

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539.194:535.37

DOI: 10.17223/00213411/64/8/3

*О.Н. ЧАЙКОВСКАЯ, О.К. БАЗЫЛЬ, Е.Н. БОЧАРНИКОВА***СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА И ФОТОЛИЗ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОЛА ***

Экспериментально и методами квантовой химии исследованы спектрально-люминесцентные свойства и фотолиз фенола и некоторых его производных. Показано, что замещение метильной группой (*n*-крезол) и введение второго бензольного кольца (бисфенол А) приводят к сдвигу полос поглощения в сторону длинных волн и некоторому изменению их интенсивности. Неплоское строение *n*-крезола и бисфенола А способствует росту эффективности синглет-триплетной конверсии и, как следствие этого, снижению квантового выхода флуоресценции. Расчетами установлены механизмы фотолиза рассмотренных молекулярных систем. Показано, что в феноле и *n*-крезоле происходит разрыв О–Н-связи по механизму преддиссоциации. Фотолиз бисфенола А под действием солнечной радиации протекает по механизму прямой диссоциации, но с заметным потенциальным барьером ($\sim 12000 \text{ см}^{-1}$).

Ключевые слова: фенол, *n*-крезол, бисфенол А, фотофизические процессы, квантово-химический расчет, фотолиз, спектрально-люминесцентные свойства.

Введение

Широкое распространение фенолов в окружающей среде обусловлено их физико-химическими свойствами, а именно хорошей растворимостью как в водной среде, так и в органических матрицах, низким давлением паров и высокой реакционной способностью [1–3]. Фенолы образуют группу ароматических органических соединений, которые содержат гидроксильные группы, связанные с бензольными кольцами. Фенольные соединения являются ингибиторами свободно-радикальных процессов и широко распространены в биомедицине [4–6]. Природные фенолы используются как антиоксиданты. Производные фенола находят применение в терапии хронических воспалительных заболеваний иммунной природы, таких, как гепатит, дерматит, ревматизм и экзема. Они используются для лечения ран и защиты тканей от проникающей радиации и от действия сильных окислителей [7]. Фенол и *n*-крезол являются известными антибактериальными агентами широкого спектра действия, обладают противовоспалительными свойствами, действуют на грамм-положительную и грамм-отрицательную флору, а также на грибковые микроорганизмы, поэтому их активно используют в качестве антибактериальной добавки в полимеры [8, 9]. Изучение фенолов оптическими и квантово-химическими методами актуально в связи с высокой фармакологической активностью этих соединений [10–13].

Фенол и его основные производные относят к основным токсикантам, загрязняющим окружающую среду. Они принадлежат к соединениям первого и третьего классов опасности. *n*-Крезол и бисфенол А входят в состав многих композиционных полимерных материалов либо как мономеры, либо как антиоксидантные или консервирующие добавки. Так, к примеру, бисфенол А является одним из ключевых мономеров в производстве эпоксидных смол и поликарбонатных пластиков [14, 15], а также отвердителем и стабилизатором в полимерных материалах. Фенолы попадают в поверхностные воды со стоками предприятий нефтеперерабатывающей, сланцеперерабатывающей, лесохимической, коксохимической, анилиноокрасочной и др. промышленности. В водах они могут находиться в растворенном состоянии в виде фенолятов и свободных фенолов. При обработке хлором воды, содержащей примеси фенола, могут образовываться очень опасные органические токсиканты – диоксины. В загрязненных природных водах содержание фенолов может достигать сотен микрограммов на литр. Сброс фенольных вод в водоемы и водотоки резко ухудшает их общее санитарное состояние, оказывая влияние на живые организмы не только своей токсичностью, но и значительным изменением режима биогенных элементов и растворенных газов (кислорода, углекислого газа). Процесс самоочищения водоемов от фенола протекает относительно медленно, и его следы могут уноситься течением реки на большие расстояния. Присутствие даже очень малых количеств фенола в воде, предназначенной для хозяйственно-питьевых целей, значительно ухудшает ее качества.

* Результаты были получены в рамках выполнения госзадания Минобрнауки России, проект № 0721-2020-0033.

В настоящей работе представлены результаты экспериментального и теоретического изучения спектрально-люминесцентных свойств трех молекул класса фенолов: фенол (C_6H_5OH), *n*-крезол ($CH_3C_6H_4OH$), бисфенол А (ВРА, $(CH_3)_2C(C_6H_4OH)_2$). Для этих соединений получены экспериментальные спектры поглощения, флуоресценции и возбуждения флуоресценции в гексане. Проведены квантово-химические расчеты электронной структуры и спектральных характеристик исследуемых молекул.

Объекты и методы исследования

Объекты исследования использовались с химической чистотой (99.8%) фирмы «Sigma Aldrich»: фенол (C_6H_5OH), *n*-крезол ($CH_3C_6H_4OH$), бисфенол А (ВРА, $(CH_3)_2C(C_6H_4OH)_2$). Структурные формулы исследуемых соединений приведены на рис. 1.

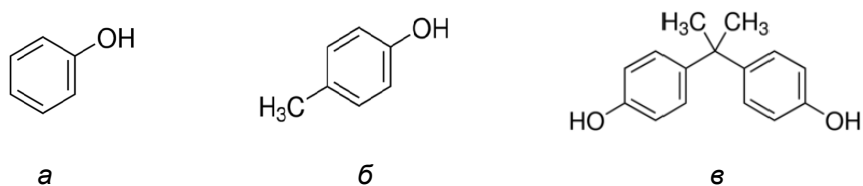


Рис. 1. Структурные формулы исследуемых соединений: *а* – фенол, *б* – *n*-крезол, *в* – бисфенол А

В качестве растворителя применялся этиловый спирт C_2H_5OH фирмы «Sigma Aldrich» чистотой 99.9%. Эксперимент проводили при температуре 20 °С. Спектрально-люминесцентные характеристики растворов зарегистрированы на спектрофлуориметре CM 2203 (фирма «SOLAR», Беларусь) [16]. Квантово-химические расчеты выполнены при помощи пакета программ, основанного на полуэмпирическом методе ЧПДП/С (частичное пренебрежение дифференциальным перекрыванием с оригинальной спектроскопической параметризацией) [17]. Для решения задач спектроскопии квантово-химические программы и методики оценки констант скоростей фото процессов разработаны профессорами Г.В. Майером и В.Я. Артюховым. Оптимизация геометрии основного состояния проводилась методом AM1 (Austin Model 1 или остиновская модель № 1) [18].

Результаты и их обсуждение

Спектральные характеристики исследуемых молекул в неполярных растворителях

Сравнительный анализ спектров поглощения и флуоресценции производных фенола в неполярном растворителе (гексан) показал, что фенол имеет характерное поглощение в УФ-области спектра. В электронном спектре поглощения фенола выделяют две отчетливо выраженные полосы поглощения с максимумами примерно на 37000 и 47400 cm^{-1} , причем обе полосы имеют колебательную структуру. При переходе от неполярного к полярному растворителю или при введении CH_3 -группы (*n*-крезол) структурность длинноволновой полосы пропадает. Расчет показал, что длинноволновая полоса поглощения фенола в гексане образована одним электронным переходом $S_0 \rightarrow S_1$ $\pi\pi^*$ -типа. Это обстоятельство косвенно свидетельствует о колебательной природе структурности длинноволновой полосы фенола. Согласно экспериментальным результатам, максимум полос флуоресценции фенола и *n*-крезола в гексане находится в области ~ 33000 cm^{-1} . В спектре поглощения ВРА в гексане максимум полосы поглощения составляет 36500 cm^{-1} , максимум полосы флуоресценции – 33560 cm^{-1} .

Оптимизированная геометрия *n*-крезола и ВРА (значения длин связей, валентных и торсионных углов) указывает на их неплоский характер. Точные структурные параметры исследованных молекул (длины связей, валентные и торсионные углы) окончательно неизвестны, поэтому геометрия основного состояния оптимизирована методом молекулярной механики (программа MM2 Chem Office) [19].

Следствием неплоского строения *n*-крезола и ВРА является смешанный характер орбитальной природы возбужденных состояний. Поэтому отнесение природы возбужденного состояния к определенному орбитальному типу свидетельствует лишь о его преимущественном вкладе.

Значения энергий, полученные при квантово-химическом расчете изолированных исследуемых молекул, приведены в табл. 1. Экспериментально наблюдаемые максимумы полос поглощения рассматриваемых соединений имеют хорошее согласие с расчетными данными.

Таблица 1

Экспериментальное и теоретическое положение полос в спектре поглощения фенола, *n*-крезола и ВРА в гексане

Расчет			Эксперимент
Состояние	$E_i, \text{см}^{-1}$	f	$E_{\text{max}}, \text{см}^{-1}$
Фенол			
$S_1(\pi\pi^*)$	37200	0.034	37800
$S_2(\pi\pi^*)$	39900	0.032	47400
$S_6(\pi\pi^*)$	48100	0.635	~ 52910
$S_8(\pi\pi^*)$	49400	0.001	
$T_1(\pi\pi^*)$	27000	—	28600 [20]
<i>n</i>-Крезол			
$S_1(\pi\pi^*)$	36000	0.101	36100
$S_6(\pi\pi^*)$	47700	0.594	45500
$T_1(\pi\pi^*)$	24600	—	—
Бисфенол А			
$S_1(\pi\pi^*)$	35100	0.063	36400
$S_2(\pi\pi^*)$	35600	0.053	
$S_3(\pi\pi^*)$	36100	0.121	
$S_5(\pi\pi^*)$	38500	0.402	41700
$S_6(\pi\pi^*)$	40300	0.293	
$T_1(\pi\pi^*)$	24000	—	—

Согласно квантово-химическим расчетам [21], поглощение фенола и *n*-крезола в области 35000–36000 см^{-1} вызвано одним электронным переходом $S_0 \rightarrow S_1$ $\pi\pi^*$ -типа, поэтому наблюдаемая структурность электронной полосы – это проявление ее колебательной структуры. Квантово-химические расчеты изолированных молекул фенола показали, что в области до 50000 см^{-1} молекулярные орбитали σ -типа, локализованные на связи ОН, не участвуют в формировании волновых функций возбужденных состояний (табл. 2). Введение в бензольное кольцо группы CH_3 приводит к уменьшению рассчитанной энергии электронных переходов, батохромному сдвигу максимумов полос в длинноволновой и средней областях спектра и увеличению интенсивности длинноволновой полосы поглощения. В электронных полосах поглощения *n*-крезола положение вибронных уровней проявляется в виде двух перегибов в области 36000 и 46000 см^{-1} . Что касается электронных переходов фенола и *n*-крезола в области спектра ~ 50000 см^{-1} , то они локализованы только на атомах углерода ароматического кольца молекул.

Для понимания путей превращения энергии электронного возбуждения в исследуемых соединениях были рассчитаны константы скорости фотофизических процессов: излучательных (k_r) и безызлучательных (внутренней (k_{ic}) и синглет-триплетной (k_{ST})) конверсий. Анализ констант скорости фотофизических процессов позволил оценить наиболее вероятные пути преобразования энергии возбуждения [22–25] и квантовый выход флуоресценции. Константы скоростей исследуемых молекул приведены в табл. 2.

Таблица 2

Рассчитанные константы скоростей фотофизических процессов и квантовые выходы фенола и его некоторых производных

Молекула	$k_{ic}, \text{с}^{-1}$	$k_r, \text{с}^{-1}$	$k_{ST}, \text{с}^{-1}$	$\phi_{\text{теор}}$	$\phi_{\text{эксп}}^*$
Фенол	$2 \cdot 10^2$	$3 \cdot 10^7$	10^8	0.23 [26, 27]	0.2
<i>n</i> -Крезол	10^3	$9 \cdot 10^7$	$2 \cdot 10^{10}$	0.005	0.01
Бисфенол А	$5 \cdot 10^3$	$6 \cdot 10^7$	$2 \cdot 10^{10}$	0.003 [28]	0.001

Примечание. * Экспериментальные значения приведены для гексана.

Схемы электронно-возбужденных уровней рассматриваемых молекул [29] показали, что при переходе от фенола к бисфенолу происходит увеличение эффективности *S-T*-конверсии в ряду: фенол < *n*-крезол < бисфенол А.

Сравнение квантовых выходов исследуемых молекул класса фенолов показало, что наличие метильной группы в структуре *n*-крезола открывает эффективный канал интеркомбинационной конверсии, вследствие чего происходит уменьшение квантового выхода флуоресценции почти в 2 раза по сравнению с исходной молекулой фенола (табл. 2).

Фотолиз исследуемых молекул

Известно, что под действием излучения в молекуле фенола и *n*-крезола происходит разрыв связи О–Н [30, 31]. Для интерпретации экспериментальных результатов по фотодеградации молекул проведены квантово-химические расчеты фотолиза фенола, *n*-крезола и ВРА: исследован механизм фотореакции и эффективность разрыва О–Н-связи в зависимости от молекулярного взаимодействия и энергии возбуждения.

Вероятность разрыва химической связи определяется: степенью локализации энергии возбуждения, поглощенной молекулой, на разрываемой связи; снижением прочности связи при возбуждении в данное электронное состояние по сравнению с основным состоянием молекулы, при этом энергия данного возбужденного состояния должна быть выше энергии диссоциации связи. Не менее важным фактором является возможность эффективного заселения фотодиссоциативного состояния либо непосредственным возбуждением данного состояния, либо путем внутримолекулярных процессов релаксации энергии электронного возбуждения.

Для фенолов реакции разрыва связи С–О не характерны, поскольку атом кислорода прочно связан с атомом углерода бензольного кольца за счет участия своей неподеленной электронной пары в системе сопряжения. Взаимное влияние атомов в молекуле фенола проявляется не только в особенностях поведения гидроксигруппы, но и в большей реакционной способности бензольного ядра. Гидроксильная группа повышает электронную плотность на бензольном кольце, особенно, в *орто*- и *пара*-положениях.

Расчет заселенностей О–Н-связей в изолированных молекулах фенола и *n*-крезола показал, что во всех состояниях $\pi\pi^*$ - и $\pi\sigma^*$ -типа, образованных без участия ОН-группы, заселенность (прочность) связи при электронном возбуждении практически не меняется. В синглетных и триплетных состояниях $\pi\sigma^*$ -типа, σ^* -орбиталь которых локализована на ОН-связи, прочность связи значительно снижена (табл. 3).

Таблица 3

Заселенности ОН-связи в основном и некоторых возбужденных состояниях

Соединение	Состояния						
	S_0	$S_1(\pi\pi^*)$	$S_2(S_3)(\pi\pi^*)$	$S_2(\pi\sigma^*)$	S_D	$T_4(\pi\sigma^*)$	T_D
Фенол	0.578	0.578	0.578	-	-0.176	0.570	-0.066
<i>n</i> -Крезол	0.578	0.578	0.578	0.578	0.109	0.557	-0.130

Потенциальные кривые всех электронно-возбужденных состояний фенола и *n*-крезола в области до 50000 см^{-1} соответствуют устойчивой молекуле и только состояниям S_D и T_D – кривым распада при выборе координатной реакции длины О–Н-связи (здесь $S_D \equiv S(\pi\sigma^*)_{\text{ОН}}$ и $T_D \equiv T(\pi\sigma^*)_{\text{ОН}}$). Ситуация в случае фенола и *n*-крезола одинакова [32]. Потенциальные кривые всех фотодиссоциативных состояний с энергией ниже $\sim 50000\text{ см}^{-1}$ при использованных энергиях возбуждения ($n = 43670$ и 45450 см^{-1} [33]) носят связующий характер. Прочность ОН-связи при возбуждении меняется слабо и МО, локализованные на этой связи, не принимают участие в образовании σ^* -состояний. Это дает возможность сделать вывод о том, что при возбуждении фоторазрыв данной связи по механизму прямой диссоциации исключен, и наиболее вероятным механизмом является пре-диссоциация.

Рассмотренный фотолиз фенола и *n*-крезола показал, что при возбуждении в молекуле происходит фоторазрыв связи О–Н. В случае ВРА ситуация другая. Поскольку мы рассматриваем процесс деградации молекулы под влиянием только солнечной радиации, коротковолновая граница которой у поверхности земли находится примерно на 290 нм ($\sim 34480\text{ см}^{-1}$), энергия фотодиссоциативного состояния, локализованного на связи О–Н, значительно выше этого значения. Подобная ситуация характерна и для одиночных связей С–СН₃. Что касается энергии состояний, локализованных на одиночных связях С₅–С₈ или С₈–С₁₁ ВРА, то она значительно ближе к значению $\sim 34480\text{ см}^{-1}$.

В квантово-химических расчетах электронная плотность распределена между атомами молекулы и связями между ними. Величина электронной плотности на химической связи соответствует ее прочности, следовательно ее повышение свидетельствует об упрочнении (увеличении энергии) связи, понижение – об ослаблении связи. Из результатов расчета ВРА [34] следует, что наибольшее снижение прочности исследованных связей характерно для связей C_{8-11} и C_{5-11} в синглетных и триплетных состояниях, локализованных на этих связях. В состоянии S_0 заселенность связи C_8-C_{11} $P_{8-11} = 0.783e$, а в состоянии $S_3(\pi\sigma_{8-11})$ она снижается до $0.216e$. При этом снижение заселенности (прочности) данных связей в предполагаемых фотодиссоциативных состояниях характерно как для синглетных, так и для триплетных состояний такого типа.

Установив вид потенциальных кривых нескольких состояний $S_1(\pi\pi^*)$, $S_3(\pi\sigma_{8-11}^*)$ и $T_5(\pi\sigma_{8-11}^*)$ для ВРА, при проведении квантово-химических расчетов этих состояний с варьированием длины связи одной из одиночных связей в качестве координаты реакции была выбрана длина связи C_8-C_{11} . Для состояния $S_1(\pi\pi^*)$ характерна кривая связывания, тогда как для синглетного и триплетного состояний $\pi\sigma_{8-11}^*$ -типа – кривые отталкивания с заметным потенциальным барьером. Разрыв одиночной связи C_8-C_{11} возможен, но с потенциальным барьером, что делает фотолиз молекулы малоэффективным под действием солнечного света. Энергия состояния $S_3(\pi\sigma_{8-11}^*)$ делает возможным его прямое заселение, а заселение фотодиссоциативного триплета – через процесс $S_1(\pi\pi^*) \rightarrow T_6(\pi\sigma_{5-8-11})$ -конверсии.

Заключение

На основании проведенного исследования можно сделать следующие выводы:

1. Спектры поглощения замещенных молекул сдвинуты в сторону больших длин волн относительно фенола. Полосы флуоресценции ВРА, *n*-крезола и фенола по энергии отличаются незначительно. Заметные различия в квантовых выходах флуоресценции исследуемых соединений вызваны разницей в геометрии замещенных молекул относительно геометрии фенола. Неплоская геометрия *n*-крезола и ВРА приводит к росту синглет-триплетной конверсии в этих молекулах по отношению к плоскому фенолу и, как следствие, к уменьшению квантового выхода флуоресценции.

2. При фотолизе фенола и *n*-крезола имеет место разрыв О–Н-связи по механизму преддиссоциации, тогда как фотолиз ВРА сопровождается разрывом связи между средним и фенольным фрагментами молекулы по механизму прямой диссоциации.

3. Наличие метильных групп в замещенных фенола в меньшей степени меняют спектры поглощения и флуоресценции, но заметно меняют эффективность синглет-триплетной конверсии и механизм фотолиза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александрова Л. Н. Органическое вещество почвы и процессы его трансформации. – Л.: Наука, 1980. – 280 с.
2. Алыков Н. Н., Иглина Е. В., Савельева Е. С. и др. // Экологические системы и приборы. – 2008. – № 9. – С. 38–40.
3. Козубова Л. И. Органические загрязнители питьевой воды: Аналитический обзор. – Новосибирск: ГПНТБ СО РАН, 1993. – 167 с.
4. Ershov V. V., Nikiforov G. A., and Volod'kin A. A. Sterically Hindered Phenols. – Moscow: Khimiya, 1972. – 328 p.
5. Roginskii V. A. Phenol Antioxidants: Reactivity and Efficiency. – Moscow: Nauka, 1988. – 247 p.
6. Halliwell B. and Gutteridge J. M. C. Free Radicals in Biology and Medicine. – Oxford: Clarendon Press, 1999. – 905 p.
7. Shadyro O. I., Ksendzova G. A., et al. // Bioorg. Med. Chem. Lett. – 2008. – V. 18. – No. 7. – P. 2420–2423.
8. Coughlin J. L., Winnik B., and Buckley B. // Analytic. Bioanalytic. Chem. – 2011. – V. 401. – No. 3. – P. 995–1002.
9. Vela-Soria F., Ballesteros O., Zafra-Gómez A., et al. // Analytic. Bioanalytic. Chem. – 2014. – V. 406. – No. 15. – P. 3773–3785.
10. Bel'kov M. V., Ksendzova G. A., Polozov G. I., et al. // Zh. Prikl. Spektrosk. – 2008. – V. 75. – No. 1. – P. 69–74.
11. Ksendzova G. A., Polozov G. I., Skornyakov I. V., et al. // Opt. Spektrosk. – 2007. – V. 102. – No. 4. – P. 602–607.
12. Bel'kov M. V., Ksendzova G. A., Kuzovkov P. V., et al. // Zh. Prikl. Spektrosk. – 2007. – V. 74. – No. 5. – P. 635–641.

13. Bazyl' O.K., Artyukhov V.Ya., Maier G.V., et al. // Opt. Spektrosk. – 2009. – V. 107. – No. 4. – P. 596–606.
14. Zhou D., Wu F., Deng N., et al. // Water Research. – 2004. – V. 38. – No. 19. – P. 4107–4116.
15. Chin Yu-P., Miller P.L., Zeng L., et al. // Environ. Sci. Technol. – 2004. – V. 38. – No. 22. – P. 5888–5894.
16. ГОСТ 12997-84 «Изделия ГСП. Общие технические условия». Технические условия ТУ ВУ 100424659.013-2006. «Спектрофлуориметр СМ 2203».
17. Артюхов В.Я., Галеева А.И. // Изв. вузов. Физика. – 1986. – Т. 29. – № 11. – С. 96–100.
18. Майер Г.В., Артюхов В.Я., Карыпов А.В. // Опт. и спектр. – 1989. – Т. 66. – №4. – С. 823–826.
19. Китайгородский А.И., Зоркий П.М., Бельский В.К. Строение органического вещества (данные структурных исследований 1929–1970 гг.). – М.: Наука, 1980. – 413 с.
20. McClure D.S. // J. Chem. Phys. – 1949. – V. 17. – No. 905.
21. Морозова Ю.П., Чайковская О.Н., Васильева Н.Ю. // Журн. физ. химии. – 1998. – Т. 72. – № 2. – С. 272–279.
22. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. – М.: Мир, 1979. – 142 с.
23. Артюхов В.Я., Базыль О.К. Компьютерная квантовая химия: учеб.-метод. пособие. – Томск: Изд-во ТГУ, 2010. – 130 с.
24. Блатов В.А., Шевченко А.П., Самсонова Л.Г. и др. Полуэмпирические расчетные методы квантовой химии: учеб. пособие. – Самара: Изд-во «Универ-групп», 2005. – 32 с.
25. Бакулев В.А., Моржерин Ю.Ю., Субботина Ю.О. Квантово-химические расчеты органических молекул: учеб. электрон. текст. изд. для студентов вузов по специальностям «Биотехнология», «Технология биоорганического синтеза», «Химическая технология органических веществ», «Химическая технология основного органического синтеза», «Химическая технология органических красителей». – Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ – УПИ, 2004. – 120 с.
26. Parker C.A. Photoluminescence of Solutions. – Mir: Moscow, 1972. – 669 p.
27. Юденфренд С. Флуоресцентный анализ в химии и медицине. – М.: Мир, 1965. – 484 с.
28. Соколов Э.М., Шейнкман Л.Э., Дергунов Д.В. // Вода: химия и экология. – 2012. – № 4. – С. 26–32.
29. Бочарникова Е.Н., Чайковская О.Н., Артюхов В.Я. // Изв. вузов. Физика. – 2019. – Т. 62. – № 9. – С. 144–150.
30. Толсторожев Г.Б., Бельков М.В., Райченко Т.Ф. и др. // Опт. и спектр. – 2013. – Т. 115. – № 5. – С. 807–816.
31. Svetlichnyi V.A., Chaikovskaya O.N., Bazyl' O.K., et al. // High Energy Chem. – 2001. – V. 35. – No. 4. – P. 258–264.
32. Чайковская О.Н. Спектрально-люминесцентные свойства, фотофизические и фотохимические процессы в гидроксипароматических соединениях при возбуждении ультрафиолетовым излучением: автореф. дис. ... докт. физ.-мат. наук. – Томск: 2007.
33. Kang M.G., Han H.-E., and Kim K.-J. // J. Photochem. Photobiol. A: Chem. – 1999. – V. 125. – P. 119–125.
34. Bocharnikova E.N., Tchaikovskaya O.N., Bazyl O.K., et al. // Adv. Quantum Chem. – 2020. – V. 81. – P. 191–217.

Поступила в редакцию 07.04.2021.

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия

Чайковская Ольга Николаевна, д.ф.-м.н., профессор, зав. лаб. фотофизики и фотохимии молекул НИ ТГУ, e-mail: tchon@phys.tsu.ru;

Базыль Ольга Константиновна, к.ф.-м.н., доцент, науч. сотр. лаб. фотофизики и фотохимии молекул НИ ТГУ, e-mail: olga.k.bazyl@gmail.com;

Бочарникова Елена Николаевна, инженер-исследователь лаб. фотофизики и фотохимии молекул НИ ТГУ, e-mail: bocharnikova.2010@mail.ru.