On the aromaticity of macrocyclic tetrapyrrolic compounds in the lowest triplet T_1 state. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2026, no. 1 (302), pp. 42–51. (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2026-302-5.

Введение. Среди большого числа макрогетероциклических соединений особое место занимают тетрапиррольные соединения, у которых четыре пиррольных кольца связаны вместе напрямую или с использованием различных соединительных мостиков. Характерной особенностью данных соединений является образование сопряженной системы связанных p -орбиталей, которая обеспечивает делокализацию π -электронов по макроциклу. Молекулярная структура тетрапиррольных соединений допускает существование нескольких вариантов контура π -сопряжения. Определение контура сопряженной π -электронной системы, реализующегося в макроциклах, является предметом многочисленных исследований [1–3]. В зависимости от количества π -электронов в контуре сопряжения и его топологии сопряженная электронная система молекулы будет ароматичной либо антиароматичной, что в результате должно приводить к существенно различающимся между собой спектрально-люминесцентным и физико-химическим свойствам. Для ароматической стабилизации число π -электронов в контуре сопряжения должно удовлетворять правилу Хюккеля: $4n + 2$, где n – целое число.

Следует отметить, что многие тетрапиррольные соединения обладают непланарным макроциклом, но при этом сохраняют свойства делокализованной системы π -электронов. Квантово-механические расчеты показывают, что p -орбитали имеют нулевое перекрытие только при строго ортогональном расположении. Величина перекрытия, а следовательно, и эффективность сопряжения зависят от торсионного угла между осями симметрии p -орбиталей. Конформационный фактор, связанный с неплоским строением макроцикла, способен оказать существенное влияние на степень ароматичности соединений. Кроме того, степень ароматичности молекул может также изменяться при заселении возбужденных состояний. Заселение нижнего триплетного T_1 состояния может сопровождаться как конформационными перестройками макроцикла, связанными с неплоскостными искажениями макроцикла, так и изменениями самой электронной структуры. Это приводит к изменению и конфигурации контура π -сопряжения электронов в макроцикле, и степени ароматичности макроцикла в целом. Определение степени ароматичности, а также возможность ее изменения с помощью внешних воздействий является важной научной задачей, направленной на создание новых органических соединений с заданными физико-химическими свойствами.

С использованием методов квантовой химии в настоящей работе нами выполнен сравнительный анализ степени ароматичности свободных оснований макроциклических тетрапиррольных соединений, различающихся природой соединительных мостиков между пиррольными фрагментами макроцикла, в основном синглетном S_0 и нижнем возбужденном триплетном T_1 состояниях.

Основная часть. Исследованные соединения (рис. 1) различаются архитектурой формирования макроцикла за счет различных типов соединительных мостиков и их чередования. Природа соединительных мостиков определяет характер электронной коммуникации между отдельными пиррольными фрагментами путем формирования условий для сопряжения π -электронов и образования делокализованной электронной системы. Кроме того, молекулы порфина и тетрагидропорфина различаются степенью насыщения C_b-C_b связей

в двух из четырех пиррольных колец. Гидрирование C_б–C_б связей приводит к снижению молекулярной симметрии макроцикла и оказывает существенное влияние на физико-химические характеристики молекулы [4].

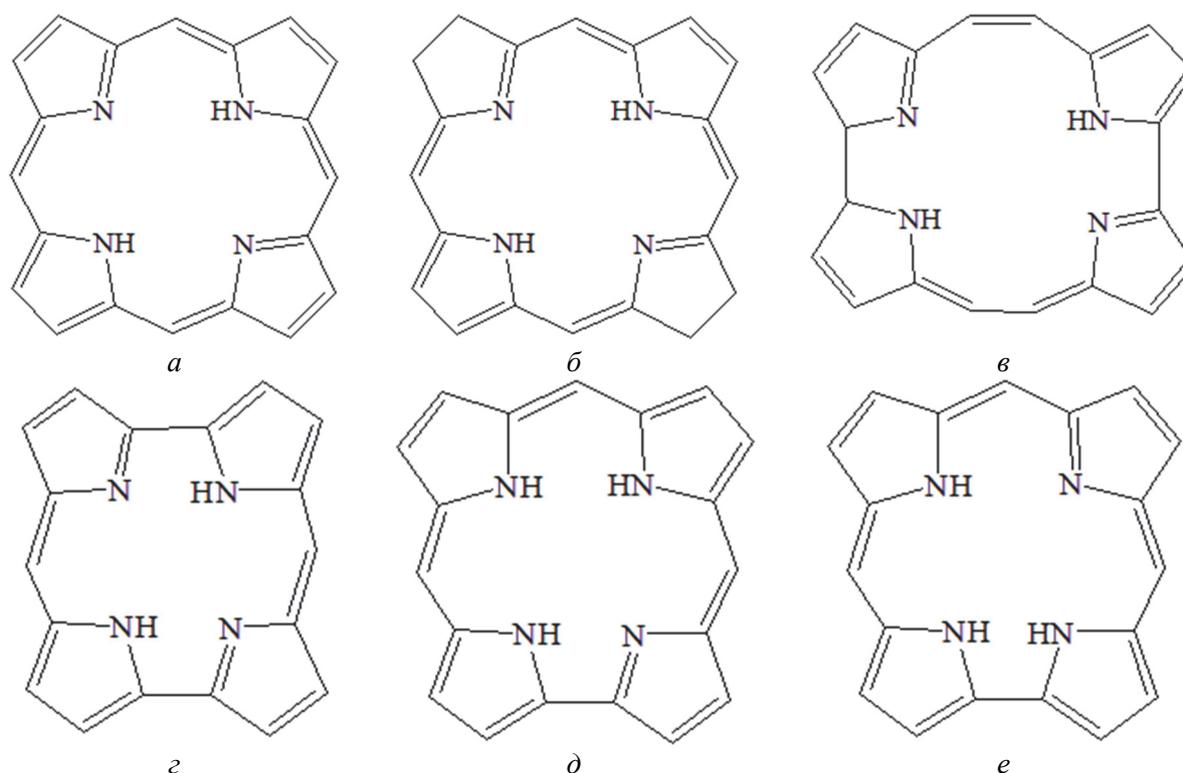


Рис. 1. Молекулярная структура изученных соединений:
a – порфирина; *б* – тетрагидропорфирин; *в* – порфицен;
г – норкоррол; *д* – коррол (T1 таутомер); *е* – коррол (T2 таутомер)

С использованием программного пакета для квантово-химических расчетов «Природа» методом функционала плотности (DFT) с обменно-корреляционным функционалом PBE и трехэкспоненциальным базисом 3z для всех соединений нами выполнена оптимизация молекулярной конформации в основном синглетном S₀ и нижнем возбужденном триплетном T₁ состояниях, а также рассчитан спектр нормальных колебаний. Отсутствие мнимых частот колебательных мод служило критерием достижения стационарной точки. Для оптимизированных структур рассчитаны энергии основного состояния и молекулярных орбиталей, определены длины связей между скелетными атомами макроциклов. Известно, что оптимизация конформации тетрапиррольных молекул методом функционала плотности с учетом электронной корреляции приводит к адекватным значениям длин связей, согласующимся со значениями, полученными методами рентгеноструктурного анализа [5].

Для оценки степени ароматичности молекул был использован структурный критерий НОМА (harmonic oscillator model of aromaticity), основанный на применении индекса ароматичности [6]:

$$I_{\text{НОМА}} = 1 - \sum_{i=1}^2 \frac{\alpha_i}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} (R_i^{\text{опт}} - R_j)^2, \quad (1)$$

где n_1 и n_2 – количество C–C и C–N связей в контуре сопряжения; α_1 и α_2 – эмпирические параметры, определяемые атомами, формирующими данную связь, и равные 257,7 и 93,52 соответственно для C–C связей и C–N связей; $R_1^{\text{опт}} = 1,388 \text{ \AA}$ и $R_2^{\text{опт}} = 1,334 \text{ \AA}$ – оптималь-

ные длины C–C и C–N связей; R_j – длина связи в контуре сопряжения. Применение индекса НОМА основано на степени выравнивания длин связи между атомами макроцикла при π -электронном сопряжении. В ароматических контурах сопряжения индекс НОМА близок к единице, а в неароматических является малым и может быть отрицательным. Индекс ароматичности $I_{\text{НОМА}}$ был вычислен для возможных контуров сопряжений исследованных молекул, удовлетворяющих правилу Хюккеля.

Молекулярная структура тетрапиррольных соединений, имеющих восемь точек ветвления, допускает несколько вариантов контура π -сопряжения, удовлетворяющих правилу Хюккеля. Макроциклы порфирина, тетрагидропорфирина и порфицена включают 26 π -электронов. Для них возможны контуры сопряжения, содержащие 18, 22 и 26 π -электронов, удовлетворяющих правилу Хюккеля при $n = 4, 5$ и 6 соответственно. Возможны четыре контура с 18 π -электронами, шесть контуров с 22 π -электронами и один контур, содержащий все 26 π -электронов. У норкоррола в макроцикле имеется 24 π -электрона, и правилу Хюккеля удовлетворяет пять контуров, имеющих 18 π -электронов, и 7 контуров, содержащих 22 π -электрона. Макроцикл корролов, как и макроцикл порфирина, содержит 26 π -электронов, и правилу Хюккеля удовлетворяют четыре контура с 18 π -электронами, три контура с 22 π -электронами и один контур, содержащий все 26 π -электронов. Мы вычислили индексы ароматичности $I_{\text{НОМА}}$ для всех возможных контуров сопряжения изученных молекул в основном синглетном S_0 и нижнем возбужденном триплетном T_1 состояниях.

Для порфирина наибольшими значениями индекса ароматичности НОМА как в основном S_0 , так и в нижнем триплетном T_1 состояниях обладают четыре контура сопряжения, показанные на рис. 2. Из них три контура содержат 18 π -электронов (Por-1, 2, 3) и один контур – 22 π -электрона (Por-4).

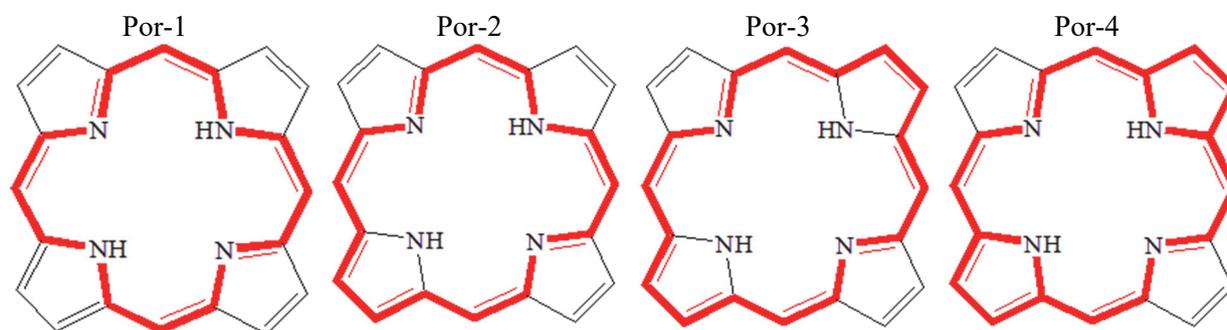


Рис. 2. Доминирующие контуры сопряжения в молекуле порфирина

Значения индекса ароматичности для этих контуров в основном и триплетном состояниях указаны в табл. 1. Для остальных возможных контуров сопряжения индекс ароматичности оказывается в более чем полтора раза меньше по сравнению с данными контурами. Заметим, что для контура Por-2 существует точно такой же контур, отличающийся от данного включением в контур противоположного атома азота. Индексы ароматичности для этих контуров являются одинаковыми. В основном состоянии наибольшим значением индекса ароматичности обладает 18-членный крестоподобный контур сопряжения Por-1, а наименьшим значением – 22-членный контур Шлейера Por-4. В триплетном состоянии ситуация меняется. Значения индексов ароматичности в триплетном состоянии для данных контуров выравниваются. Причем наибольшим значением обладает контур Шлейера Por-4, а наименьшим – крестоподобный контур Por-1. Из сравнения индексов ароматичности следует, что степень ароматичности порфирина в нижнем триплетном состоянии уменьшается по сравнению с основным состоянием.

Таблица 1. Индексы ароматичности $I_{\text{НОМА}}$ для контуров сопряжения порфирина, тетрагидропорфирина и порфицена

Контур сопряжения	Состояние	Молекула		
		Порфирин	Тетрагидропорфирин	Порфицен
Por-1	S_0 :	0,8264	0,8558	0,7707
	T_1 :	0,6547	0,8001	0,3944
Por-2	S_0 :	0,7325	0,8053	0,7054
	T_1 :	0,6656	0,7485	0,4683
Por-3	S_0 :	0,6894	0,8090	0,6747
	T_1 :	0,6685	0,7425	0,5158
Por-4	S_0 :	0,6672	0,7405	0,6607
	T_1 :	0,6756	0,6931	0,5041

Гидрирование C_b-C_b связей пирролиновых колец порфирина не затрагивает контуры сопряжения, изображенные на рис. 2. Поэтому для тетрагидропорфирина максимальными значениями индекса НОМА как для основного S_0 состояния, так и для нижнего триплетного T_1 состояния обладают те же контуры сопряжения табл. 1. По абсолютному значению они оказались больше, чем у молекулы порфирина. Причем в нижнем триплетном состоянии степень ароматичности тетрагидропорфирина, как и у порфирина, уменьшается. С другой стороны, индексы ароматичности, вычисленные для оставшихся контуров, содержащих гидрированные C_b-C_b связи, оказались отрицательными. Причем в основном состоянии они даже меньше, чем в триплетном состоянии. Это свидетельствует, что для этих контуров имеет место разупорядочивание длин связей, которое для основного состояния больше, чем для нижнего триплетного состояния. Как следствие, уменьшение проводимости вдоль участков, содержащих гидрированные C_b-C_b связи, привело к увеличению индексов ароматичности контуров, изображенных на рис. 2 по сравнению с порфирином.

У порфицена ситуация подобна молекуле порфирина. Наибольшими значениями индекса обладают аналогичные порфирину контуры сопряжения (рис. 2). Различие заключается в величине индекса ароматичности НОМА (табл. 1). Как для основного S_0 состояния, так и для нижнего триплетного T_1 состояния индексы ароматичности уменьшились для этих контуров по сравнению с порфирином. Причем для триплетного состояния это уменьшение более значимо, чем для основного состояния. Следует отметить, что для оставшихся возможных контуров сопряжения индексы ароматичности, наоборот, увеличились по сравнению с индексами для порфирина. Для основного состояния это увеличение оказалось более существенным.

Для норкоррола индексы ароматичности всех изученных контуров сопряжения, удовлетворяющих правилу Хюккеля, оказались меньше в основном состоянии, чем в нижнем триплетном состоянии. Доминирующим контуром в основном состоянии является контур, содержащий 18 π -электронов (рис. 3, а) с максимальным значением $I_{\text{НОМА}} = 0,3929$. По сравнению с контурами сопряжения порфирина (рис. 1) в данном контуре проводимость вдоль внешних C_b-C_b связей оказывается большей по сравнению с проводимостью вдоль связей, содержащих атомы азота. В триплетном состоянии проводимость вдоль этих связей увеличивается так, что доминирующим становится 18-электронный контур (рис. 3, б) с индексом ароматичности $I_{\text{НОМА}} = 0,4805$. При этом значение индекса увеличивается в 1,6 раза по сравнению со значением индекса в основном состоянии. Вторым по величине индекса НОМА является контур (рис. 3, а) с $I_{\text{НОМА}} = 0,4402$.

Для T_1 и T_2 таутомеров свободного основания коррола наибольшими значениями индекса ароматичности как в основном S_0 , так и в нижнем триплетном T_1 состояниях обладают контуры сопряжения, содержащие 18 π -электронов. На рис. 4 показаны возможные 18-электронные контуры сопряжения для T_1 и T_2 таутомеров коррола, а в табл. 2 приведены их индексы ароматичности. Доминирующие контуры сопряжения для двух таутомеров различаются как в основном S_0 , так и в нижнем триплетном T_1 состояниях.

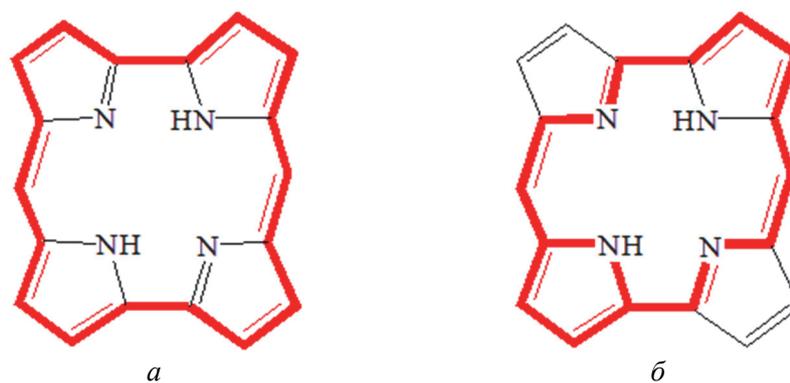


Рис. 3. Доминирующие контуры сопряжения в молекуле норкоррола

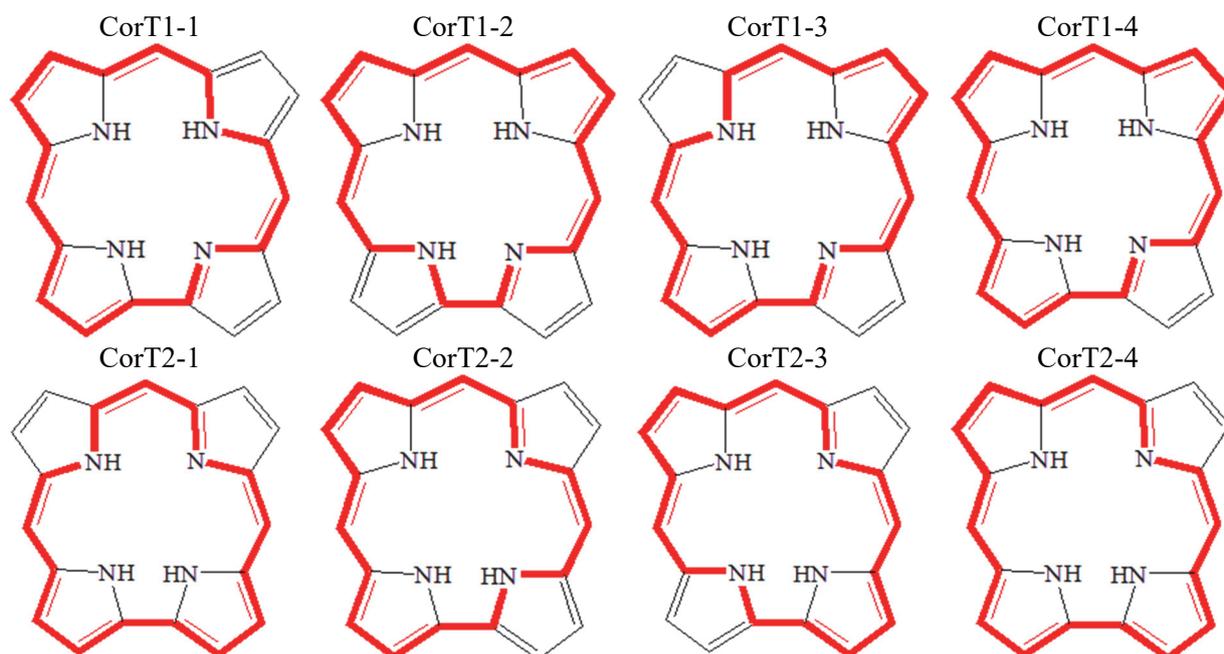


Рис. 4. Контурсы сопряжения, содержащие 18 π -электронов, в макроцикле T1 и T2 таутомеров свободного основания коррола

Таблица 2. Индексы ароматичности $I_{\text{НОМА}}$ для контуров сопряжения NH-таутомеров T1 и T2 свободного основания коррола

CorT1-1	S_0 :	0,6491	CorT2-1	S_0 :	0,5839
	T_1 :	0,5220		T_1 :	0,4794
CorT1-2	S_0 :	0,6485	CorT2-2	S_0 :	0,6421
	T_1 :	0,4747		T_1 :	0,5474
CorT1-3	S_0 :	0,5033	CorT2-3	S_0 :	0,5598
	T_1 :	0,3522		T_1 :	0,4649
CorT1-4	S_0 :	0,6645	CorT2-4	S_0 :	0,5924
	T_1 :	0,5143		T_1 :	0,5238

У длинноволнового таутомера T1 в основном S_0 состоянии для трех контуров сопряжения (CorT1-1, 2, 4) индекс ароматичности имеет приблизительно одинаковые значения, которые значительно превышают значение индекса для контура CorT1-3. Такое поведение индекса ароматичности можно объяснить различной проводимостью вдоль связей, содержащих атомы азота макроцикла. Включение в контур сопряжения CorT1-3 атома азота пиррольного кольца B, расположенного напротив пирроленинового, приводит к

значительному уменьшению индекса ароматичности по сравнению с оставшимися контурами сопряжения. Можно утверждать, что проводимость через внешние атомы углерода пиррольных колец больше проводимости через атомы азота этих колец. Кроме того, следует предположить, что проводимость через атом азота пиррольного кольца, которое расположено напротив пирроленинового, существенно меньше, чем через атомы углерода этого кольца, а проводимость через атомы азота пиррольных колец, соседних с пирролениновым, незначительно меньше проводимости через атомы углерода этих колец. По абсолютному значению индексы ароматичности близки к индексам ароматичности порфирина в триплетном T_1 состоянии.

У коротковолнового таутомера T_2 в основном S_0 состоянии имеется один доминирующий контур сопряжения $CoGT2-2$, для которого индекс ароматичности значимо превышает индексы для других контуров сопряжения. Как и для таутомера T_1 , включение в контур сопряжения $CoGT2-3$ атома азота пиррольного кольца, расположенного напротив пирроленинового, приводит к значительному уменьшению индекса ароматичности этого контура. Сравнение контуров сопряжения между собой показывает, что проводимость через атом азота пиррольного кольца B меньше, а через атом азота кольца D больше, чем через атомы углерода этих колец. По абсолютному значению индексы ароматичности оказались немного меньше, чем для T_1 таутомера.

В триплетном состоянии индексы ароматичности для всех контуров сопряжения уменьшаются по сравнению с основным состоянием. Для T_1 таутомера доминирующим становится контур $CoGT1-1$, а также контур $CoGT1-4$ с близким к нему значением индекса ароматичности. Это означает, что у T_1 таутомера в триплетном состоянии изменяется соотношение проводимости вдоль атома азота и внешних атомов углерода кольца по сравнению с основным S_0 состоянием. Вдоль атома азота кольца C проводимость становится больше, чем через атомы углерода этого кольца, а вдоль атома азота кольца B проводимость остается меньше, чем через атомы углерода этого кольца. Для T_2 таутомера в триплетном состоянии доминирующим остается контур $CoGT2-2$, как и в основном состоянии. Однако имеется контур $CoGT2-4$ с близким к нему значением индекса ароматичности. Таким образом, проводимость вдоль атома азота пиррольного кольца D становится сравнимой с проводимостью вдоль атомов углерода этого кольца. По абсолютному значению доминирующие индексы ароматичности T_2 таутомера в триплетном состоянии оказались немного больше, чем для T_1 таутомера.

Как и для основного S_0 состояния обоих таутомеров, проводимость вдоль атома азота пиррольного кольца, расположенного напротив пирроленинового, оказывается значительно меньше проводимости вдоль внешних атомов углерода кольца. Как следствие, индексы ароматичности контуров сопряжения $CoGT1-3$ и $CoGT2-3$ таутомеров имеют минимальные значения. Индекс ароматичности контура $CoGT1-3$ оказывается почти в 1,5 раза меньше доминирующего значения для таутомера T_1 , а индекс ароматичности контура $CoGT2-3$ всего лишь в 1,2 раза меньше доминирующего для T_2 таутомера. Причем для T_2 таутомера имеется контур сопряжения $CoGT2-1$ с близким значением индекса ароматичности к минимальному значению.

Таким образом, настоящее исследование показало, что в основном состоянии доминирующий вклад в общий ароматический путь порфирина вносят контуры, содержащие 18 π -электронов. В триплетном состоянии к данным контурам сопряжения добавляется 22-членный контур Шлейера. Причем его вклад становится доминирующим. Степень ароматичности молекулы в триплетном состоянии уменьшается, но это не приводит к искажению молекулярной конформации. Гидрирование $S_{\beta}-S_{\beta}$ связей пирролениновых колец порфирина приводит к слабым искажениям плоскостного строения молекулы, которые увеличиваются в триплетном состоянии и локализованы на пирролениновых фрагментах. Поскольку гидрирование не затрагивает доминирующие контуры сопряжения порфирина,

то для тетрагидропорфирина доминирующими остаются те же контуры. В нижнем триплетном состоянии степень ароматичности тетрагидропорфирина, как и у порфирина, уменьшается.

Молекула порфирина, являясь практически плоской, обладает теми же доминирующими контурами сопряжения, что и порфирин. Однако величина индекса ароматичности для доминирующих контуров сопряжения оказалась меньше, чем у порфирина, как в основном, так и в триплетном состояниях. Причем в триплетном состоянии индекс ароматичности в полтора раза меньше, чем в основном состоянии.

Из-за пирамидализации атомов азота у норкоролла доминирующим становится контур сопряжения, замыкающийся по внешним атомам углерода макроцикла и содержащий 18 π -электронов. Для него индекс ароматичности в два раза меньше, чем для молекулы порфирина. В триплетном состоянии пирамидализация атомов азота увеличивается, тем не менее проводимость через атомы восстанавливается, а индекс ароматичности доминирующего контура увеличивается по сравнению с основным состоянием.

Коррол по степени ароматичности занимает промежуточное положение между ароматичным порфирином и антиароматичным норкорролом. Из-за чередующего наклона пиррольных колец относительно средней плоскости макроцикла неплоскостные искажения молекулы коррола оказываются меньшими, чем у норкоррола, как в основном, так и в триплетном состояниях. Вследствие этого доминирующими контурами сопряжения оказываются контуры, содержащие 18 π -электронов. Поведение величины индекса ароматичности можно объяснить различным соотношением между проводимостью через атомы азота и через внешние атомы углерода пиррольных колец. Индексы ароматичности в триплетном состоянии уменьшаются по сравнению с основным состоянием как для T1, так и для T2 таутомера. По абсолютному значению индексы ароматичности в основном состоянии оказались больше для таутомера T1, а в триплетном состоянии для таутомера T2.

Заключение. Используя структурный критерий ароматичности, основанный на применении модели гармонического осциллятора НОМА, мы исследовали степень ароматичности семейства незамещенных тетрапиррольных соединений, различающихся типом соединительных мостиков, в основном синглетном S_0 и нижнем возбужденном триплетном T1 состояниях. Проведенный анализ показал, что при заселении триплетного состояния конфигурация доминирующих контуров сопряжения, а также степень ароматичности макроцикла изменяется, что указывает на справедливость правила Берда об инверсии ароматичности в триплетном состоянии [7]: у ароматических соединений степень ароматичности в триплетном состоянии уменьшается по сравнению с основным состоянием, и наоборот, у неароматических соединений степень ароматичности увеличивается. Указанные изменения связаны как с изменением конфигурационного взаимодействия соединений, так и с конформационными перестройками в макроциклах.

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

Список литературы

1. Excited state aromaticity and antiaromaticity: opportunities for photophysical and photochemical rationalizations / M. Rosenberg [et al.] // Chem. Rev. 2014. Vol. 114. P. 5379–5425.
2. Fliegl H., Sundholm D. Aromatic Pathways of Porphins, Chlorins, and Bacteriochlorins // J. Org. Chem. 2012. Vol. 77, no. 7. P. 3408–34145.
3. Aromaticity from the viewpoint of molecular geometry: application to planar systems / T. M. Krygowski [et al.] // Chem. Rev. 2014. Vol. 114. P. 6383–6422.

4. Крук Н. Н. Структура и оптические свойства тетрапиррольных соединений. Минск: БГТУ, 2019. 216 с.
5. Senge M. O., MacGovan S. A., O'Brien J. Conformational control of cofactors in nature – the influence of protein-induced macrocycle distortion on the biological function of tetrapyrroles // *Chem. Commun.* 2015. Vol. 51, no. 96. P. 17031–17063.
6. Aromaticity as a guiding concept for spectroscopic features and nonlinear optical properties of porphyrinoids / T. Woller [et al.] // *Molecules.* 2018. Vol. 23, no. 6. 1333.
7. Baird N. C. Quantum organic photochemistry. II. Resonance and aromaticity in the lowest $3\pi\pi^*$ state of cyclic hydrocarbons // *J. Am. Chem. Soc.* 1972. Vol. 94, no. 14. P. 4941–4948.

References

1. Rosenberg M., Dahlstrand C., Kilsa K., Ottoson H. Excited state aromaticity and antiaromaticity: opportunities for photophysical and photochemical rationalizations. *Chem. Rev.* 2014. Vol. 114. P. 5379–5425.
2. Fliegl H., Sundholm D. Aromatic Pathways of Porphins, Chlorins, and Bacteriochlorins. *J. Org. Chem.*, 2012, vol. 77, no. 7, pp. 3408–34145.
3. Krygowski T. M., Szatyłowicz H., Stasyuk O. A., Domonikowka J., Palusiak M. Aromaticity from the viewpoint of molecular geometry: application to planar systems. *Chem. Rev.*, 2014, vol. 114, pp. 6383–6422.
4. Kruk M. M. *Stroyeniye i opticheskiye svoystva tetrapirrol'nykh soyedineniy* [Structure and optical properties of tetrapyrrolic compounds]. Minsk, BGTU Publ., 2019. 216 p. (In Russian).
5. Senge M. O., MacGovan S. A., O'Brien J. Conformational control of cofactors in nature – the influence of protein-induced macrocycle distortion on the biological function of tetrapyrroles. *Chem. Commun.*, 2015, vol. 51, issue 96, pp. 17031–17063.
6. Woller T., Geerling P., De Proft F., Champagne B., Alonso M. Aromaticity as a guiding concept for spectroscopic features and nonlinear optical properties of porphyrinoids. *Molecules*, 2018, vol. 23, no. 6. 1333.
7. Baird N. C. Quantum organic photochemistry. II. Resonance and aromaticity in the lowest $3\pi\pi^*$ state of cyclic hydrocarbons. *J. Am. Chem. Soc.*, 1972. vol. 94, no. 14. pp. 4941–4948.

Информация об авторах

Кленицкий Дмитрий Викентьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: klen@belstu.by. SPIN-код: 9078-6126. Scopus ID: 57212376090. ORCID: 0009-0005-7442-7298.

Гладков Лев Львович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физических и математических основ информатики. Белорусская государственная академия связи (ул. Ф. Скорины, 8/2, 220114, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: gladkovlev0@gmail.com. SPIN-код: 2562-2620. Scopus ID: 6603789755. ORCID: 0000-0001-9633-8943.

Вершиловская Ирина Вацлавовна – кандидат биологических наук, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: vershilovskaya@belstu.by. SPIN-код: 5632-2186. Scopus ID: 14061581500. ORCID: 0009-0003-7156-564X.

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by. SPIN-код: 1089-1902. Scopus ID: 7006350701. ORCID: 0000-0002-5214-8301.

Information about the authors

Klenitsky Dmitry Vikentievich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: klen@belstu.by. SPIN code: 9078-6126. Scopus ID: 57212376090. ORCID: 0009-0005-7442-7298.

Gladkov Lev L'vovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Physical and Mathematical Foundations of Informatics. Belarusian State Academy of Communications (8/2 F. Skorina str., 220114, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gladkovlev0@gmail.com. SPIN code: 2562-2620. Scopus ID: 6603789755. ORCID: 0000-0001-9633-8943.

Vershilovskaya Irina Vatslavovna – PhD (Biology), Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vershilovskaya@belstu.by. SPIN code: 5632-2186. Scopus ID: 14061581500. ORCID: 0009-0003-7156-564X.

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by. SPIN code: 1089-1902. Scopus ID: 7006350701. ORCID: 0000-0002-5214-8301.

Поступила 16.01.2026