

Для цитирования:

Суров О.В., Крестьянинов М.А., Мамардашвили Н.Ж. Спектральные характеристики конформационных изомеров мезо-октаметилкаликс(4)пиррола по данным квантово-химических расчетов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2016. Т. 59. Вып. 5. С. 30-36.

For citation:

Surov O.V., Krestianinov M.A., Mamardashvili N.Zh. Spectral characteristics of conformation isomers of *meso*-octamethylcalix(4)pyrrole based on quantum-chemical calculations. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2016. V. 59. N 5. P. 30-36.

УДК 54-145.4

О.В. Суров, М.А. Крестьянинов, Н.Ж. Мамардашвили

Олег Валентинович Суров (✉), Нугзар Жораевич Мамардашвили

Лаборатория «Координационная химия макроциклических соединений» Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, ул. Академическая, д. 1, Иваново, Российская Федерация, 153045

E-mail: ovs@isc-ras.ru (✉), nzm@isc-ras.ru

Михаил Алексеевич Крестьянинов

Лаборатория «ЯМР спектроскопия и численные методы исследования жидких систем» Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, ул. Академическая, д. 1, Иваново, Российская Федерация, 153045

E-mail: mak1111@bk.ru

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОНФОРМАЦИОННЫХ ИЗОМЕРОВ МЕЗО-ОКТАМЕТИЛКАЛИКС(4)ПИРРОЛА ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Проведена оптимизация геометрических параметров и расчет электронных спектров поглощения основных конформеров мезо-октаметилкаликс(4)пиррола методом теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP в базисе cc-pVTZ в пакете программ Gaussian 09. Проведен анализ экспериментальных электронных спектров поглощения растворов каликс(4)пиррола в различных растворителях. Сделан вывод о существовании динамического равновесия между конформерами в растворах.

Ключевые слова: каликс(4)пиррол, конформационный анализ, растворы, супрамолекулярные взаимодействия

O.V. Surov, M.A. Krestianinov, N.Zh. Mamardashvili

Oleg V. Surov (✉), Nugzar Zh. Mamardashvili

Laboratory of Coordination Chemistry of Macrocyclic Compounds, G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of Russian Academy of Sciences, Akademicheskaya str., 1, Ivanovo, 153045, Russia

E-mail: ovs@isc-ras.ru (✉), nzm@isc-ras.ru

Mikhail A. Krestianinov

Laboratory of NMR-Spectroscopy and Numerical Investigations Methods of Liquids, G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of Russian Academy of Sciences, Akademicheskaya str., 1, Ivanovo, 153045, Russia

E-mail: mak1111@bk.ru

SPECTRAL CHARACTERISTICS OF CONFORMATION ISOMERS OF MESO-OCTAMETHYL-CALIX(4)PYRROLE BASED ON QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS

The structure optimization and calculation of electronic absorption spectra of meso-octamethylcalix(4)pyrrole conformers was performed by density-functional theory using hybrid B3LYP functional in cc-pVTZ basis set of Gaussian 09 package. Analysis of experimental UV-Vis spectra of solutions of calix(4)pyrrole was carried out in various solvents. The conclusion on the existence of a dynamic equilibrium between conformers in solutions of meso-octamethylcalix(4)pyrrole was made.

Key words: calix(4)pyrrole, conformational analysis, solutions, supramolecular interactions

ВВЕДЕНИЕ

Мезо-октазамещенные порфириногены – эффективные рецепторы анионов и нейтральных «гостей». По прямой аналогии конформационных свойств с каликс[4]аренами эти соединения получили название каликс(4)пирролов [1-4]. В последнее время каликспирролы успешно применяются в переносе, связывании и распознавании неорганических и органических солей, которое серьезно осложняется взаимодействием катионов и анионов с образованием ионных пар [5]. Успех в этом направлении был достигнут при детектировании контактных и сольваторразделенных ионных пар с использованием рецепторов, содержащих полости ограниченного размера и определенной анизотропии, а также рецепторов, проявляющих аллостерические эффекты, когда связывание иона предорганизует рецептор к взаимодействию с противоионом [6]. При комплексообразовании с солями конформационно подвижная молекула каликспиррола, взаимодействуя с анионом, фиксируется в конформации «корона» таким образом, что образуется предорганизованная полость с избыточной электронной плотностью, способная связывать катион. В результате каликспиррол действует как эффективный рецептор ионной пары.

Комплексообразующие свойства каликспирролов в значительной степени зависят от выбранного растворителя [7, 8]. Эта зависимость определяется конкуренцией с молекулами растворителя за места связывания и сольватационными процессами, протекающими при комплексообразовании в растворах, а также конформационными равновесиями в различных растворителях. Несмотря на то, что оптические спектральные методы, особенно UV-Vis и флуоресцентная спектроскопия, очень широко применяются для изучения взаимодействий с участием каликспирролов [9], к настоящему времени в литературе отсутствуют данные о влиянии конформационной подвижности каликспирролов на силу теоретического осциллятора.

Основная цель данной работы: расчет электронных спектров поглощения четырех основных конформеров *мезо*-октаметилкаликс(4)пиррола и сопоставление с экспериментальными данными.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

В работе использовали *мезо*-октаметилкаликс(4)пиррол фирмы Aldrich (*meso*-octamethylcalix(4)pyrrole, 97,0%, CAS Number 4475-42-7, C₂₈H₃₆N₄, MW: 428,61) (рис. 1). Каликспиррол подвергался дополнительной очистке методом фрак-

ционной сублимации в глубоком вакууме [10, 11]. Растворители были получены по каталогу Sigma-Aldrich (spectroscopic grade) и использовались без дополнительной очистки. Спектрофотометрические измерения проводились на спектрофотометре Cary-100.

Оптимизация геометрии основных конформеров *мезо*-октаметилкаликс(4)пиррола (рис. 1) проведена методом теории функционала плотности (DFT) с использованием гибридного функционала B3LYP в базисе *cc*-pVTZ в пакете программ Gaussian 09 [12]. Расчет электронных спектров поглощения (ЭСП) проведен методом TD-DFT/B3LYP в базисе *cc*-pVTZ. Количество занятых/вакантных молекулярных орбиталей, вовлеченных в конфигурационное взаимодействие, составило 4/7 при расчете спектров конформеров «1,3-альтернат» и «частичная корона», 3/6 и 4/6 при расчете спектров конформеров «корона» и «1,2-альтернат», соответственно. Количество занятых/вакантных молекулярных орбиталей соответствует 10-и полосам синглетных переходов в ЭСП основных конформеров *мезо*-октаметилкаликс(4)пиррола. При обработке и визуализации результатов расчетов пользовались программными продуктами GaussView 5.0 [12] и ChemCraft 1.6 [13].

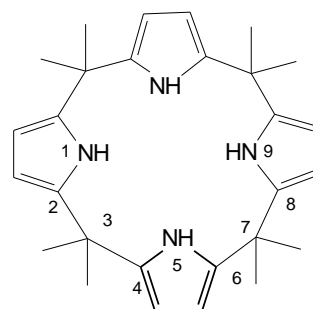


Рис. 1. Структура *мезо*-октаметилкаликс(4)пиррола
Fig. 1. The structural formula of *meso*-octamethylcalix(4)pyrrole

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Считается, что аналогично каликс[4]аренам каликс(4)пирролы могут принимать четыре основные конформации: «корона» (*Cone*), «частичная корона» (*Paco*), «1,3-альтернат» (*1,3-Alt*) и «1,2-альтернат» (*1,2-Alt*) (рис. 2). Однако в газовой фазе стабильны только две конформации – *1,3-Alt* и *1,2-Alt*, в то время как *Cone* и *Paco* при оптимизации переходят в *1,3-Alt* [14, 15]. Поэтому для стабилизации молекулы в конформации *Cone* (или *Paco*) при оптимизации дополнительно был введен анион фтора, как наиболее прочно связанный с *мезо*-октаметилкаликс(4)пирролом галогенид [16, 17]. (Далее в тексте оптимизированные структуры *Cone* или *Paco* относятся к комплексу с F⁻).

Сравнение оптимизированных геометрических параметров конформеров *мезо*-октаметилкаликс(4)пиррола с кристаллографическими данными показывает, что они хорошо согласуются (табл. 1). (Кристаллическая структура конформера *Raco* пока неизвестна [18]).

В условиях конформационного равновесия в растворе особый интерес представляет переход

из *1,3-Alt* в *Cone*, т.е. формирование предорганизованной комплексообразующей полости. Как указывалось, такой конформационный переход характерен при образовании комплексов с галогенид-ионами, но, вероятно, его можно ожидать и при связывании небольших нейтральных «гостей», в частности, растворителей – акцепторов водородной связи [7, 8].

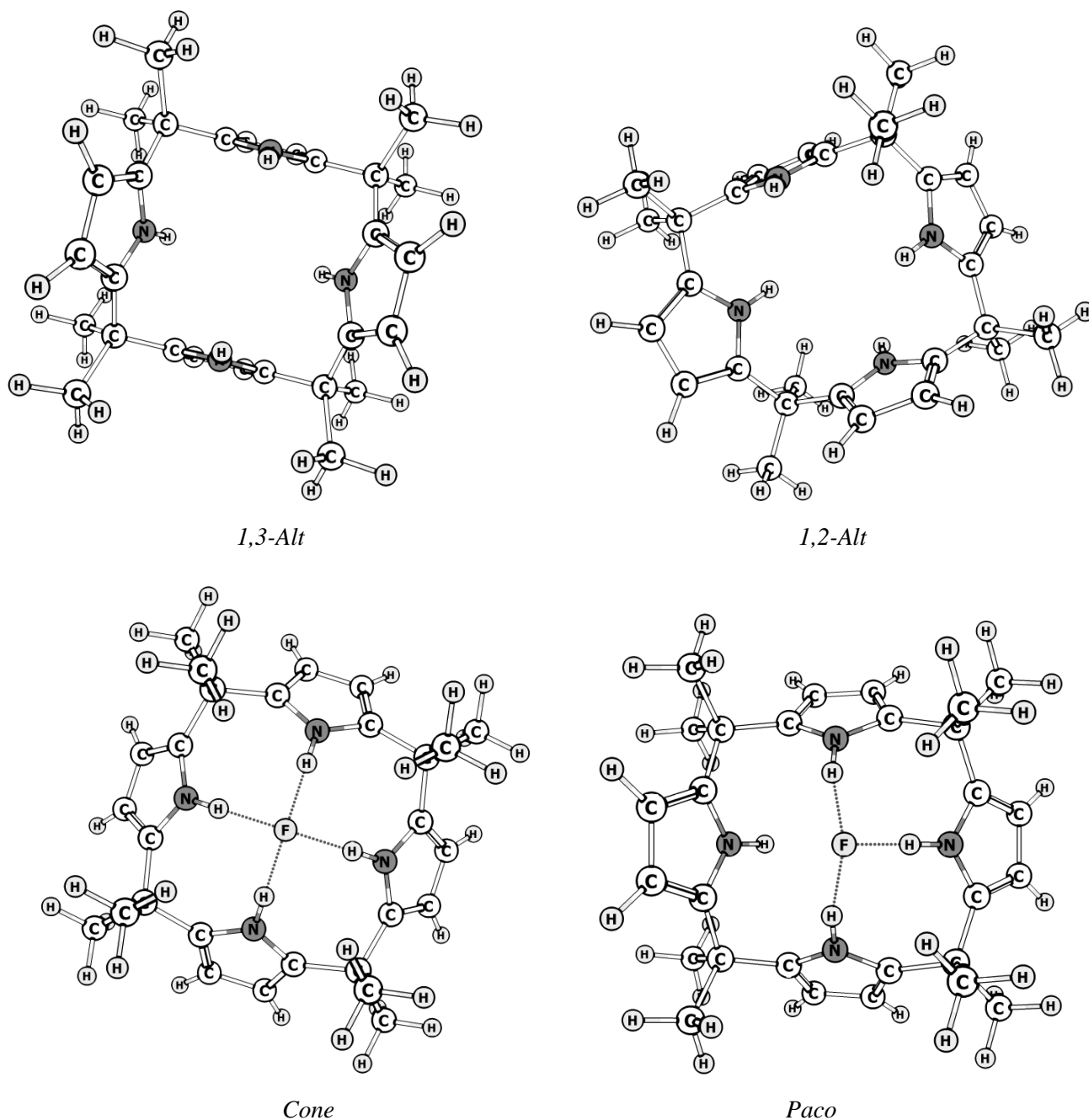


Рис. 2. Четыре основные конформации *мезо*-октаметилкаликс(4)пиррола: в конформации *1,3-Alt* соседние пиррольные кольца направлены в противоположные стороны; в конформации *1,2-Alt* два соседних пиррольных фрагмента попарно располагаются в противоположных направлениях; в конформации *Cone* все четыре пиррольных фрагмента ориентированы в одном направлении; в конформации *Raco* три из четырех пиррольных фрагментов ориентированы в одном направлении, а четвертый – в противоположном

Fig. 2. The most relevant four conformers of *meso*-octamethylcalix(4)pyrrole and their relative energies (kJ/mol) in cc-pVTZ basis set

Таблица 1

Расчетные и кристаллографические геометрические параметры (длины связей, Å и углы, град.) четырех основных конформеров мезо-октаметилкаликс(4)пиррола [18]

Table 1. Crystallographic and estimated geometric parameters (bond lengths, Å; angles, deg.) of the four main conformers of meso-octamethylcalix(4)pyrrole [18]

Геометрические параметры	1,3-Alt		1,2-Alt		Cone		Paco	
	Расчет	Кристаллография	Расчет	Кристаллография	Расчет	Кристаллография	Расчет	Кристаллография
N1-C2	1,376	1,379	1,375	1,379	1,374	1,377	1,375	-
C2-C3	1,515	1,514	1,517	1,521	1,520	2,497	1,511	-
C3-C4	1,516	1,513	1,523	1,522	1,521	2,497	1,518	-
C4-N5	1,376	1,374	1,377	1,377	1,373	1,377	1,377	-
N5-C6	1,376	1,376	1,379	1,379	1,374	1,377	1,377	-
C6-C7	1,515	1,511	1,514	1,516	1,521	2,497	1,523	-
C7-C8	1,516	1,515	1,512	1,517	1,521	2,497	1,519	-
C8-N9	1,376	1,373	1,375	1,379	1,373	1,377	1,366	-
∠N1-C2-C3	121,3	121,6	121,8	122,6	122,2	93,63	122,2	-
∠C2-C3-C4	109,9	109,8	109,4	110,6	112,9	59,82	113,0	-
∠C3-C4-N5	121,0	121,3	123,5	122,9	122,2	93,63	123,0	-
∠C4-N5-C6	111,0	110,6	111,1	110,1	110,6	110,0	109,9	-
∠N5-C6-C7	121,4	121,4	122,0	122,8	122,2	93,63	123,3	-
∠C6-C7-C8	109,9	109,7	109,9	113,7	112,9	59,82	111,9	-
∠C7-C8-N9	121,0	121,0	121,1	122,7	122,9	93,63	120,8	-
∠N1-C2-C3-C4	-58,9	-58,5	-70,4	-68,5	-70,1	-110	49,5	-
∠C2-C3-C4-N5	-51,1	-51,0	107,1	80,18	70,1	110,2	41,5	-
∠C3-C4-N5-C6	-177,9	-177	-178,5	-178	177,0	156,7	170,0	-
∠C4-N5-C6-C7	179,8	-179	178,4	-171	-177,0	-156	-179,1	-
∠N5-C6-C7-C8	58,9	59,16	-67,7	-50,7	-70,1	110,2	-76,3	-
∠C6-C7-C8-N9	51,1	48,3	-28,6	33,91	70,1	110,2	66,7	-

Примечания: ^aНумерация атомов соответствует обозначениям на Рис. 1; ^bRefcode VUSFIU01; ^c Refcode RECIPIY; ^dRefcode LAMTOJ

Notes: ^aNumbering of atoms corresponds to the notation in Fig. 1; ^bRefcode VUSFIU01; ^c Refcode RECIPIY; ^dRefcode LAMTOJ

Таблица 2

Энергия возбуждения (эВ) и сила осциллятора 10-и полос синглетных переходов S₀→S₁ основных конформеров мезо-октаметилкаликс(4)пиррола, рассчитанные в базисе cc-pVTZ, и соответствующие им длины волн (нм)

Table 2. Excitation energies (eV), wavelengths (nm) and oscillator strengths for ten S₀→S₁ bands of singlet transitions for main conformers of meso-octamethylcalix(4)pyrrole (cc-pVTZ basis set)

1,3-Alt			1,2-Alt			Cone			Paco		
E, эВ	λ, нм	f	E, эВ	λ, нм	f	E, эВ	λ, нм	f	E, эВ	λ, нм	f
5,0685	244,62	0,0000	4,7125	263,09	0,0000	4,8507	255,60	0,0000	4,8131	257,60	0,0020
5,2678	235,36	0,0001	4,9475	250,60	0,0324	5,0481	245,60	0,0000	4,9699	249,47	0,0234
5,2696	235,28	0,0000	5,0066	247,64	0,0400	5,2153	237,73	0,0139	5,0471	245,65	0,0234
5,3751	230,66	0,0082	5,0376	246,12	0,0000	5,2153	237,73	0,0138	5,1107	242,60	0,0048
5,3751	230,66	0,0082	5,2019	238,34	0,0000	5,3609	231,28	0,0000	5,1944	238,69	0,0036
5,4409	227,87	0,0642	5,2893	234,40	0,0380	5,3883	230,10	0,1256	5,2086	238,04	0,0669
5,4409	227,87	0,0642	5,3087	233,55	0,0088						
5,5348	224,01	0,0058	5,4130	229,05	0,2834						
5,5348	224,01	0,0058	5,4740	226,49	0,0000						
5,6333	220,09	0,0031	5,5103	225,01	0,000						

В табл. 2 приводятся результаты расчета ЭСП основных конформеров мезо-октаметилкаликс(4)пиррола: энергия возбуждения (эВ), сила осциллятора 10-и полос синглетных переходов и соответствующие им длины волн в нм. Совокупность полос синглетных переходов различной ин-

тенсивности *f* (табл. 2) образуют модельные ЭСП конформеров каликс(4)пиррола. На рис. 3 эти результаты представлены в виде гауссианов с фиксированной шириной. На рис. 4 для сравнения показаны экспериментальные ЭСП мезо-октаметилкаликс(4)пиррола в различных растворителях.

Модельный ЭСП конформера *1,3-Alt* представляет собой одиночный пик средней интенсивности с максимумом при ~ 228 нм (рис. 3). Конформер *1,2-Alt* характеризуется приблизительно двукратным увеличением интенсивности основного пика в коротковолновой области (~ 229 нм) и появлением плеча небольшой интенсивности в длинноволновой области (~ 248 нм). Конформер *Cone* отличается небольшим сдвигом основного пика средней интенсивности в длинноволновую область (~ 230 нм) и появлением плеча малой интенсивности (~ 238 нм). У конформера *Paco* основная полоса малой интенсивности сдвигается в длинноволновую область (~ 238 нм) и появляется незначительное плечо (246-250 нм).

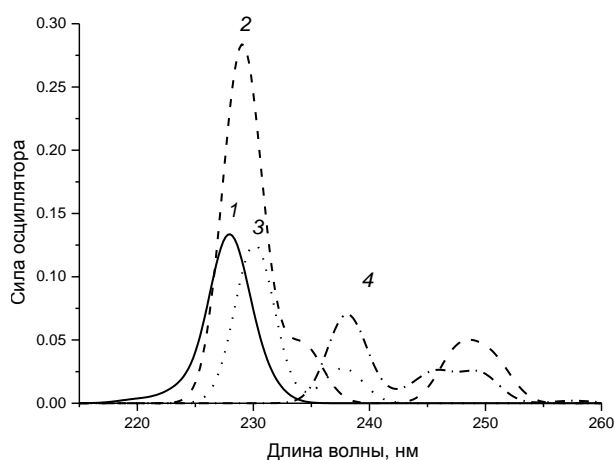


Рис. 3. Расчетные ЭСП четырех основных конформеров мезо-октаметилкаликс(4)пиррола, представленные в виде гауссианов с фиксированной шириной: 1 – *1,3-Alt*; 2 – *1,2-Alt*; 3 – *Cone*; 4 – *Paco*

Fig. 3. Simulated absorption spectra of the four main conformers of *meso*-octamethylcalix(4)pyrrole presented as Gaussians form with the fixed width in terms of wavelengths: 1 – *1,3-Alt*; 2 – *1,2-Alt*; 3 – *Cone* F-; 4 – *Paco* F-

На экспериментальных спектрах отчетливо просматривается изобестическая точка в районе 240 нм, при этом уменьшение интенсивности поглощения и сдвиг в длинноволновую область с 219,5 до 221,5 нм в ряду изученных растворителей соответствует появлению плеча в области 250-290 нм (рис. 4). Кроме того, оказалось, что увеличение интенсивности поглощения в области 250-290 нм и соответствующее уменьшение оптической плотности в области ~ 220 нм хорошо коррелирует с молярным индексом рефракции растворителя R_m , характеризующим размер молекулы растворителя [19].

На рис. 5 показана зависимость отношения интенсивностей поглощения (D_{275}/D_{220}) от молярного индекса рефракции растворителя R_m . Видно, что с увеличением размера молекулы растворителя (с ростом R_m) отношение интенсивностей по-

глощения (D_{275}/D_{220}) увеличивается (для характеристики интенсивности поглощения в области плеча 250-290 нм условно принимали оптическую плотность при 275 нм).

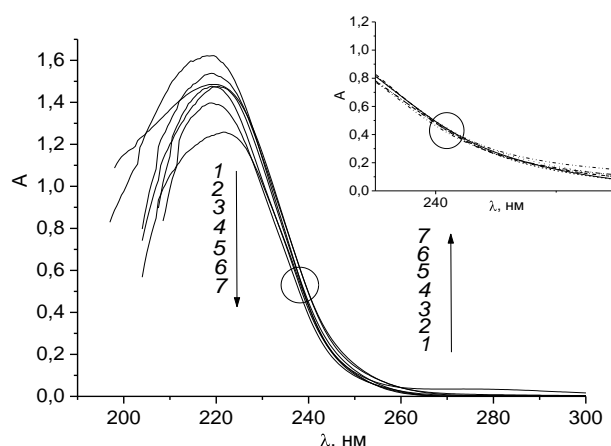


Рис. 4. Экспериментальные ЭСП мезо-октаметилкаликс(4)пиррола в различных растворителях (концентрация пиррола $5 \cdot 10^{-5}$ моль/л): 1 – метанол; 2 – ацетонитрил; 3 – этанол; 4 – изопропанол; 5 – *трет*-бутанол; 6 – циклогексан; 7 – *n*-гексан

Fig. 4. Experimental UV-Vis absorption spectra of *meso*-octamethylcalix(4)pyrrole solutions (concentration is $5 \cdot 10^{-5}$ mol/l) in various solvents: 1 – methanol; 2 – acetonitrile; 3 – ethanol; 4 – isopropanol; 5 – *tert*-butanol; 6 – cyclohexane; 7 – *n*-hexane;

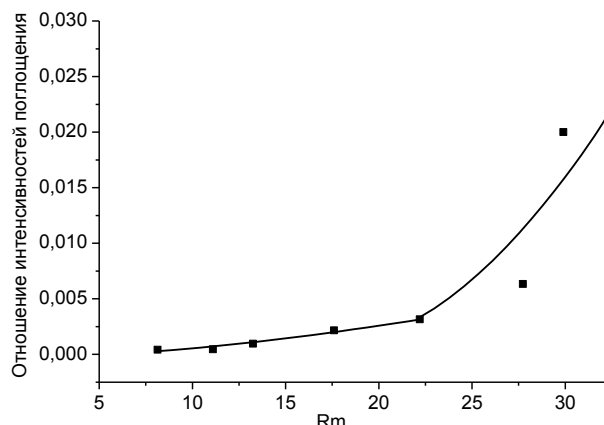


Рис. 5. Зависимость отношения интенсивностей поглощения (D_{275}/D_{220}) от молярного индекса рефракции растворителя R_m

Учитывая энергетическую стабильность конформеров (*1,3-Alt* на 33.24 кДж/моль более стабилен, чем *1,2-Alt*; *Cone* на 36.94 кДж/моль более стабилен, чем *Paco*) и их спектральные особенности, можно сказать, что ЭСП растворов мезо-октаметилкаликс(4)пиррола фиксируют динамическое равновесие между различными конформерами, по-видимому, между *1,3-Alt* и *Cone*, при этом концентрация конформера *1,3-Alt* является преобладающей, что согласуется с данными ^1H ЯМР спектроскопии [1]. Тем не менее, молекулы раствори-

теля стабилизируют молекулярную полость каликс(4)пиррола в конформации *Cone*, причем устойчивость этой конформации увеличивается с увеличением размера молекулы растворителя.

ВЫВОДЫ

На основании анализа модельных и экспериментальных ЭСП показано, что в отличие от простейших каликсаренов, в ЭСП которых конформационные равновесия не проявляются [19], в изученных растворителях существует динамическое равновесие между *1,3-Alt* и *Cone* конформе-

рами *мезо*-октаметилкаликс(4)пиррола, при этом концентрация конформера *1,3-Alt* является преобладающей. Молекулы растворителя стабилизируют молекулярную полость каликс(4)пиррола в конформации *Cone*, устойчивость которой увеличивается с увеличением размера молекулы растворителя.

Оценка конформационных равновесий в различных растворителях при сравнении экспериментальных электронных спектров поглощения с модельными может дополнить сведения, получаемые при анализе ЯМР спектров, а также значительно расширить круг изучаемых растворителей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gale A.G, Sessler J.L., Král V. // Chem. Commun. 1998. P. 1-8. DOI: 10.1039/A706280J.
2. Sessler J.L., Anzenbacher P., Jr., Miyaji H., Jursíková K., Bleasdale E.R., Gale A.G. // Ind. Eng. Chem. Res. 2000. V. 39. N 10. P. 3471-3478. DOI: 1039/a706280j.
3. Койфман О.И., Мамардашвили Н.Ж. // Изв. РАН. Сер. хим. 2013. Т. 62. Вып. 1. С. 124-133.
4. Мамардашвили Г.М., Мамардашвили Н.Ж., Койфман О.И. // Усп. хим. 2015. Т. 84. Вып. 3. С. 275-287. DOI: 10.1070/RCR4439.
5. Wintergerst M.P., Levitskaia T.G., Moyer B.A, Sessler J.L., Delmau L.H. // J. Am. Chem. Soc. 2008. V. 130. N 12. P. 4129-4139. DOI: 10.1021/ja7102179.
6. Kim S.K., Sessler J.L., Gross D.E., Lee C.-H., Kim J.S., Lynch V.M., Delmau L.H., Hay B.P. // J. Am. Chem. Soc. 2010. V. 132. N 16. P. 5827-5836. DOI: 10.1021/ja100715e.
7. Gale P.A., Sessler J.L., Král V., Lynch V. // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118. N 21. P. 5140-5141. DOI: 10.1021/ja960307r.
8. Allen W.E., Gale P.A., Brown C.T., Lynch V.M., Sessler J.L. // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118. N 49. P. 12471-12472. DOI: 10.1021/ja9632217.
9. Liu K., Xu J., Sun Y., Guo Y., Jiang S., Shao S. // Spectrochim. Acta A. 2008. V. 69. P. 1201-1206. DOI: 10.1016/j.saa.2007.06.027.
10. Суров О.В. // ЖОХ. 2008. Т. 78. Вып. 4. С. 621-626. DOI: 10.1134/S1070363208040154.
11. Суров О.В. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2009. Т. 52. Вып. 8. С. 56-58.
12. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J.L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J.A., Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J.M., Klene M., Knox J.E., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Martin

REFERENCES

1. Gale A.G, Sessler J.L., Král V. // Chem. Commun. 1998. P. 1-8. DOI: 10.1039/A706280J.
2. Sessler J.L., Anzenbacher P., Jr., Miyaji H., Jursíková K., Bleasdale E.R., Gale A.G. // Ind. Eng. Chem. Res. 2000. V. 39. N 10. P. 3471-3478. DOI: 1039/a706280j.
3. Koifman O.I., Mamardashvili N.Zh. // Izv. RAN. Ser. Khim. 2013. V. 62. N 1. P. 124-133. DOI: 1066-5285/13/6201-123 (in Russian).
4. Mamardashvili G.M., Mamardashvili N.Zh., Koifman O.I. // Usp. Khimii. 2015. V. 84. N 3. P. 275-287. DOI: 10.1070/RCR4439 (in Russian).
5. Wintergerst M.P., Levitskaia T.G., Moyer B.A, Sessler J.L., Delmau L.H. // J. Am. Chem. Soc. 2008. V. 130. N 12. P. 4129-4139. DOI: 10.1021/ja7102179.
6. Kim S.K., Sessler J.L., Gross D.E., Lee C.-H., Kim J.S., Lynch V.M., Delmau L.H., Hay B.P. // J. Am. Chem. Soc. 2010. V. 132. N 16. P. 5827-5836. DOI: 10.1021/ja100715e.
7. Gale P.A., Sessler J.L., Král V., Lynch V. // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118. N 21. P. 5140-5141. DOI: 10.1021/ja960307r.
8. Allen W.E., Gale P.A., Brown C.T., Lynch V.M., Sessler J.L. // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118. N 49. P. 12471-12472. DOI: 10.1021/ja9632217.
9. Liu K., Xu J., Sun Y., Guo Y., Jiang S., Shao S. // Spectrochim. Acta A. 2008. V. 69. P. 1201-1206. DOI: 10.1016/j.saa.2007.06.027.
10. Surov O.V. // Russ. J. Gen. Chem. 2008. V. 78. N 4. P. 602-607. DOI: 10.1134/S1070363208040154.
11. Surov O.V. // Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. 2009. V. 52. N. 8. P. 56-58 (in Russian).
12. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J.L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J.A., Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J.M., Klene M., Knox J.E., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O.,

- R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J.** 2013, Gaussian 09, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT.
13. **Andrienko G.A.** <http://www.chemcraftprog.com>.
 14. **Wu Y.-D., Wang D.-F., Sessler J.L.** // J. Org. Chem. 2001. V. 66. N 11. P. 3739-3746. DOI: 10.1021/jo0016273.
 15. **van Hoorn W.P., Jorgensen W.L.** // J. Org. Chem. 1999. V. 64. N 20. P. 7439-7444. DOI: 10.1021/jo9907437.
 16. **Blas J.R., Márquez M., Sessler J.L., Luque F.J., Orozco M.** // J. Am. Chem. Soc. 2002. V. 124. N 43. P. 12796-12805. DOI: 10.1021/ja020318m.
 17. **Woods C.J., Camiolo S. Light M.E., Coles S.J., Hursthouse M.B., King M.A., Gale P.A., Essex J.W.** // J. Am. Chem. Soc. 2002. V. 124. N 29. P. 8644-8652. DOI: 10.1021/ja025572t.
 18. Cambridge Crystallographic Data Centre, 12 Union Road, Cambridge CB2 1EZ, UK, www.ccdc.cam.ac.uk.
 19. **Surov O.V., Krestianinov M.A., Voronova M.I.** // Spectrochim. Acta A. 2015. V. 134. P. 121-126. DOI: 10.1016/j.saa.2014.06.048.
13. **Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J.** 2013, Gaussian 09, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT.
 13. **Andrienko G.A.** <http://www.chemcraftprog.com>.
 14. **Wu Y.-D., Wang D.-F., Sessler J.L.** // J. Org. Chem. 2001. V. 66. N 11. P. 3739-3746. DOI: 10.1021/jo0016273.
 15. **van Hoorn W.P., Jorgensen W.L.** // J. Org. Chem. 1999. V. 64. N 20. P. 7439-7444. DOI: 10.1021/jo9907437.
 16. **Blas J.R., Márquez M., Sessler J.L., Luque F.J., Orozco M.** // J. Am. Chem. Soc. 2002. V. 124. N 43. P. 12796-12805. DOI: 10.1021/ja020318m.
 17. **Woods C.J., Camiolo S. Light M.E., Coles S.J., Hursthouse M.B., King M.A., Gale P.A., Essex J.W.** // J. Am. Chem. Soc. 2002. V. 124. N 29. P. 8644-8652. DOI: 10.1021/ja025572t.
 18. Cambridge Crystallographic Data Centre, 12 Union Road, Cambridge CB2 1EZ, UK, www.ccdc.cam.ac.uk.
 19. **Surov O.V., Krestianinov M.A., Voronova M.I.** // Spectrochim. Acta A. 2015. V. 134. P. 121-126. DOI: 10.1016/j.saa.2014.06.048.

*Поступила в редакцию 03.02.2016
Принята к опубликованию 16.05.2016*

*Received 03.02.2016
Accepted 16.05.2016*