

УДК 535.37+541.65+543.4

Н. Н. Крук¹, Д. В. Кленецкий¹, Л. Л. Гладков², В. Маес³

¹Белорусский государственный технологический университет

²Белорусская государственная академия связи

³Хассельтский университет (Бельгия)

ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ НА ЭНЕРГИЮ НИЖНИХ ВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИНГЛЕТНЫХ И ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ СВОБОДНЫХ ОСНОВАНИЙ КОРРОЛОВ

Квантово-химическими методами определен тип неплоскостных искажений тетрапиррольного макроцикла для ряда производных свободного основания коррола. Показано, что седлообразный тип неплоскостных искажений присущ двум соединениям с наибольшими значениями параметра $\Delta 23$, равными 0,380 и 0,413 Å; конформеры со значением параметра $\Delta 23 = 0,304-0,326$ Å следуют характеризовать как пограничные структуры, в которых одно из пиррольных колец лежит в плоскости 7C; остальные соединения имеют волнообразный тип неплоскостных искажений. С использованием полуэмпирического метода ZINDO/S рассчитаны энергии вертикальных $S_0 \rightarrow S_1$ и $S_0 \rightarrow T_1$ переходов и установлено, что с ростом степени неплоскостных искажений макроцикла, которая характеризовалась параметром $\Delta 23$, наблюдается линейный рост величины энергетического зазора $\Delta E(S_1-T_1)$ между нижними возбужденными S_1 и T_1 состояниями. Отмечено, что величина $\Delta E(S_1-T_1)$ различается для соединений с близкими значениями параметра $\Delta 23$, но различной длиной $C_\alpha-C_\alpha$ связи в дипиррольном фрагменте. При этом наклон линейной зависимости в обоих случаях в пределах ошибки близок и составляет $6600-7900 \text{ см}^{-1}\text{Å}^{-1}$. В триплетном T_1 состоянии оба NH таутомера 5,10-мезитил-15-2,6-дихлоропиримидинил-коррола обладают более искаженным макроциклом по сравнению с основным S_0 состоянием, причем величины параметра $\Delta 23$ равны 0,330 и 0,246 для таутомеров T1 и T2 соответственно при одинаковой длине $C_\alpha-C_\alpha$ связи.

Ключевые слова: свободное основание коррола, неплоскостные искажения макроцикла, замещение, энергия электронных состояний.

M. M. Kruk¹, D. V. Klenitsky¹, L. L. Gladkov², W. Maes³

¹Belarusian State Technological University

²Belarusian State Academy of Communications

³Hasselt University (Belgium)

INFLUENCE OF THE MOLECULAR STRUCTURE ON THE ENERGY OF LOWEST EXCITED ELECTRONIC SINGLET AND TRIPLET STATES OF THE FREE BASE CORROLES

The type of nonplanar distortions of tetrapyrrolic macrocycle for the family of the free base corrole derivatives has been determined by quantum-chemical methods. The saddle type of nonplanar distortions was shown to take place for two derivatives with extremely high $\Delta 23$ values which amount to 0.380 and 0.413 Å; conformers with $\Delta 23 = 0.304-0.326$ Å must be characterized as the marginal ones, in these compounds one pyrrole ring lies in the 7C plane; the other derivatives have the wave type of nonplanar distortions. The energies of two vertical $S_0 \rightarrow S_1$ and $S_0 \rightarrow T_1$ transitions were calculated with the semiempirical ZINDO/S method, and has been found that an increase in the degree of the macrocycle nonplanar distortions (taken $\Delta 23$ value) has been followed by linear growth of the $\Delta E(S_1-T_1)$ energy gap between the lowest S_1 and T_1 states. It has been pointed out that $\Delta E(S_1-T_1)$ value differs for the derivatives with close $\Delta 23$ values but different $C_\alpha-C_\alpha$ bond length in the dipyrrole unit. The linear dependence slope in both cases is about the same within the experimental error and amounts $6600-7900 \text{ cm}^{-1} \text{Å}^{-1}$. In triplet T_1 state both NH tautomers of the 5,10-mesityl-15-2,6-dichloropyridiminyll-corrole have more distorted macrocycle as compared to that in the ground S_0 state, have the same $C_\alpha-C_\alpha$ bond length and their $\Delta 23$ values are 0.330 and 0.246 for T1 and T2 tautomers, respectively.

Key words: free base corrole, nonplanar macrocycle distortions, substitution, energy of electronic state.

Введение. Семейство тетрапиррольных соединений, родоначальником которого является молекула порфина, включает в себя группы макрогетероциклических соединений, в которых два соседних пиррольных (пирролениновых) кольца соединяются между собой C_a-C_a связью. К таким соединениям относятся порфицены и корролы. Однако если первые представляют собой структурные изомеры молекулы порфина, то последние формируют группу так называемых сокращенных тетрапиррольных макроциклических соединений, поскольку фрагменты макроцикла, соединяющие пиррольные кольца, содержат на один атом углерода меньше. Сокращение макроцикла в корролах приводит к тому, что он содержит три пиррольных и одно пирролениновое кольцо, в отличие от порфиринового макроцикла, содержащего два пиррольных и два пирролениновых кольца. Наличие в ядре сокращенного тетрапиррольного макроцикла корролов трех протонов приводит к нарушению планарности тетрапиррольного макроцикла, поскольку сумма Ван-дер-Ваальсовских радиусов протонов превышает диаметр ядра. Протоны не могут разместиться в плоскости ядра, что влечет за собой: а) альтернированное (вверх-вниз-вверх) отклонение пиррольных колец от средней плоскости макроцикла (по существу, отклонение представляет собой поворот пиррольного кольца относительно оси, проходящей через C_a атомы углерода пиррольного кольца); б) пирамидализацию пиррольных атомов азота, в результате чего они приобретают частичную sp^3 -гибридизацию [1]. Следует отметить, что уменьшение расстояния между двумя соседними пиррольными и пирролениновыми кольцами в сокращенном макроцикле корролов благоприятствует формированию внутримолекулярной водородной связи, которая, в свою очередь, способствует планаризации тетрапиррольного макроцикла. В результате воздействия данных факторов, даже при отсутствии стерических взаимодействий периферических заместителей, формируется непланарная конформация тетрапиррольного макроцикла корролов. Как и для порфиринов [2], тип периферических заместителей и архитектура замещения существенно влияют на степень неплоскостных искажений макроцикла свободных оснований корролов, которую можно охарактеризовать с помощью параметра $\Delta 23$ [3], который представляет собой среднеквадратичное отклонение одного макроциклического атома от средней плоскости макроцикла, определенной 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 – 7С плоскость) [1].

С использованием данного подхода нами изучены особенности молекулярной структуры двух NH таутомеров свободного основания коррола и проанализирована степень неплоскостных искажений структуры конформеров макроцикла, которая была определена в результате либо путем оптимизации геометрии молекулы квантово-химическими методами или методами рентгеноструктурного анализа [3–6]. Установлено, для NH таутомеров свободных оснований 5,10,15-триарилзамещенных корролов характерна волнообразная конформация, в то время как макроцикл 5,10,15-триарил-2,3,7,8,12,13,17,18-октаалкил-коррола обладает седлообразно искаженным макроциклом. Было предложено, что при росте стерических взаимодействий на периферии макроцикла происходит конформационный переход от волнообразного к седлообразному конформеру. Анализ величины $\Delta 23$ для длинноволновых NH таутомеров 18 алкилзамещенных корролов, степень неплоскостных искажений которых варьировалась путем изменения количества присоединенных к макроциклу метильных групп и мест их присоединения, показал, что величина $\Delta 23$ изменяется от 0,281 Å у незамещенной молекулы до 0,413 Å у молекулы ундекаметил-коррола [3].

Очевидно, что такие существенные изменения молекулярной конформации макроцикла свободных оснований корролов должны отразиться на спектрально-люминесцентных и фотофизических характеристиках данных соединений. Поэтому представляет значительный интерес установление взаимосвязи между типом, степенью неплоскостных искажений макроцикла и спектральными характеристиками молекул, определение структурных параметров, играющих ключевую роль в формировании спектральных характеристик [7].

Одной из наиболее существенных особенностей спектрально-люминесцентных характеристик свободных оснований корролов по сравнению со свободными основаниями порфиринов является значительно большая величина энергетического зазора между нижними возбужденными синглетным и триплетным состояниями $\Delta E(S_1-T_1)$, которая достигает 5500 см^{-1} [8]. В настоящей работе нами определен тип неплоскостных искажений макроцикла, рассчитаны энергии вертикальных $S_0 \rightarrow S_1$ и $S_0 \rightarrow T_1$ переходов для семейства алкилзамещенных корролов, степень неплоскостных искажений которых изучалась нами в предыдущей работе [3]. Кроме того, для двух NH таутомеров свободного основания 5,15-мезитил-10-(4,6-дихлоропиримидинил)-коррола (далее в тексте – **AB**₂ коррол) оптимизирована геометрия молекулы в нижнем возбужденном триплетном состоянии. На основании

совокупности полученных результатов проанализирована взаимосвязь молекулярной структуры и положения нижних возбужденных синглетного и триплетного состояний свободных оснований корролов.

Основная часть. Молекулярная структура исследованных алкилированных производных свободного основания коррола приведена на рис. 1.

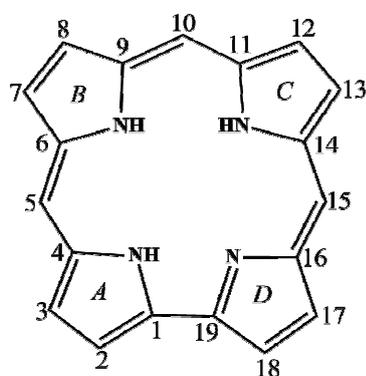
Результаты анализа типа неплоскостных искажений тетрапиррольного макроцикла семейства свободных оснований алкилированных производных коррола **1–18** указывают на то, что между типом неплоскостных искажений и их степенью (величина параметра $\Delta 23$) существует определенная взаимосвязь. В целом можно предположить, что вероятность формирования конформера седлообразного типа возрастает по мере увеличения степени неплоскостных искажений. Седлообразный тип искажений наблюдается для соединений **3** и **15**, пиррольные фрагменты альтернативно наклонены вверх и вниз относительно средней плоскости макроцикла *7C*. При этом следует отметить, что из-за асимметрии сокращенного тетрапиррольного макроцикла для обоих производных величина наклона пиррольных колец прогрессивно уменьшается в ряду пиррол *A* > пиррол *B* > пиррол *C* > пиррол *D* (см. рис. 2). Вместе с тем следует отметить, что у соединений **13** и **14**, имеющих практически такую же величину параметра $\Delta 23$, как и соединения **15**, неплоскостные искажения имеют волнообразный тип. В этом случае три из четырех пиррольных колец наклонены в одну сторону от средней плоскости макроцикла. Ось волнообразных искажений проходит через пиррольные кольца *B* и *D*, поэтому они наклонены в разные стороны от средней плоскости. Длина связи C_1C_{19} для соединений **3** и **15** составляет 1,431 и 1,429 Å, что заметно больше, чем для соедине-

ний **13** и **14**, у которых длина связи C_1C_{19} имеет значение 1,420 и 1,431 Å. По видимому, причина отличий в типе неплоскостных искажений заключается в том, что у соединений **13** и **14**, нет стерического взаимодействия внутри дипиррольного домена *AD* из-за отсутствия метильных заместителей в положениях C_2 и C_{18} . Напротив, у соединений **3** и **15** метильные группы в положениях C_2 и C_{18} отталкиваются, что увеличивает длину связи C_1C_{19} и создает благоприятные условия для минимизации энергии макроцикла путем формирования седлообразного конформера.

Соединения, у которых величина $\Delta 23 = 0,304–0,326$ Å (соединения **8–12**, **17**), обладают пограничной молекулярной конформацией, особенностью которой является то, что пиррольное кольцо *D* практически лежит в средней плоскости макроцикла (см. рис. 2). Ранее отмечено [3], что у корролов **8** и **17** стерические взаимодействия слабее, в результате чего пиррольное кольцо *D* имеет очень слабый наклон в направлении, противоположном наклону кольца *B*. Поэтому их можно все же рассматривать как волнообразно искаженные макроциклы, а соединения **9–12** представляют собой конформеры с пограничным типом неплоскостного искажения макроцикла.

Остальные соединения обнаруживают четкий волнообразный тип неплоскостных искажений макроцикла (см. рис. 2), при котором три из четырех пиррольных колец наклонены в одну сторону от средней плоскости макроцикла.

Нами изучена зависимость величины энергетического зазора $\Delta E(S_1-T_1)$ между нижними возбужденными S_1 и T_1 состояниями от параметра $\Delta 23$ для соединений **1–18**. Величина $\Delta E(S_1-T_1)$ рассчитывалась как разница между энергиями вертикальных $S_0 \rightarrow S_1$ и $S_0 \rightarrow T_1$ переходов с использованием полуэмпирического метода ZINDO/S.



- 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.

Рис. 1. Структура, нумерация атомов и название исследованных соединений (согласно номенклатуре IUPAC)

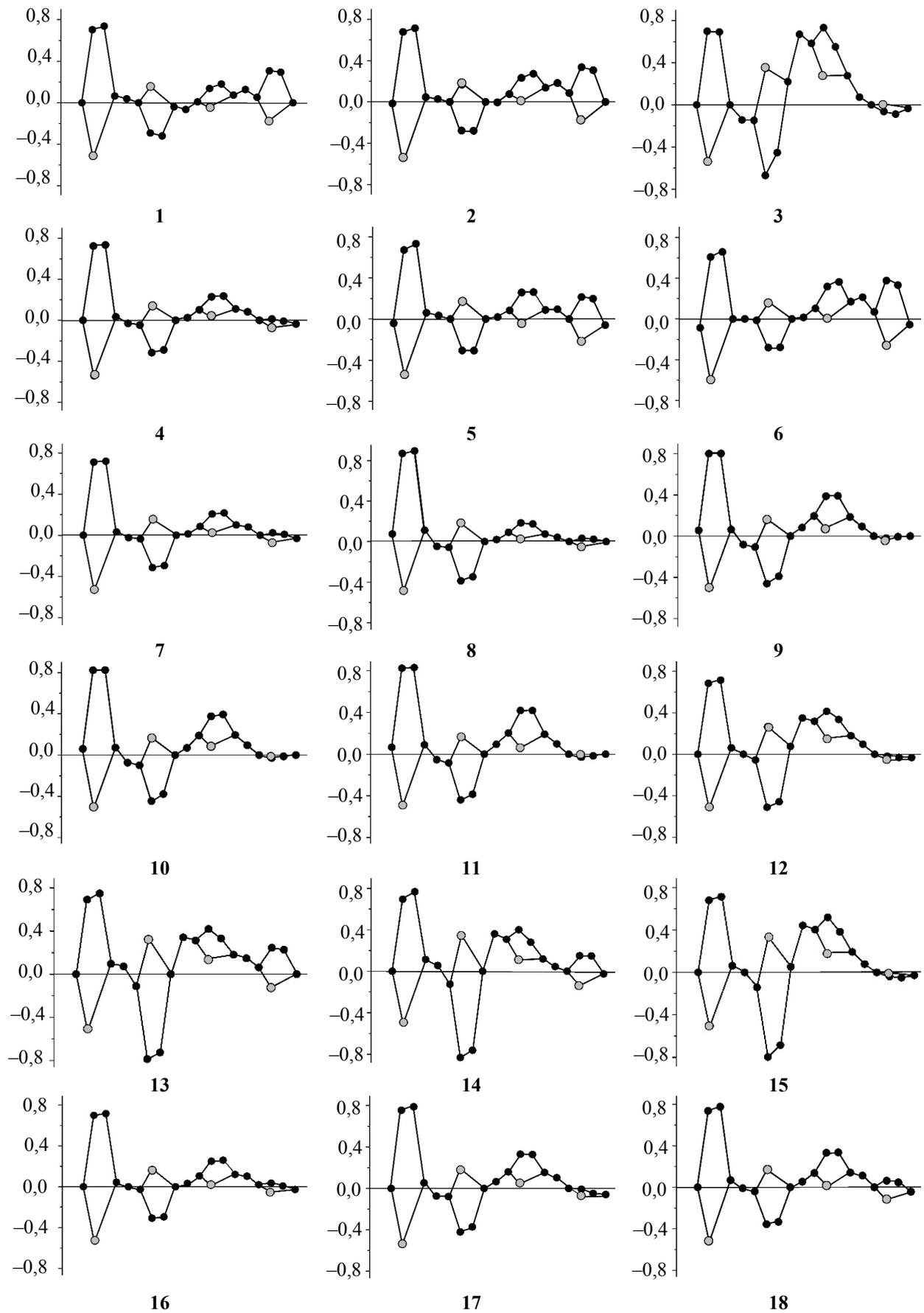


Рис. 2. Диаграмма отклонений атомов макроцикла (Å) от средней плоскости макроцикла 7С

Полученная зависимость приведена на рис. 3. Заметим, что для удобства анализа по оси ординат отложена не сама величина зазора, а ее изменение относительно величины, рассчитанной для молекулы незамещенного свободного основания коррола **1**. Очевидно, что с ростом степени неплоскостных искажений тетрапиррольного макроцикла величина $\Delta E(S_1-T_1)$ возрастает, но разброс рассчитанных значений достаточно большой для того, чтобы говорить о характере зависимости, если такая имеется. Однако если разделить весь массив данных для соединений **1–18** на две части, используя в качестве параметра длину связи C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте, то зависимость величины $\Delta E(S_1-T_1)$ от параметра $\Delta 23$ явно проявляется для каждой из частей. Так, для соединений с длиной связи C_1C_{19} более 1,430 Å (белые круги) обнаруживается линейная зависимость с коэффициентом наклона $6600 \text{ см}^{-1}\text{Å}^{-1}$ и коэффициентом парной корреляции 0,86. Для соединений с длиной связи C_1C_{19} 1,421–1,429 Å (черные круги) среднеквадратичная ошибка параметров линейной зависимости оказывается выше, однако коэффициент парной корреляции равен 0,88, что позволяет говорить о наличии корреляции двух величин. Коэффициент наклона во втором случае равен $7900 \text{ см}^{-1}\text{Å}^{-1}$. С учетом перекрытия среднеквадратичных ошибок можно считать, что коэффициенты наклона в обоих случаях близки.

Необходимо подчеркнуть, что разделение по длине связи C_1C_{19} нельзя трактовать как разделение соединений на седлообразно и волнообразно искаженные конформеры. Очевидно, что длина связи C_1C_{19} отражает различия в электронной структуре исследуемых соединений, однако взаимосвязь здесь более сложна, чем в случае молекулярной конформации. С одной стороны, длина связи C_1C_{19} может быть связана с размерами сопряженной π -системы макроцикла коррола, а с другой – она отражает баланс между непланарными и планарными искажениями структуры макроцикла. Количественная оценка влияния совокупности этих факторов на электронную структуру требует дополнительных теоретических и экспериментальных исследований.

Следует отметить, что, вероятно, за исключением стерически затрудненных свободных оснований ундеказамещенных производных коррола, тетрапиррольный макроцикл в молекулах корролов обладает возможностью для конформационной релаксации/перестройки при заселении возбужденных состояний и межмолекулярных взаимодействий в растворах. Особый интерес вызывает молекулярная конформация в нижнем возбужденном триплетном T_1 состоянии.

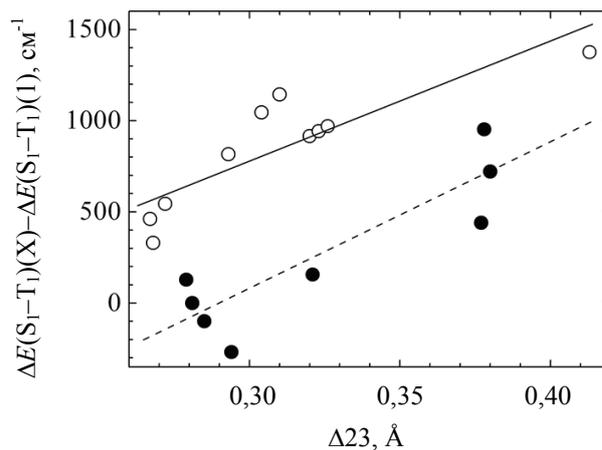


Рис. 3. Зависимость относительного изменения величины $\Delta E(S_1-T_1)$ от параметра $\Delta 23$ для соединений с длиной связи C_1C_{19} : ● – не более 1,429 Å; ○ – 1,430 Å и более

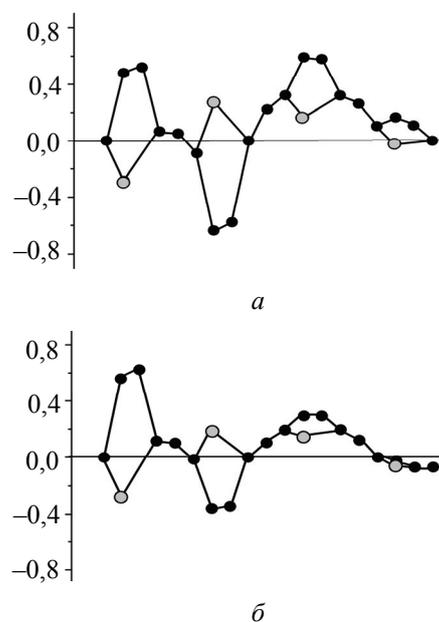


Рис. 4. Диаграмма отклонений атомов макроцикла (Å) от средней плоскости макроцикла 7C для таутомеров T1 (а) и T2 (б) AB_2 корролла

С этой целью методом функционала плотности с использованием программы [9] была оптимизирована молекулярная структура двух NH таутомеров AB_2 корролла, свойства триплетных состояний которого были исследованы нами ранее [8]. Диаграмма отклонений атомов макроцикла от средней плоскости макроцикла для двух таутомеров AB_2 корролла приведена на рис. 4.

В отличие от основного S_0 состояния, где тип и степень неплоскостных искажений для двух NH таутомеров оказались очень близкими [1, 5], в триплетном T_1 состоянии таутомеры AB_2 корролла существенно различаются. Так, таутомер T1 имеет выраженные неплоскостные

искажения волнообразного типа, в то время как таутомер Т2 проявляет пограничную структуру, в которой пиррольное кольцо D имеет очень слабый наклон в направлении, противоположном наклону кольца B . С другой стороны, величина параметра Δz равна 0,330 и 0,246 Å для таутомеров Т1 и Т2 соответственно, т. е. в нижнем триплетном состоянии таутомер Т1 обладает существенно более неплоской структурой. К этому следует добавить, что степень неплоскостных искажений при заселении триплетного Т1 состояния увеличивается для обоих NH таутомеров, так как в основном состоянии параметр Δz равен 0,200 и 0,199 Å для таутомеров Т1 и Т2 соответственно [5].

Длина связи C_1C_{19} в триплетном Т1 состоянии увеличивается до 1,452–1,454 Å. Принимая во внимание возрастание параметра Δz , данный факт следует расценивать как свидетельство одновременного роста неплоскостных и плоских искажений тетрапиррольного макроцикла в триплетном состоянии. Рассчитанная энергия излучательного $T_1 \rightarrow S_0$ перехода из нижнего триплетного состояния коротковолнового таутомера [8] согласуется с экспериментальным значением максимума полосы фосфоресценции с точностью 300 см^{-1} .

Заключение. Таким образом, на основании совокупности полученных теоретических результатов и их анализа совместно с экспериментальными данными можно предложить объяснение большой величины энергетического зазора $\Delta E(S_1-T_1)$ между нижними возбужденными S_1 и T_1 состояниями. По нашему мнению, причина заключается в том, что безызлучательный $S_1 \rightarrow T_1$ переход сопровождается значительной конформационной релаксацией, способствующей понижению энергии T_1 состояния фосфоресцирующего Т2 таутомера. Для величины энергетического зазора $\Delta E(S_1-T_1)$ более важным оказывается не степень неплоскостных искажений, а их тип. В случае длинноволнового Т1 таутомера интеркомбинационный $S_1 \rightarrow T_1$ переход происходит между состояниями с одинаковым волнообразным типом неплоскостных искажений. Потенциальные поверхности исходного и конечного состояний пересекаются таким образом, что разница в энергии между минимумами двух потенциальных кривых относительно невелика. Напротив, в случае коротковолнового Т2 таутомера при интеркомбинационной $S_1 \rightarrow T_1$ конверсии меньшее по величине изменение параметра Δz достигается при большем выигрыше в энергии.

Литература

1. 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.
2. Senge M. O. Exercises in molecular gymnastics – bending, stretching and twisting porphyrins // *Chem. Commun.* 2006. P. 243–256.
3. Крук Н. Н., Кленицкий Д. В., Маес В. Квантово-химическое исследование молекулярной структуры алкилированных корролов // *Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика*. 2018. № 1. С. 36–42.
4. 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.
5. Кленицкий Д. В., Крук Н. Н. Взаимосвязь типа периферического замещения макроцикла корролов и характера его неплоскостных искажений // *Труды БГТУ*. 2015. № 4: Химия, технол. орган. в-в и биотехнология. С. 24–28.
6. Кленицкий Д. В., Крук Н. Н., Маес В. Сравнительный анализ структуры тетрапиррольного макроцикла свободных оснований три-, тетра- и ундеказамещенных корролов // *Труды БГТУ. Сер. 2, Хим. технологии, биотехнология, геоэкология*. 2017. № 1. С. 23–28.
7. Correlation of photophysical parameters with macrocycle distortion in porphyrins with graded degree of saddle distortion / B. Röder [et al.] // *Photochem. Photobiol. Sci.* 2010. Vol. 9. P. 1152–1158.
8. Phosphorescence of free base corroles / V. N. Knuykshto [et al.] // *RCS Advances*. 2016. Vol. 6. P. 43911–43915.
9. Laikov D. N. Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets // *Chem. Phys. Lett.* 1997. Vol. 281. P. 151–156.

References

1. 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.
2. Senge M. O. Exercises in molecular gymnastics – bending, stretching and twisting porphyrins. *Chem. Commun.*, 2006, pp. 243–256.

3. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Quantum-chemical study of the molecular structure of alkylated corroles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2018, no. 1, pp. 36–42 (In Russian).

4. 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. Informatics, pp. 44–46 (In Russian).

5. 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, Organic Substances Technology and Biotechnology, pp. 24–28 (In Russian).

6. 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, Biotechnologies, Geoecology, 2017, no. 1, pp. 23–28 (In Russian).

7. Röder B., Büchner M., Rückmann I., Senge M. O. Correlation of photophysical parameters with macrocycle distortion in porphyrins with graded degree of saddle distortion. *Photochem. Photobiol. Sci.*, 2010, vol. 9, pp. 1152–1158.

8. Knuykshto V. N., Ngo H. T., Dehaen W., Maes W., Kruk M. M. Phosphorescence of free base corroles. *RCS Advances*, 2016, vol. 6, pp. 43911–43915.

9. Laikov D. N. Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets. *Chem. Phys. Lett.*, 1997, vol. 281, pp. 151–156.

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

Гладков Лев Львович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры высшей математики. Белорусская государственная академия связи (220114, г. Минск, ул. Ф. Скорины, 8/2, Республика Беларусь). E-mail: llglad@tut.by

Маес Вouter – кандидат химических наук, профессор. Хассельтский университет (г. Дипенбек, В-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

Gladkov Lev L'vovich – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, the Department of Higher Math. Belarusian State Academy of Communications (8/2, F. Skorina str., 220114, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: llglad@tut.by

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

Поступила 30.11.2018