

УДК 535.37+541.65+543.4

Н. Н. Крук¹, Д. В. Кленецкий¹, В. Маес²

¹Белорусский государственный технологический университет

²Хассельтский университет (г. Дипенбек, Бельгия)

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ АЛКИЛИРОВАННЫХ КОРРОЛОВ

Квантово-химическими методами рассчитана молекулярная конформация тетрапиррольного макроцикла для семейства алкилированных производных свободного основания коррола. Количество присоединенных алкильных заместителей и их расположение на периферии макроцикла определяют характер и степень неплоскостных искажений макроцикла. Степень неплоскостных искажений макроцикла охарактеризована с использованием параметра $\Delta 23$, который представляет собой среднеквадратичное отклонение одного атома от средней плоскости макроцикла $7C$. Обнаружено, что по величине параметра $\Delta 23$ все исследованные соединения могут быть разделены на четыре группы: а) $\Delta 23 = 0,267-0,294 \text{ \AA}$, у которых стерические взаимодействия локализованы на отдельных пиррольных кольцах; б) $\Delta 23 = 0,304-0,326 \text{ \AA}$, у которых формируются стерически напряженные домены из пары пиррольных колец; в) $\Delta 23 = 0,377-0,380 \text{ \AA}$, у которых стерически напряженный домен включает все три *мезо*-положения макроцикла; г) $\Delta 23 = 0,413 \text{ \AA}$ – ундеказамещенный коррол, у которого 11 алкильных групп формируют один стерически напряженный кольцевой домен. Анализ величин отдельных структурных элементов, характеризующих молекулярную конформацию макроцикла, показал, что ряд из них изменяется параллельно изменениям параметра $\Delta 23$. Вместе с тем обнаружено, что амплитуда других структурных возмущений не зависит от общей степени неплоскостного искажения макроцикла, а определяется локальным взаимодействием нескольких соседних заместителей. К таковым относятся величины двух из четырех двугранных углов между плоскостями пиррольных колец и длина $C_\alpha-C_\alpha$ связи в дипиррольном фрагменте.

Ключевые слова: коррол, неплоскостные искажения, периферическое замещение, алкилирование.

M. M. Kruk¹, D. V. Klenitsky¹, W. Maes²

¹Belarusian State Technological University

²Hasselt University (Diepenbeek, Belgium)

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF ALKYLATED CORROLES

Molecular conformation of the tetrapyrrolic macrocycle for the family of alkylated derivatives of the free base corroles has been calculated by quantum-chemical methods. A number of the attached alkyl substituents and their positioning at the periphery of macrocycle determine the character and degree of the nonplanar macrocycle distortions. The degree of the nonplanar macrocycle distortions was treated as the $\Delta 23$ parameter, which is the average least-square deviation from the mean macrocycle plane $C7$ per one macrocycle atom. It was found that all the studied compounds can be divided into four groups based on the value of the $\Delta 23$ parameter: a) $\Delta 23 = 0.267-0.294 \text{ \AA}$ for those compounds where steric hindrances localize on the separate pyrrole rings; b) $\Delta 23 = 0.304-0.326 \text{ \AA}$ for those, where the sterically hindered domains are formed, which consisting of two pyrrole rings; c) $\Delta 23 = 0.377-0.380 \text{ \AA}$ for those, where the one sterically hindered domain includes all three *meso*-positions of macrocycle; d) $\Delta 23 = 0.413 \text{ \AA}$ for undecasubstituted corrole, where all the eleven alkyl groups form one sterically hindered annular domain. The analysis of the separate structural elements characterizing the macrocycle molecular conformation demonstrates that changes of some of them parallel the $\Delta 23$ parameter trend. At the same time it was found that amplitude of the other structural perturbations does not depend on the overall degree of macrocycle distortion, but depends on the local interaction of some neighboring substituents. The two of four dihedral angles values between the pyrrole plane rings and the $C_\alpha-C_\alpha$ bond length in the dipyrrole unit belong to them.

Key words: corrole, nonplanar distortions, peripheral substitution, alkylation.

Введение. Молекулы корролов, как известно, относятся к группе так называемых сокращенных тетрапиррольных макроциклических соединений, поскольку один из атомов углерода в *мезо*-положении отсутствует и два соседних пиррольных фрагмента соединены C_a-C_a связью. Из-за сокращения макроцикла происходит изменение в цепи альтернирования связей π -сопряженного макроциклического контура. Согласно правилу Хюккеля, циклическая π -электронная система является ароматичной при условии, что она содержит $4n + 2$ электронов (где $n = 0, 1, 2, \dots$). При переходе к сокращенному макроциклу корролов это правило удовлетворяется в результате того, что он содержит три пиррольных и одно пирролениновое кольцо, по сравнению с порфириновым макроциклом, содержащим по два пиррольных и пирролениновых кольца. В результате молекула свободного основания коррола содержит в ядре три протона, а не два, как молекулы свободных оснований порфиринов. Три протона не могут разместиться в плоскости ядра тетрапиррольного макроцикла, что влечет за собой нарушение планарного строения макроцикла корролов. Вместе с тем в сокращенном макроцикле корролов уменьшается расстояние между двумя соседними пиррольным и пирролениновым кольцами, что создает условия для формирования внутримолекулярной водородной связи, которая, в свою очередь, способствует планаризации тетрапиррольного макроцикла. Таким образом, в результате воздействия двух факторов формируется непланарная конформация макроцикла. В то же время молекулярная конформация макроцикла коррола будет зависеть от типа периферических заместителей и архитектуры замещения, которые, как показано для порфиринов [1], способны существенно изменить молекулярную конформацию молекулы.

Степень неплоскостных искажений макроцикла корролов может быть охарактеризована с использованием параметра $\Delta 23$, который представляет собой среднеквадратичное отклонение одного атома от средней плоскости макроцикла. Ранее нами было предложено [2], что средняя плоскость макроцикла должна быть выбрана с учетом того, что не все атомы макроцикла являются эквивалентными, и она должна быть одной и той же для двух NH таутомеров, т. е. должна оставаться инвариантной при NH таутомеризации, чтобы анализ геометрических параметров молекулы выполнялся в одном и том же базисе. Таким требованиям удовлетворяет плоскость, определяемая как плоскость с минимальными среднеквадратичными отклонениями макроциклических атомов $C_1, C_4, C_5, C_6, C_9, C_{16}$, и C_{19} , согласно номенклатуре IUPAC

(далее по тексту – 7C плоскость). Данный подход был использован нами при изучении особенностей молекулярной структуры двух NH таутомеров свободного основания коррола и анализе структуры конформеров макроцикла, полученных в результате квантово-химических расчетов и рентгеноструктурного анализа [3–5]. Установлено, что свободному основанию 5,10,15-*мезо*-арилзамещенного коррола и его 18- NO_2 -производному присуща волнообразная конформация, в то время как макроцикл 2,3,5,7,8,10,12,13,15,17,18-ундеказамещенного производного обладает седлообразно искаженным макроциклом. Был сделан вывод о том, что при росте стерических взаимодействий на периферии макроцикла происходит конформационный переход от волнообразного к седлообразному конформеру.

Представляет значительный интерес определить, какие структурные параметры играют ключевую роль в формировании неплоскостных конформеров макроцикла коррола и как связана степень и тип неплоскостных искажений макроцикла с числом периферических заместителей и архитектурой замещения. Решение данных задач являлось целью настоящей работы. Нами проанализирована молекулярная конформация 18 соединений, структура которых была рассчитана квантово-химическими методами. Анализ выполнен для длинноволновых NH таутомеров вышеуказанных соединений. Степень неплоскостных искажений макроцикла варьировалась путем изменения количества присоединенных к макроциклу метильных групп и места их присоединения. Метильные группы были выбраны в качестве индуцирующих неплоскостные искажения фрагментов, поскольку известно [6], что заместители с sp^3 -гибридизованными атомами углерода (алкильные заместители) вносят большее возмущение, чем заместители с sp^2 -гибридизованными атомами углерода (арильные заместители). Ожидалось, что таким образом можно смоделировать молекулярные структуры, существенно различающиеся степенью неплоскостных искажений макроцикла.

Основная часть. Молекулярная структура исследованных алкилированных производных свободного основания коррола приведена на рисунке. Величина степени неплоскостных искажений макроцикла $\Delta 23$ действительно варьируется в широких пределах.

В результате анализа рассчитанных значений степени неплоскостных искажений для оптимизированных молекулярных структур свободных оснований корролов установлено, что зависимость величины $\Delta 23$ от архитектуры периферического замещения подчиняется определенной закономерности (таблица). Все соединения

можно разделить на четыре группы по величине параметра Δ_{23} .

Первую группу составляют соединения, у которых величина Δ_{23} варьируется в пределах от 0,267 до 0,294 Å. К этой группе относятся молекулы незамещенного коррола **1**, а также соединения **2**, **4–7**, **16** и **18**. У алкилированных производных количество присоединенных метильных групп изменяется от трех у коррола **5** до восьми у коррола **4**, что само по себе не может объяснить слабое изменение величины Δ_{23} . Причина, скорее всего, заключается во взаимном расположении присоединенных метильных групп. У всех соединений данной группы ме-

тильные заместители расположены таким образом, что стерические взаимодействия либо локализованы на отдельных пиррольных кольцах, либо вообще пренебрежимо малы (т. е. метильные группы присоединены так, что их сферы Ван-дер-Ваальса не контактируют друг с другом). Таким образом, на периферии макроцикла не формируются силы, деформирующие макроцикл, чтобы минимизировать возмущающее действие заместителей. Отметим, что заместители могут присоединяться как по C_b , так и по C_m атомам макроцикла, но таким образом, что в C_b -положениях пиррольных колец, соседних с замещенным C_m -атомом, заместителей нет.

Структурные параметры исследованных соединений

*№	** Δ_{23} , Å	*** Величина двугранного угла $C_b C_a C_a C_b$, град				Расстояние N-N для пары пирролов, Å						Величина угла $C_a C_m C_a$ для C_m , град			Длина связи $C_1 C_{19}$, Å
		χ_1	χ_2	χ_3	χ_4	AB	BC	CD	DA	BD	AC	C_5	C_{10}	C_{15}	
-	0,281	93,4	32,6	21,2	26,7	2,83	3,02	2,60	2,73	3,80	4,07	121,8	127,3	121,7	1,423
2	0,285	93,1	32,0	21,0	26,4	2,83	3,03	2,60	2,74	3,79	4,08	121,9	127,5	121,8	1,424
3	0,413	117,8	36,0	2,14	43,8	2,87	3,11	2,60	2,76	3,81	4,14	119,9	125,6	121,4	1,431
4	0,272	89,7	27,6	1,88	41,0	2,86	3,02	2,61	2,72	3,78	4,10	122,1	127,6	122,0	1,433
5	0,279	96,3	36,2	18,0	27,7	2,83	3,02	2,59	2,74	3,81	4,07	121,0	126,2	120,9	1,423
6	0,294	94,8	34,6	27,0	22,6	2,83	3,04	2,60	2,77	3,82	4,08	121,8	127,7	121,6	1,419
7	0,267	89,4	29,7	2,51	38,7	2,87	3,01	2,61	2,71	3,78	4,07	122,2	127,1	121,9	1,433
8	0,310	97,6	30,7	3,31	42,5	2,86	3,04	2,57	2,77	3,80	4,10	122,1	127,5	121,1	1,434
9	0,320	97,9	33,7	2,69	42,5	2,83	3,10	2,58	2,76	3,81	4,11	120,8	128,2	121,4	1,433
10	0,323	98,2	31,8	1,56	43,5	2,82	3,11	2,58	2,77	3,79	4,13	120,7	128,6	121,4	1,433
11	0,326	97,2	35,4	5,28	43,0	2,84	3,09	2,58	2,76	3,80	4,11	120,9	126,7	121,4	1,432
12	0,320	103,1	33,1	3,12	40,2	2,90	3,01	2,65	2,70	3,79	4,12	122,0	125,9	122,4	1,429
13	0,377	122,7	41,5	18,6	29,4	2,88	3,12	2,61	2,75	3,83	4,14	119,8	125,8	121,2	1,420
14	0,378	126,9	42,8	17,4	30,0	2,86	3,14	2,59	2,79	3,87	4,13	119,5	125,5	121,4	1,421
15	0,380	120,4	39,8	1,51	41,5	2,89	3,11	2,63	2,72	3,81	4,14	120,0	125,4	121,5	1,428
16	0,268	89,2	31,3	0,45	39,7	2,88	2,99	2,62	2,71	3,78	4,08	122,3	125,8	122,0	1,432
17	0,304	97,9	34,8	0,25	41,7	2,87	3,02	2,59	2,76	3,80	4,10	120,9	126,0	121,1	1,433
18	0,293	94,4	35,7	4,58	37,5	2,86	3,02	2,60	2,72	3,80	4,08	121,0	126,1	121,2	1,430

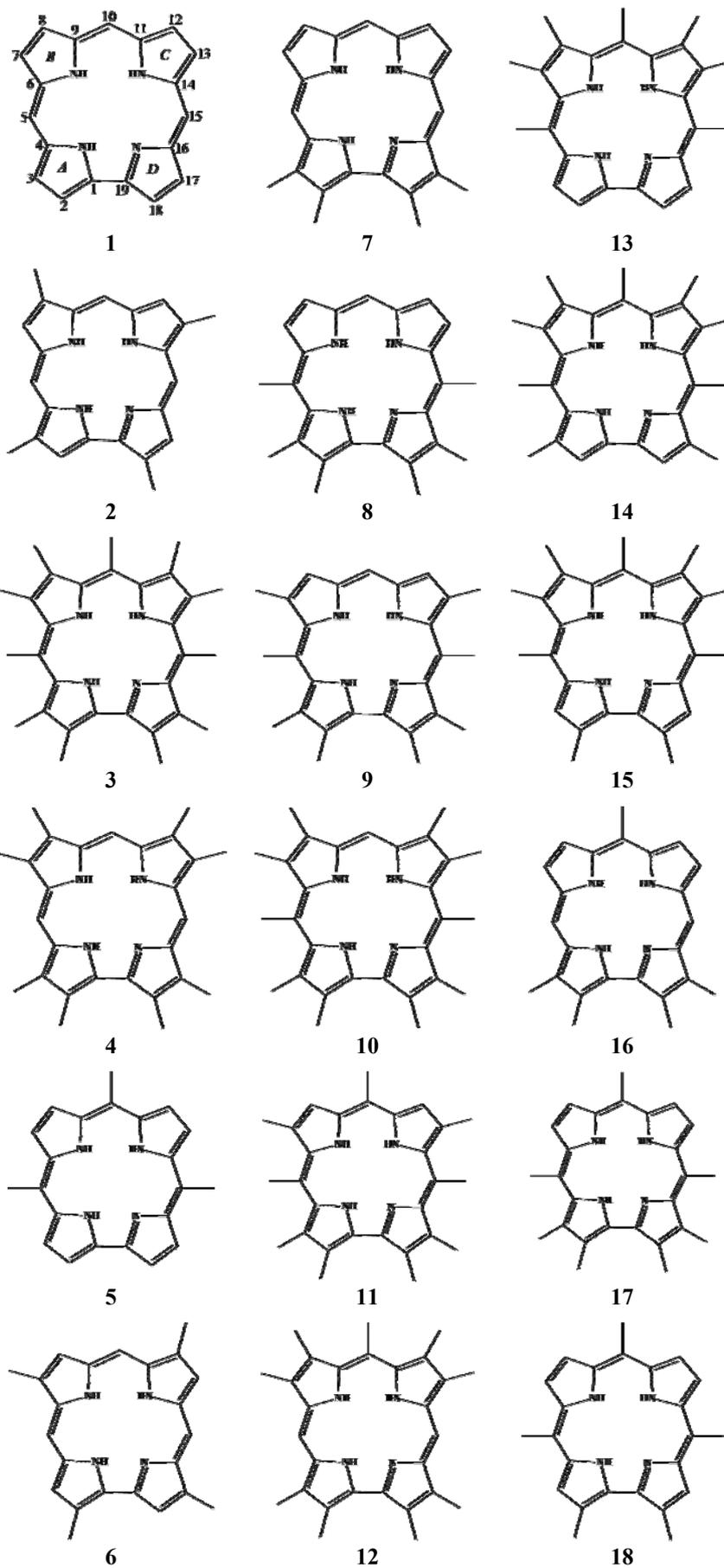
* Наименования исследованных соединений: **1** – незамещенный коррол; **2** – 3,8,13,18-тетраметил-коррол; **3** – 2,3,5,7,8,10,12,13,15,17,18-ундекаметил-коррол; **4** – 2,3,7,8,12,13,17,18-октаметил-коррол; **5** – 5,10,15-триметил-коррол; **6** – 2,7,12,17-тетраметил-коррол; **7** – 2,3,17,18-тетраметил-коррол; **8** – 2,3,5,15,17,18-гексаметил-коррол; **9** – 2,3,5,7,13,15,17,18-октаметил-коррол; **10** – 2,3,5,7,8,12,13,15,17,18-декаметил-коррол; **11** – 2,3,5,7,10,13,15,17,18-нонаметил-коррол; **12** – 2,3,7,8,10,12,13,17,18-нонаметил-коррол; **13** – 5,7,8,10,12,13,15-септаметил-коррол; **14** – 3,5,7,8,10,12,13,15,17-нонаметил-коррол; **15** – 2,5,7,8,10,12,13,15,18-нонаметил-коррол; **16** – 2,3,10,17,18-пентаметил-коррол; **17** – 2,3,5,10,15,17,18-септаметил-коррол; **18** – 2,5,10,15,18-пентаметил-коррол.

** Величина среднеквадратичного отклонения атомов от средней плоскости тетрапиррольного макроцикла Δ_{23} рассчитывалась по формуле

$$\Delta_{23} = \sqrt{\frac{1}{23} \sum_{i=1}^{23} \Delta z_i^2},$$

где Δz_i – отклонение i -го атома макроцикла от средней плоскости макроцикла 7С.

*** Величина двугранного угла определялась как: χ_1 – $C_3 C_4 C_6 C_7$; χ_2 – $C_8 C_9 C_{11} C_{12}$; χ_3 – $C_{13} C_{14} C_{16} C_{17}$; χ_4 – $C_{18} C_{19} C_1 C_2$.



Структура и нумерация исследованных соединений

Ко второй группе относятся соединения, у которых $\Delta 23 = 0,304\text{--}0,326 \text{ \AA}$. Для соединений этой группы характерно наличие метильных групп в соседних C_b и C_m положениях. Метильная группа в C_m положении макроцикла является мостиком, обеспечивающим коммуникацию стерических взаимодействий между соседними пиррольными кольцами, в результате чего формируются стерически напряженные домены, состоящие из пары пиррольных колец. Таких доменов может быть либо один (соединение **12**), либо два (соединения **8–11**, **17**). Очевидно, что у корролов **8** и **17** стерические взаимодействия будут слабее, поскольку коммуникация между пиррольными кольцами идет по цепи $C_b\text{--}C_m\text{--}H$, в отличие от остальных соединений данной группы, у которых реализуется цепочка $C_b\text{--}C_m\text{--}C_b$. Рассчитанная величина параметра $\Delta 23$ согласуется с таким предположением: у корролов **8** и **17** величина $\Delta 23$ равна соответственно $0,310$ и $0,304 \text{ \AA}$, а для соединений **9–11** она выше и находится в диапазоне от $0,320$ до $0,326 \text{ \AA}$. Следует отметить, что, по видимому, стерические возмущения, возникающие в одном домене $C_8\text{--}C_{10}\text{--}C_{12}$ (соединение **12**), оказывают на макроцикл свободного основания коррола такое же влияние, как возмущения, формируемые одновременно в двух доменах $C_3\text{--}C_5\text{--}C_7$ и $C_{13}\text{--}C_{15}\text{--}C_{17}$ (соединения **9–11**). На это указывают практически одинаковые величины параметра $\Delta 23$ для этих соединений.

Третья группа соединений характеризуется параметром $\Delta 23$, лежащим в пределах от $0,377$ до $0,380 \text{ \AA}$. Для соединений этой группы (**13–15**) стерически напряженный домен включает все три C_m -положения макроцикла. Однако, так как число метильных групп составляет семь либо девять, стерические взаимодействия не охватывают часть тетрапиррольного макроцикла. Замещение всех одиннадцати периферических протонов метильными группами в ундеказамещенном корроле **3** формирует один стерически напряженный кольцевой домен на периферии макроцикла. Соединение **3** логично выделить в отдельную четвертую группу, так как величина неплоскостных искажений макроцикла для него $\Delta 23 = 0,413 \text{ \AA}$, что существенно больше, чем у третьей группы соединений **13–15**. Очевидно, при замещении происходят как неплоскостные деформации макроцикла, так и изменения длин связей и валентных углов – так называемые плоскостные деформации, локализованные в плоскости макроцикла (от англ. «in plane deformations»). Для соединений третьей группы часть энергии стерических взаимодействий заместителей диссипирует путем плоскостных деформаций, а при формировании стерически напряженного кольцевого

домена в ундеказамещенном корроле **3**, по видимому, происходят дополнительные неплоскостные деформации, о чем свидетельствует величина параметра $\Delta 23$.

Величина параметра $\Delta 23$ по определению представляет собой обобщенный параметр и не несет информации о характере структурных перестроек тетрапиррольного макроцикла. Вместе с тем сведения о том, какие структурные элементы макроцикла претерпевают наибольшие изменения, а какие остаются практически без изменений (если таковые есть), существенны для направленного синтеза молекулярных структур с заданной молекулярной конформацией. Проанализируем, как ведут себя ключевые параметры, которые описывают структуру тетрапиррольного макроцикла.

Характер неплоскостных искажений макроцикла в первую очередь характеризуется углами отклонения пиррольных колец от средней плоскости макроцикла, либо величиной двугранных углов χ между плоскостями пиррольных колец. Рассчитанные величины двугранных углов χ_1 и χ_2 в общем отражают тенденцию поведения параметра $\Delta 23$ (таблица). Однако величины двугранных углов χ_3 и χ_4 отражают локальную перестройку макроцикла коррола при определенной архитектуре замещения, а не общую тенденцию, описанную выше. Для соединений **1**, **2**, **5**, **6**, **13**, **14** величины углов χ_3 и χ_4 значительно отличаются от величин, определенных для всех остальных соединений. Очевидно, что в данном случае стерические взаимодействия периферических заместителей оказывают специфическое влияние на положение пиррольных колец C , D и A . Данная группа соединений отличается от остальных структур тем, что они не замещены в положениях C_2 и C_{18} , т. е. взаимодействие между пиррольными кольцами D и A опосредовано только $C_a\text{--}C_a$ связью и взаимодействием атомов азота пиррольного и пирроленинового колец D и A . Следует отметить, что расстояние N-N для всех исследованных соединений изменяется слабо. Поэтому логично предположить, что основным возмущающим фактором для этого структурного фрагмента является отталкивание метильных групп в положениях C_2 и C_{18} . Для соединений **1**, **2**, **5**, **6**, **13**, **14** такое возмущение отсутствует и двугранный угол χ_4 составляет $26\text{--}30^\circ$, а угол $\chi_3 = 18\text{--}22^\circ$. При замещении положений C_2 и C_{18} величина угла χ_4 резко увеличивается до $37\text{--}43^\circ$, чтобы минимизировать возникающие силы отталкивания. В то же время величина угла χ_3 уменьшается до нескольких градусов, что обеспечивает дипиррольному фрагменту CA практически копланарное расположение. Кроме этого для соединений **1**,

2, 5, 6, 13, 14 длина связи C_1C_{19} составляет 1,419–1,424 Å, что заметно меньше, чем для остальных соединений. Необходимо отметить, что у соединений **12, 15, 18** длина связи C_1C_{19} имеет промежуточное значение 1,428–1,430 Å, у них стерически напряженные домены, состоящие из пар пиррольных колец *B* и *C*, *D* и *A* в некоторой степени изолированы друг от друга. Возникающие при замещении положений C_2 и C_{18} силы отталкивания частично минимизируются не путем увеличения длины связи C_1C_{19} , а поворотом пиррольных колец *D* и *A*, на что указывает уменьшение межатомного расстояния N-N.

Среди других структурных параметров следует отметить, что межатомное расстояние N-N для пиррольных колец *A* и *C* постепенно увеличивается с ростом значения параметра $\Delta 23$, что указывает на возрастание асимметрии тетрапиррольного макроцикла. Величины углов $C_aC_mC_a$ на метиновых мостиках изменяются слабо, однако в целом ведут себя согласно изменениям параметра $\Delta 23$.

Заключение. В работе методами квантовой химии рассчитана молекулярная конформация тетрапиррольного макроцикла семейства метил-

замещенных производных свободного основания коррола, различающихся архитектурой замещения. Установлено, что все исследованные соединения могут быть разделены на четыре группы, различающиеся по величине неплоскостных искажений макроцикла, охарактеризованной с использованием параметра $\Delta 23$: а) $\Delta 23 = 0,267\text{--}0,294$ Å, у которых стерические взаимодействия локализованы на отдельных пиррольных кольцах; б) $\Delta 23 = 0,304\text{--}0,326$ Å, у которых формируются стерически напряженные домены из пары пиррольных колец; в) $\Delta 23 = 0,377\text{--}0,380$ Å, у которых стерически напряженный домен включает все три мезо-положения макроцикла; г) $\Delta 23 = 0,413$ Å – ундеказамещенный коррол, у которого 11 алкильных групп формируют один стерически напряженный кольцевой домен. Обнаружено, что ряд структурных элементов, характеризующих молекулярную конформацию макроцикла, изменяется параллельно изменениям параметра $\Delta 23$, но в то же время конформационные изменения отдельных фрагментов определяются локальным взаимодействием нескольких соседних заместителей и не зависят от общей степени неплоскостного искажения макроцикла.

Литература

1. Nonplanar porphyrins and their significance in proteins / J. A. Shelnutt [et al.] // *Chemical Society Reviews*. 1998. Vol. 27, no. 1. P. 31–41.
2. Molecular structures and absorption spectra assignment of corrole NH tautomers / W. Beenken [et al.] // *Journal of Physical Chemistry, A*. 2014. Vol. 118, no. 3. P. 862–871.
3. Кленицкий Д. В., Крук Н. Н. Анализ неплоскостных искажений макроцикла свободного основания коррола // *Труды БГТУ*. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 44–46.
4. Кленицкий Д. В., Крук Н. Н. Взаимосвязь типа периферического замещения макроцикла корролов и характера его неплоскостных искажений // *Труды БГТУ*. 2015. № 4: Химия, технол. орган. веществ и биотехнол. С. 24–28.
5. Кленицкий Д. В., Крук Н. Н., Маес В. Сравнительный анализ структуры тетрапиррольного макроцикла свободных оснований три-, тетра- и ундеказамещенных корролов // *Труды БГТУ*. Сер. 2, Химические технологии, биотехнология, геоэкология. 2017. № 1. С. 23–28.
6. Senge M. O. Exercises in molecular gymnastics – bending, stretching and twisting porphyrins // *Chem. Commun.* 2006. P. 243–256.

References

1. Shelnutt J. A., Song X., Ma J., Jia S., Jentzen W., Medforth C. J. Nonplanar porphyrins and their significance in proteins. *Chemical Society Reviews*, 1998, vol. 27, no. 1, pp. 31–41.
2. Beenken W., Presselt M., Ngo T. H., Dehaen W., Maes W., Kruk M. M. Molecular structures and absorption spectra assignment of corrole NH tautomers. *Journal of Physical Chemistry, A*, 2014, vol. 118, no. 3, pp. 862–871.
3. Klenitsky D. V., Kruk M. M. Analysis of the nonplanar distortions of the free base corrole macrocycle. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2014, no. 6: Physics and mathematics sciences and informatics, pp. 44–46 (In Russian).
4. Klenitsky D. V., Kruk M. M. Relationship between the corrole macrocycle peripheral substitution type and character of its nonplanar distortion. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 4: Chemistry, technology of organic substances and biotechnology, pp. 24–28 (In Russian).
5. Klenitsky D. V., Kruk M. M., Maes W. Comparative analysis of tetrapyrrolic macrocycle structure of tri-, tetra- and undecasubstituted free base corroles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series 2, Chemical engineering, biotechnology, geoecology, 2017, no. 1, pp. 23–28 (In Russian).

6. Senge M. O. Exercises in molecular gymnastics – bending, stretching and twisting porphyrins. *Chem. Commun.*, 2006, pp. 243–256.

Информация об авторах

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by

Кленицкий Дмитрий Викентьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: klen@belstu.by

Маес Воутер – кандидат химических наук, профессор. Хассельтский университет (г. Дипенбек, B-3590, Бельгия). E-mail: wouter.maes@uhasselt.be

Information about the authors

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by

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

Maes Wouter – PhD (Chemistry), Professor. Hasselt University (B-3590, Diepenbeek, Belgium). E-mail: wouter.maes@uhasselt.be

Поступила 28.11.2017