———— ФОТОНИКА ———

УДК 541.14+543.42

ФОТОНИКА БИС-18-КРАУН-6-СОДЕРЖАЩЕГО ДИСТИРИЛБЕНЗОЛА И ЕГО КОМПЛЕКСОВ С ПЕРХЛОРАТАМИ МЕТАЛЛОВ

© 2019 г. Л. С. Атабекян^{*a*, *}, В. Г. Авакян^{*a*, *b*}, А. К. Чибисов^{*a*}, С. П. Громов^{*a*, *c*}, С. З. Вацадзе^{*a*, *c*}, В. Н. Нуриев^{*a*, *c*}, А. В. Медведько^{*a*, *c*}

^аЦентр фотохимии РАН, ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН Россия 119421 Москва, ул. Новаторов 7а, кор. 1

^bФедеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики РАН Россия 142432 Черноголовка, просп. Акад. Семенова, 1

^сФедеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова", химический факультет

Россия 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

**E-mail: levat51@mail.ru* Поступила в редакцию 29.08.2018 г.

После доработки 15.10.2018 г. Принята к публикации 23.10.2018 г.

Методами абсорбционной, люминесцентной и лазерной кинетической спектроскопии исследованы фотопроцессы бис-(18-краун-6)-1,4-дистирилбензола (ДСБ) и его комплексов с перхлоратами калия, бария и свинца в MeCN. Молекулы ДСБ в триплетном состоянии участвуют в процессе деградации энергии электронного возбуждения наряду с процессами *цис-транс*-изомеризации и флуоресценции. Спектр триплет-триплетного поглощения имеет несколько максимумов в области 500–700 нм. Наиболее эффективный интеркомбинационный переход в триплетное состояние наблюдается для комплекса с перхлоратом свинца, сопровождающийся падением квантового выхода флуоресценции ДСБ и отсутствием *транс-цис*-изомеризации.

Ключевые слова: бис-(18-краун-6)-1,4-дистирилбензол, лазерный импульсный фотолиз, флуоресценция, комплексообразование, *транс-цис*-изомеризация, триплетное состояние, квантово-химические расчеты, методы DFT и TDDFT, структура возбужденных состояний, биссэндвичевые комплексы состава 2 : 2 с ионами металлов

DOI: 10.1134/S0023119319020025

ВВЕДЕНИЕ

Одними из перспективных в практическом отношении фотоактивных веществ являются краунсодержащие соединения и в частности бискраунсодержащие 1,4-дистирилбензолы (ДСБ), молекулы которых содержат С=С-связи. Молекулы этих соединений проявляют способность к самосборке в супрамолекулярные ансамбли при комплексообразовании с катионами металлов. Для соединений этого типа характерны относительно высокие квантовые выходы флуоресценции [1, 2]. Наличие в структуре молекулы двух связей С=С приводит к появлению возможностей фотопереключения [3, 4]. Свойства ДСБ делают их привлекательными объектами также для создания на их основе светочувствительных материалов для регистрации информации. Обрамление молекул ДСБ краун-эфирными фрагментами способствует протеканию ряда процессов, к числу которых относятся комплексообразование, а также процессы ассоциации, обусловленные способностью ионов металлов связывать между собой несколько бискраунсодержащих ДСБ. Свойства хромофора ДСБ ранее были исследованы нами [5] на примере тетраметокси-1,4-дистирилбензола, в котором четыре метоксигруппы моделировали влияние включенных в цепь сопряжения ДСБ атомов кислорода двух краун-эфирных фрагментов. Для изучения комплексов с металлами было проведено замещение метокси- на краун-эфирные фрагменты.

Объектами исследования в настоящей работе явились бис-(18-краун-6)-1,4-дистирилбензол (I) и его комплексы с перхлоратами калия, бария и свинца. Целью работы было изучение методом лазерной кинетической спектроскопии фотопревращений красителя I и его комплексов с металлами, установление существования промежуточных продуктов фотореакции и в частности триплетного состояния I и его комплексов. Экспериментальные исследования сопровождались квантово-химическими расчетами, выполненными методом DFT.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Бис-(18-краун-6)-1,4-дистирилбензол I получали по методике [6].



Схема 1. Структура бис-(18-краун-6)-1,4-дистирилбензола I.

Спектры поглощения красителя I в основном состоянии измеряли на спектрофотометре "Agilent 8453". Спектры люминесценции регистрировали на спектрофлуориметре "Varian Eclipse". Измерение разностных спектров поглощения фотопродуктов и кинетики их превращения проводили на установке наносекундного лазерного фотолиза [7]. Облучение осуществляли с помощью 3-й гармоники лазера Solar ($\lambda = 355$ нм). Растворенный кислород удаляли барботированием раствора аргоном. Для стационарного облучения растворов красителей применяли лампу ДКСШ-150 со светофильтром УФС-2. Для измерения квантовых выходов флуоресценции в качестве стандарта использовали 9,10-дифенилантрацен (квантовый выход 0.92 в этаноле [8]). Точность измерения квантовых выходов – 10%. Перхлораты калия (моногидрат), свинца (тригидрат) и бария ("Merck") использовали без дополнительной очистки. Измерения проводили в смеси MeCN с СН₂Сl₂ в соотношении 9:1, соответственно. Применяли спектрально чистый MeCN (осч, сорт 0, "Криохром") и CH₂Cl₂ (Aldrich). Все измерения проводили при комнатной температуре.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Целью проведения квантово-химических расчетов явилась необходимость интерпретации измеренных в работе спектров поглощения и люминесценции, определение положения уровней энергии оптических переходов.

Расчеты проводили методом DFT (программа Priroda [9], функционал PBE [10] в трехэкспонентном базисе волновых функций [10], метод А). Этим методом были рассчитаны: (1) структуры, свободная энергия и колебательные спектры двух конформеров I симметрии C_i и C_{2v} в основном состоянии.

Оптимизация геометрий *транс*- и *цис*-изомеров **I**, в основном и возбужденном состояниях S₁, а также расчеты энергий переходов для поглоще-

ХИМИЯ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ том 53 № 2 2019

ния были проведены по программе ORCA [12] методом TDDFT в базисе SVP [13] с функционалом PBE0 (метод Б) [9]. Учет влияния растворителя (MeCN/CH₂Cl₂) на энергию переходов и соответствующие им значения λ_{max} был проведен в приближении модели поляризуемого континуума (PCM) с использованием COSMO [14] по программе ORCA в рамках метода Б.

В настоящее время какие-либо данные о структуре комплексов I с перхлоратами металлов, кроме ограниченных данных об их стехиометрии [6], отсутствуют. Они могут быть получены путем квантово-химических расчетов, что представляет собой отдельную задачу, выходящую за рамки изучения методом лазерной кинетической спектроскопии фотопревращений I и его комплексов. Данные о структуре и энергии образования комплексов I с перхлоратами металлов будут представлены в отдельной статье. Однако частично эти данные использованы нами при расчетах энергий оптических переходов.

В молекуле красителя I имеется четыре одинарных связи (см. схему 1), вращение вокруг которых приводит к существованию шести конформеров. По аналогии с тетраметокси-1,4-дистирилбензолом (II) было предположено, что термодинамически наиболее выгодными являются конформеры I симметрии C_i и $C_{2\nu}$. Согласно проведенному расчету оптимальной геометрии методом А, различие в значениях свободной энергий ΔG между \mathbf{I}_{Ci} и \mathbf{I}_{C2v} составило -0.22 ккал/моль. Это значит, что в соответствии с фактором Больцмана, первый конформер присутствует в равновесной смеси в незначительно преобладающем количестве (59%). В этой связи в данной работе все расчеты были проведены для конформера I_{Ci}, обозначаемого далее как І. Было проведено сравнение рассчитанных методом Б значений λ_{max} , соответствующих переходам $S_0 \rightarrow S_1$ для обоих конформеров I_{Ci} и I_{C2} . Различие составляло 2 нм (402 и 400 нм), соответственно. В табл. 1 приведены расчетные данные

Молекулы и комплексы	ΔE	$S_0, E_{полн}{}^a$	$\lambda_{\max}^{\delta}, S_0 \rightarrow S_1$	E^{s}	$S_1, E_{полн}$
$I-C_i$	0	-2530.72038	402.0/2.86 ²	3.08	-2530.68313
цис-І	3.2^{∂}	-2530.71527	398.4/1.56	3.11	-2530.67802
$I-C_i$ (PCM)	_	-2530.84354	403.6/2.84	3.07	-2530.73065
$I-K^{+}$ (PCM)	_	-3130.49291	398.6/2.75	3.11	-3130.37859

Таблица 1. Полные энергии I ($E_{\text{полн}}$) в S₀, и S₁ состояниях и энергии переходов S₀ \rightarrow S₁ (E), рассчитанные методом DFT/PBE0

 ${}^{a}E_{\text{полн}}$, а.е. ${}^{\delta}\lambda_{\text{max}}$, нм. ${}^{e}E$ – энергия перехода $S_0 \rightarrow S_1$, эB. ${}^{e}f$ – сила осциллятора, отн. ед. ${}^{\partial}$ Разность свободных энергий (ΔE , ккал/моль) I- C_i и цис-I в основном состоянии.

полных энергий **I** (E_{total}) в S₀ и S₁ состояниях и энергии переходов, полученные методом Б.

РЕЗУЛЬТАТЫ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ И ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

На рис. 1 представлен спектр поглощения I. Спектр I слабо разрешен и состоит из полосы с $\lambda_{max} = 372$ нм и двух плеч с максимумам при 390 и 355 нм.

Сравнение со спектром II [5], имеющего тот же хромофор, свидетельствует о сходстве спектров, хотя спектр I смещен на ~10 нм в коротковолновую область, имеет меньшее разрешение и кроме того, отсутствует пик при 412 нм, относящийся к 0-0 переходу в II. Считая, что начало полосы приходится



Puc. 1. Спектры поглощения **I** в отсутствие (*1*) и в присутствии Pb(ClO₄)₂ (*2*), Ba(ClO₄)₂ (*3*) и KClO₄ (*4*). Концентрация – $I - 2.5 \times 10^{-5}$, солей металлов – 2.5×10^{-4} моль/л. На вставке: спектры поглощения **I** до (*1*) и после (*2*) УФ-облучения ($\lambda = 355$ нм) лазерными импульсами.

Nº 2

2019



Рис. 2. Спектры флуоресценции I в отсутствие (*1*) и в присутствии $Ba(ClO_4)_2$ (*2*), $KClO_4$ (*3*) и $Pb(ClO_4)_2$ (*4*). Концентрация – I – 2.5 × 10⁻⁶, солей металлов – 2.5 × 10⁻⁵ моль/л.

на 390 нм, разность частот между ним и максимумом на 372 нм составляет, $\Delta v = 1281 \text{ см}^{-1}$, а между ним и плечом на 355 нм – $\Delta v = 2569 \text{ см}^{-1}$. Расчет колебательного спектра I (метод А) показал, что в спектре имеется полносимметричное колебание класса симметрии A_g, относящееся к растяжению/сжатию центральной группировки молекулы C=C-Ph-C=C с частотой v_{Ag} 1281 см⁻¹. Следовательно, максимум на 372 нм относится к вибронному переходу v_{Ag} в полосе поглощения, тогда как плечо на 355 нм – к 2v_{Ag}, поскольку разность $\Delta v = 2569 \text{ см}^{-1}$ близка к удвоенному значению 1281 см⁻¹.

В присутствии перхлоратов металлов в спектрах I имеет место гипсохромный сдвиг максимума поглощения на 5 нм и уменьшение коэффициента экстинции при сохранении формы полосы. Для объяснения причины гипсохромного сдвига в работе был проведен расчет энергии перехода (*TE*) $S_0 \rightarrow S_1$ в приближении поляризованного континуума (PCM) с учетом влияния растворителя (MeCN/CH₂Cl₂, $\varepsilon = 32.85$) серии I_{vacuo} , I_{solv} и I · K⁺ в рамках метода Б с использованием COSMO [14]. Рассчитанным величинам *TE* соответствовали следующие значения λ_{max} (нм) и сил осцилляторов (отн. ед.): 403, 2.86; 404, 2.85; 399, 2.75 (табл. 1).

Сравнение показывает, что значение λ_{max} комплекса $\mathbf{I} \cdot \mathbf{K}^+$ действительно претерпевает гипсохромный сдвиг на 5 нм и обнаруживает незначительное ослабление (на 0.1 отн. ед.) силы осциллятора. Следовательно, наблюдаемый в эксперименте слабый гипсохромный сдвиг полос поглощения комплексов вызван эффектом полярного растворителя.

На вставке рис. 1 показано изменение спектра поглощения I после лазерного УФ облучения. Спектры флуоресценции I в отсутствие (1) и в присутствии $Ba(ClO_4)_2$ (2), $KClO_4$ (3) и $Pb(ClO_4)_2$ (4) представлены на рис. 2. В результате образования комплексов I с катионами металлов интенсивность флуоресценции I и квантовый выход уменьшаются в присутствии перхлоратов калия и свинца, тогда как в присутствие Ba(ClO₄)₂ возрастает как общая интенсивность спектра, так и особенно интенсивность высокочастотной компоненты при 403 нм, которую по аналогии с II можно отнести к 0-0 переходу [5]. Разность между этим максимумом и наиболее интенсивным пиком на 422 нм составляет 1134 см⁻¹. Для интерпретации вибронной структуры спектров поглощения, были рассчитаны частоты нормальных колебаний I по методу А.

Соединение	Ι	$\mathbf{I} \cdot \mathrm{Ba}(\mathrm{ClO}_4)_2$	$\mathbf{I} \cdot \mathrm{KClO}_4$	$\mathbf{I} \cdot \operatorname{Pb}(\operatorname{ClO}_4)_2$
Квантовый выход, ф	0.97	0.87	0.68	0.40
Коэффициент экстинкции, л/моль · см $^{-1}$	7.4×10^{4}	5.6×10^{4}	2.1×10^{4}	6.3×10^{4}

Таблица 2. Квантовые выходы флуоресценции и коэффициенты экстинции (в максимумах полос поглощения) I и комплексов с катионами металлов

Согласно проведенному расчету, в колебательном спектре I проявляется полносимметричное колебание класса A_g 1154 см⁻¹, связанное с растяжением (сжатием) углеродного скелета хромофора. В этой связи пик при 422 нм был отнесен к вибронному переходу в спектре флуоресценции I. Заметим, что в поглощении и флуоресценции активны разные колебательные моды I, согласно правилам отбора, относящиеся оба к полносимметичному классу A_g . Такая картина не является уникальной. Например, в спектрах поглощения и флуоресценции пирена вибронные переходы также принадлежат к разным полносимметричным колебаниям скелета молекулы [15].

Из сопоставления рис. 1 и 2 следует, что форма спектра флуоресценции комплекса I с $Ba(ClO_4)_2$ заметно отличается от формы спектров флуоресценции комплексов I с другими перхлоратами. Отличие между формами возможно обусловлено тем, что молекулы в основном и возбужденном состояниях принадлежат к разным типам симметрии.

В табл. 2 приведены значения коэффициентов экстинкции и квантовые выходы флуоресценции I и комплексов I с катионами свинца, бария и калия.

Видно, что значения квантовых выходов флуоресценции уменьшаются в ряду катионов $Ba^{2+} > K^+ > Pb^{2+}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ КИНЕТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

На рис. 3 представлены разностные спектры фотоиндуцированного поглощения, измеренные при лазерном облучении обескислороженного раствора I. Спектры измерены через 5, 15 и 105 мкс после окончания лазерного импульса. На вставке показана кинетическая кривая изменения оптической плотности обескислороженного раствора I, характеризующая превращение соединения в долгоживущий продукт фотореакции. Разностный спектр представляет собой набор нескольких полос в спектре триплет-триплетного (T–T) поглощения. Сравнение с разностным спектром, полученным при лазером фотолизе II, имеющего тот же хромофор, демонстрирует общее сходство. На рис. 4 представлены кинетические кривые изменения оптической плотности воздушнонасыщенного и обескислороженного растворов **I**, измеренных при 540 и 610 нм.

Кривые (2) на рис. 4 могут быть интерпретированы как наложение кривых, отражающих процесс *цис* \rightarrow *транс*-перехода (рис. 4, кривая (1)) и T-T поглощения, о чем свидетельствует влияние кислорода воздуха на кинетику изменения оптической плотности. Схожие кривые изменения фотоиндуцированной оптической плотности раствора наблюдается при 690 нм, соответствующей еще одному максимуму в полосе наведенного поглощения (рис. 3). Время *цис* \rightarrow *транс*-изомеризации составляет около 10 мс ($k \approx 500 \text{ c}^{-1}$).

В присутствии перхлоратов бария и калия (рис. 5) спектр фотоиндуцированного поглощения подобен спектру, приведенному на рис. 3.

Сходство спектров I, II, а также I в присутствии солей бария и калия свидетельствует о том, что во всех случаях имеют место фотопревращения хромофора, являющегося общим для всех соединений.

Представленные на рис. 6 кинетические кривые, измеренные для воздушнонасыщенных и обескислороженных растворов I в присутствии катиона калия, свидетельствуют в пользу участия триплетного состояния в фотохимических превращениях.

На рис. 7 представлены разностные спектры и кинетические кривые фотоиндуцированного изменения поглощения раствора I в присутствии $Pb(ClO_4)_2$. В присутствии $Pb(ClO_4)_2$ не наблюдается процесс *цис-транс*-изомеризации, но имеет место интеркомбинационная конверсия в триплетное состояние, стимулированная ионом Pb^{2+} , демонстрирующая "внешний эффект тяжелого атома". Также имеет место падение относительного выхода флуоресценции (табл. 1) с симбатным увеличением выхода триплетных молекул.

Таким образом, спектр, представленный на рис. 7, относится к T–T поглощению с максимумом полосы при 510 нм и константой скорости



Рис. 3. Разностные спектры фотоиндуцированного поглощения обескислороженного раствора I. Концентрация – 2.5×10^{-5} моль/л. На вставках: кинетическая кривая изменения оптической плотности при $\lambda = 380$ нм и моменты времени измерения спектров после окончания лазерного импульса.

интеркомбинационной конверсии в основное состояние $k = 1 \times 10^5 \text{ c}^{-1}$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Спектры поглощения и люминесценции. В табл. 1 представлены рассчитанные методом Б значения полных энергий I в основном и синглетно-возбужденном состояниях и энергии переходов. Из полученных данных следует, что длина волны (λ_{max}), соответствующая рассчитанной энергии перехода, составляет 402 нм, что близко к экспериментально найденному значению. Для цис-I, положение энергетического уровня которого в основном состоянии выше на 3.2 ккал/моль, рассчитанный максимум поглощения смещен на 3.6 нм в коротковолновую область спектра, и сила осциллятора перехода на 0.7 отн.ед. меньше, чем для **I**-*C_i*. Полученный результат расчета согласуется с экспериментом.

В табл. З приведены значения λ_{max} полос T–T поглощения, найденные в экспериментах по лазерному фотолизу I и его комплексов с перхлоратами бария, калия и свинца.

В таблице полученные данные сопоставлены с расчетными и экспериментальными данными для II, имеющего тот же хромофор [5]. Отнесения полос поглощения к переходам $T_1 \rightarrow T_n$ для I и его комплексов с перхлоратами бария и калия сделаны на основании сходства со спектрами T–T поглощения II. Из сравнения максимумов поглощения следует, что, кроме визуального сходства, спектры T–T поглощения I и его комплексов сходны по форме и значениям максимумов



Рис. 4. Кинетические кривые изменения оптической плотности воздушнонасыщенного (1) и обескислороженного (2) растворов I. $\lambda = 540$ нм (а) и 610 нм (б).

поглощения с аналогичными данными для II и его изомеров. Следовательно для I, так же как и для II, имеет место наложение спектров, отражающих процессы фотоиндуцированной *транс* \rightarrow \rightarrow *цис*-изомеризации и T-T поглощения, о чем свидетельствует влияние кислорода воздуха на кинетику изменения оптической плотности. Исключение составляет спектр T-T поглощения для комплекса I с перхлоратом свинца, для которого в спектре преобладает одна интенсивная полоса на 510 нм, обусловленная присутствием Pb²⁺ ("внешний эффект тяжелого атома").

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Процессы деградации энергии фотовозбуждения I включают в себя флуоресценцию, *трансцис*-изомеризацию, интеркомбинационную кон-



Рис. 5. Разностные спектры фотоиндуцированного поглощения обескислороженного раствора I в присутствии $Ba(ClO_4)_2$. На вставках: аналогичный спектр, измеренный в присутствии $KClO_4$ и моменты времени измерения спектров после окончания лазерного импульса. Концентрация $I - 2.5 \times 10^{-5}$ моль/л, перхлоратов металлов – 2.5×10^{-4} моль/л.

Отнесение ^а	II		т	Da	V	Dl.
	Расчет ⁶	Эксперимент	1	ыа	ĸ	PD
		659.1	677	655	660	_
		-	637	629	-	—
		609.1	609	_	610	_
$\operatorname{II-}C_i\operatorname{T}_1\to\operatorname{T}_2$	590/0.53	_	593	587	_	591
		579.2	574	563	-	—
цис- II $T_1 \rightarrow T_2$	548.7/0.648	-	548	—	550	-
<i>цис</i> - II $T_1 \rightarrow T_3$	520.6/0.118	518.5	520	516	520	510.1
цис- II $T_1 \rightarrow T_4$	494.9/0.987	-	490	489.5		-
$\operatorname{II-}C_i\operatorname{T}_1\to\operatorname{T}_3$	471.4/3.28	472.8	_	470	465	475
$\operatorname{II-}C_i\operatorname{T}_1\to\operatorname{T}_4$	461.4/0.24	_	462	_	_	-
		_	_	449	440	_
$\operatorname{II-}C_{2v}\operatorname{T}_1\to\operatorname{T}_4$	421.5/0.721	422	_	430	420	-
		-	_	412	—	404

Таблица 3. Экспериментальные и рассчитанные максимумы поглощения I, II в спектрах Т–Т поглощения, λ_{max} , нм

^{*a*} Отнесения полос сделаны на основании расчета [5]. ${}^{6}\lambda_{max}/f$ (сила осциллятора, отн.ед.).



Рис. 6. Кинетические кривые изменения оптической плотности воздушнонасыщенного (*1*) и обескислороженного (*2*) раствора I в присутствии KClO₄. $\lambda = 510$ нм (а) и 380 нм (б).

версию в триплетное состояние. Образование комплекса включения I с катионами калия и бария сопровождается уменьшением квантового выхода флуоресценции, и изменением спектра T-T поглощения. В присутствии перхлората свинца не наблюдается *транс-цис*-изомеризация, уменьшается (более чем в два раза) квантовый выход флуоресценции, изменяется спектр T-T поглощения и значительно увеличивается эф-

фективность интеркомбинационной конверсии в триплетное состояние. Гипсохромное смещение полосы поглощения I при добавлении перхлоратов бария, калия и свинца обусловлено влиянием полярного растворителя.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (№ 14-13-00076) в части фотоники и синтеза соединения и Федераль-



Рис. 7. Разностные спектры фотоиндуцированного поглощения обескислороженного раствора I в присутствии $Pb(ClO_4)_2$ ($\lambda_{max} = 510$ нм). На вставках: кинетические кривые изменения оптической плотности при $\lambda = 360$ нм (а) и 520 нм (б) и моменты времени измерения спектров после окончания лазерного импульса. Концентрация I – 2.5 × $\times 10^{-5}$ моль/л, $Pb(ClO_4)_2 - 2.5 \times 10^{-4}$ моль/л.

ного агентства научных организаций (соглашение № 007-ГЗ/Ч3363/26) в части расчетов спектров соединений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Oelkrug D., Tompert A., Egelhaaf H.J., Hanack M., Steinhuber E., Hohloch M., Meier H., Stalmach U. // Synth. Met. 1996. V. 83. P. 231.
- Laughlin B.J., Duniho T.L., El Homsi S.J., Levy B.E., Deligonul N., Gaffen J.R., Protasiewicz J.D., Tennyson A.G., Smith R.C. // Org. Biomol. Chem. 2013. № 11. P. 5425.
- Sandros K., Sundahl M., Wennerstrum O., Norinder U. // J. Am. Chem. Soc. 1990. V. 112. P. 3082.
- Marri E., Elisei F., Mazzucato U., Pannacci D., Spalletti A. // J. Photochem. Photobiol. A. 2006. V. 177. P. 307.
- 5. Атабекян Л.С., Авакян В.Г., Нуриев В.Н., Вацадзе С.З., Громов С.П. // Изв. АН. Сер. хим. 2018. № 11. С. 2016.
- 6. Ведерников А.И., Нуриев В.Н., Федоров О.В., Моисеева А.А., Курчавов Н.А., Кузьмина Л.Г., Фрейдзон А.Я.,

ХИМИЯ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ том 53 № 2 2019

Подъячева Е.С., Медведько А.В., Вацадзе С.З., Громов С.П. // Изв. АН. Сер. хим. 2016. № 11. С. 2686.

- 7. Атабекян Л.С., Чибисов А.К., Алфимов М.В. // Химия высоких энергий. 1997. Т. 31. № 5. С. 381.
- Montalti M., Kpedi A., Prodi L., Gandolfi M.T. // Handbook of Phochemistry (third edition). London. 2006. Taylor and Fransis. P. 574.
- 9. Лайков Д.Н., Устынюк Ю.А. // Изв. РАН. Сер. хим. 2005. № 3. С. 804.
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3865.
- 11. Laikov D.N. // Chem. Phys. Lett. 1997. V. 281. P. 151.
- Neese F. // The ORCA program system, Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci. 2012. V. 2. P. 73.
- Schaefer A., Horn H., Ahlrichs R.J. // Chem. Phys. 1992. V. 97. P. 2571.
- Sinnecker S., Rajendran A., Klamt A., Diedenhofen M., Neese F. // J. Phys. Chem. A. 2006. V. 110. P. 2235.
- Avakyan V.G., Nazarov V.B., Odinokov A.V., Alfimov M.V., Koshkin A.V. // J. Lumin. 2016. V. 180. P. 328.