

**СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НОВОГО  
БЕНЗТИАЗОЛОВОГО ПОЛИМЕТИНОВОГО КРАСИТЕЛЯ**

Е. И. Плигин<sup>1</sup>, А. В. Лавыш<sup>1</sup>, А. А. Луговский<sup>2</sup>,  
Е. С. Воропай<sup>2</sup>, Э. Е. Копишев<sup>3</sup>, А. А. Маскевич<sup>1\*</sup>

УДК 535.371/547.681:547.458.68

<https://doi.org/10.47612/0514-7506-2022-89-6-762-769>

<sup>1</sup> Гродненский государственный университет имени Янки Купалы,  
Гродно, Беларусь; e-mail: amaskevich@grsu.by

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>3</sup> Евразийский национальный университет имени Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

(Поступила 25 октября 2022)

Исследованы спектры поглощения и флуоресценции новой стироловой производной тиофлавина Т тозилата 2-{(1E,3E)-4-[4-(диметиламино)-2,6-диметилфенил]бута-1,3-диен-1-ил}-3-этил-1,3-бензтиазолия-3 (Th-C23) в растворителях различной полярности и вязкости, а также при его встраивании в структуру амилоидных фибрилл и бычьего сывороточного альбумина. Характерной особенностью красителя является чрезвычайно низкий квантовый выход флуоресценции в маловязких растворителях ( $10^{-4}$  в воде), который, однако, значительно возрастает в вязких растворах и при встраивании в структуру белков или амилоидных фибрилл. В последнем случае квантовый выход увеличивается в  $8 \cdot 10^3$  раз. На основании экспериментальных исследований и квантово-химических расчетов показано, что Th-C23 проявляет свойства молекулярного ротора. Увеличение квантового выхода флуоресценции в вязких растворах и при встраивании в биополимеры является результатом ограничения торсионного вращения фрагментов молекулы, приводящего к тушению флуоресценции. Длинноволновое положение спектра поглощения и спектра флуоресценции нового красителя в красной области (520 и 600 нм) позволяет использовать его в качестве флуоресцентного маркера, чувствительного к вязкости (жесткости) микроокружения в условиях не только *in vitro*, но и *in vivo*.

**Ключевые слова:** стироловые производные тиофлавина Т, флуоресцентные молекулярные роторы, амилоидные фибриллы.

The absorption and fluorescence spectra of a new styryl derivative of thioflavin T tosylate 2-{(1E,3E)-4-[4-(dimethylamino)-2,6-dimethylphenyl]buta-1,3-dien-1-yl}- 3-ethyl-1,3-benzothiazolium-3 (Th-C23) in solvents of different polarity and viscosity, as well as when it is incorporated into the structure of amyloid fibrils and bovine serum albumin are investigated. A characteristic feature of the dye is an extremely low fluorescence quantum yield in low-viscosity solvents ( $10^{-4}$  in water), which, however, increases significantly in viscous solutions and when incorporated into the structure of proteins or amyloid fibrils. In the latter case, the quantum yield increases by  $8 \times 10^3$  times. Based on experimental studies and quantum chemical calculations, it is shown that Th-C23 exhibits molecular rotor properties. An increase in the fluorescence quantum yield in viscous solutions and upon incorporation into biopolymers is the result of limiting the torsion rotation of molecular fragments, leading to fluorescence quenching. The long-wavelength position of the absorption spectrum and the fluorescence spectrum of the new dye in the red region of the spectrum (520 and 600 nm) makes it possible to use it as a fluorescent marker sensitive to the viscosity (hardness) of the microenvironment not only *in vitro*, but also *in vivo*.

**Keywords:** styryl derivatives of thioflavin T, fluorescent molecular rotors, amyloid fibrils.

**SPECTRAL-LUMINESCENT PROPERTIES OF A NEW BENZETHIAZOLE POLYMETHINE DYE**

E. I. Pligin<sup>1</sup>, A. V. Lavysch<sup>1</sup>, A. A. Lugovskii<sup>2</sup>, E. S. Voropay<sup>2</sup>, E. E. Kopishev<sup>3</sup>, A. A. Maskevich<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Grodno State University named after Yanka Kupala, Grodno, Belarus; e-mail: amaskevich@grsu.by;

<sup>2</sup> Belarusian State University, Minsk, Belarus; <sup>3</sup> Eurasian National University named after L. N. Gumilyov, Astana, Kazakhstan)

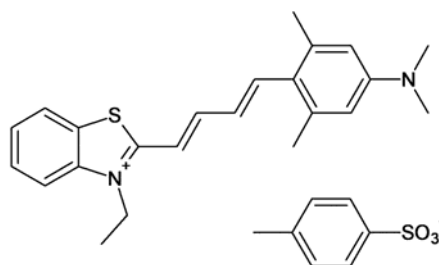
**Введение.** Флуоресцентные красители, способные встраиваться в структуру биополимеров без образования химической связи и, следовательно, оказывающие слабое влияние на свойства объектов, широко используются для биофизических исследований. Применяются также флуоресцентные молекулярные ротаторы (ФМР), для которых характерна сильная зависимость квантового выхода и длительности затухания флуоресценции от вязкости микроокружения. ФМР показали высокую информативность для детекции и исследования амилоидных фибрилл (АФ) [1—4], ДНК [5, 6] и процессов агрегации белков [7, 8]. В последнее время синтезированы бензтиазоловые производные тиофлавина Т (ThT) с поглощением и флуоресценцией в красной области спектра [9, 10], что позволяет использовать их для исследований в условиях как *in vitro*, так и *in vivo*.

Для количественного анализа с помощью флуоресцентных маркеров важным фактором является отношение интенсивности (квантового выхода) флуоресценции встроенного и свободного (несвязанного) красителя. Для ThT, квантовый выход которого в водном растворе чрезвычайно низок (0.0003 [11, 12]), это отношение  $>10^3$ . Для производных тиофлавина с увеличенной системой  $\pi$ -сопряжения отношение интенсивности флуоресценции встроенного и свободного красителя  $\leq 200$ —300 вследствие более высокого квантового выхода флуоресценции производных в растворе в несвязанном состоянии. Синтез и исследование производных ФМР с низким квантовым выходом в водных растворах являются актуальными.

В настоящей работе исследованы спектры поглощения и флуоресценции нового бензтиазолового полиметинового красителя 2- $\{(1E,3E)$ -4-[4-(dimethylamino)-2,6-dimethylphenyl]buta-1,3-dien-1-yl}-3-ethyl-1,3-benzothiazol-3-ium tosylate (Th-C23) в растворителях различной полярности и вязкости, а также при его встраивании в структуру АФ и бычьего сывороточного альбумина (БСА). Th-C23 проявляет свойства молекулярного ротатора, отношение интенсивностей флуоресценции встроенного и свободного красителей  $\sim 10^4$ .

**Эксперимент.** Спектры поглощения растворов красителя измерены с помощью спектрофотометра Specord 200 PC (Carl Zeiss, Германия), флуоресценции — спектрофлуориметра CM2203 (“Солар”, Беларусь). Математическая обработка полученных спектров проведена с помощью пакетов PeakFit 4.12 и Origin 6.0. Квантово-химические расчеты для молекулы Th-C23 в газовой фазе выполнены с использованием программного пакета Firefly 8.2.0 [13] в рамках теории функционала плотности (DFT) [14] трехпараметрическим гибридным функционалом Бекке—Ли—Янга—Парра (B3LYP) [15] и базисным набором функций 6-31G(*d,p*) [16]. Оптимизация геометрии выполнена для соединения в основном ( $S_0$ ) и возбужденном ( $S_1$ ) электронных синглетных состояниях. Расчеты возбужденного состояния осуществлены в рамках теории функционала плотности для нестационарных систем (TDDFT) с применением функционала B3LYP и базиса 6-31G(*d,p*). Чистота и гомогенность препарата проверена методом масс-хроматографии. Для приготовления растворов использованы растворители фирмы Sigma-Aldrich (США) без дополнительной очистки. АФ готовили из БСА (Sigma, США) по стандартной методике [17].

**Результаты и их обсуждение.** Молекула красителя содержит в качестве хромофорной группы аминобензольное кольцо и бензтиазоловый цикл, соединенные полиметиновым мостиком  $-(CH=CH)_2-$



Th-C23

При нейтральных pH в водном растворе молекула Th-C23 является катионом, а противоион представлен анионом *n*-толуолсульфоновой кислоты. Благодаря увеличенной системе  $\pi$ -сопряжения спектры поглощения и флуоресценции Th-C23 сдвинуты в красную область по сравнению со спектрами тиофлавина Т. Результаты квантово-химических расчетов показывают, что для равновесного основного электронного синглетного состояния ( $S_0$ ) характерна плоская конформация молекулы

Th-C23 (рис. 1). Минимуму энергии возбужденного электронного синглетного состояния ( $S_1$ ) соответствует скрученная конформация молекулы, при которой ароматические кольца расположены ортогонально. При этом дипольный электрический момент в равновесном  $S_1$ -состоянии на ~50 % больше, чем в  $S_0$ .

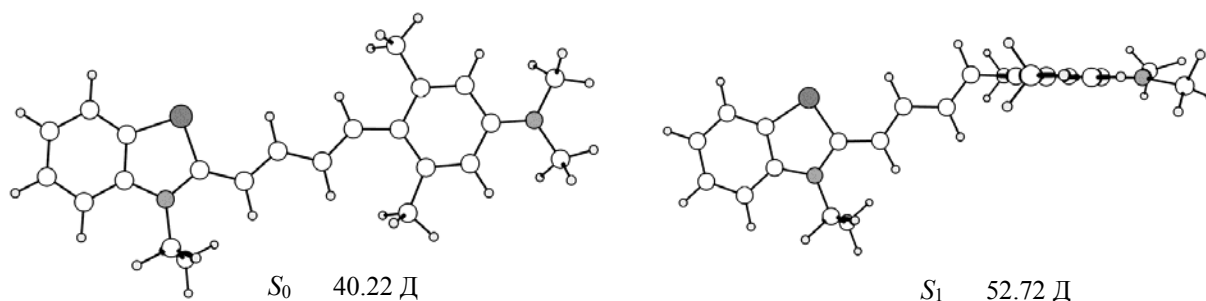


Рис. 1. Конформации молекулы Th-C23 и ее дипольные электрические моменты в основном ( $S_0$ ) и возбужденном ( $S_1$ ) электронных синглетных состояниях (фронтальный вид)

В качестве параметра, который определяет взаимное расположение ароматических фрагментов, выбран угол  $\varphi$  между плоскостями, в которых лежат бензотиазоловый и бензольный циклы. Динамика конформационного изменения молекулы Th-C23 выявлена с помощью расчета ее энергии в зависимости от угла  $\varphi$  для основного и возбужденного электронных состояний. Угол  $\varphi$  изменяли в диапазоне  $0\text{--}90^\circ$  с шагом  $10^\circ$ . После оптимизации геометрии и расчета энергии состояния  $S_0$  при фиксированных углах  $\varphi$  получена зависимость  $E_0(\varphi, \omega_0)$  (рис. 2, кривая 1). Остальные параметры  $\omega_0$  геометрии состояния  $S_0$  не фиксировались. Также для каждого фиксированного угла  $\varphi$  выполнены оптимизация геометрии и расчет энергии состояния  $S_1$  и получена зависимость  $E_1(\varphi, \omega_1)$  (кривая 2). Зависимость  $E_0(\varphi, \omega_0)$  показывает, что в состоянии  $S_0$  при увеличении угла  $\varphi$  энергия молекулы Th-C23 возрастает на  $\Delta E_0 \approx 5000 \text{ см}^{-1}$  и достигает максимума при  $\varphi = 90^\circ$ . В состоянии  $S_1$ , наоборот, энергия уменьшается на  $\Delta E_1 \approx 5600 \text{ см}^{-1}$ . Это указывает на то, что при фотовозбуждении молекулы переходят в неравновесное возбужденное состояние. Колебательная релаксация неравновесного состояния приводит к уменьшению энергии, что сопровождается вращением бензольного фрагмента. Процесс торсионной релаксации приводит молекулу в состояние, характеризующееся скрученной конформацией (ТИСТ-состояние). Торсионная релаксация в ТИСТ-состояние сопровождается уменьшением силы осциллятора  $f$  электронного перехода  $S_1 \rightarrow S_0$ , которая при  $\varphi = 90^\circ$  равна нулю (кривая 3), следовательно, ТИСТ-состояние является нефлуоресцирующим.

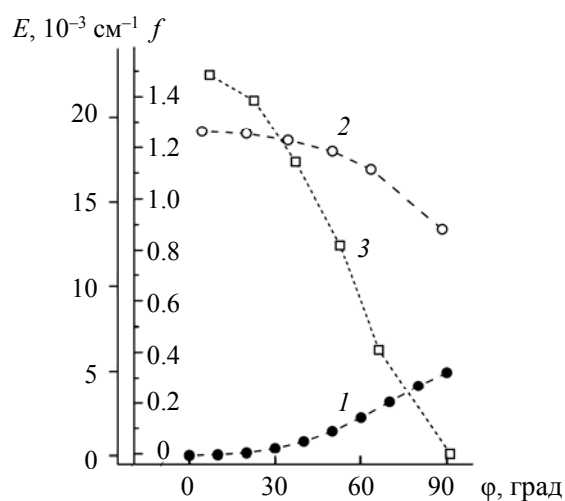


Рис. 2. Зависимости  $E_0(\varphi, \omega_0)$  (1) и  $E_1(\varphi, \omega_1)$  (2), а также зависимость силы осциллятора  $f$  электронного перехода  $S_1 \rightarrow S_0$  (3) молекулы Th-C23 от угла  $\varphi$

Вышеизложенное объясняется тем, что электронный переход  $S_1 \rightarrow S_0$  запрещен, поскольку волновые функции основного и возбужденного состояний для ТИСТ-конформации молекулы Th-C23 пространственно не перекрываются. Это видно из локализации рассчитанных граничных молекулярных орбиталей (МО), представленных квадратом волновой функции электронных состояний (рис. 3). Нижняя вакантная МО (НВМО) локализована преимущественно на бензольном фрагменте, в то время как верхняя заполненная МО (ВЗМО) — на бензотиазоловом фрагменте и на полиметиновом мостике. Таким образом, в соответствии с квантово-химическими расчетами торсионная релаксация молекулы Th-C23 приводит ее в нефлуоресцирующее ТИСТ-состояние и данный процесс можно рассматривать как конкурирующий с излучательным переходом из возбужденного состояния с плоской конформацией в основное состояние.

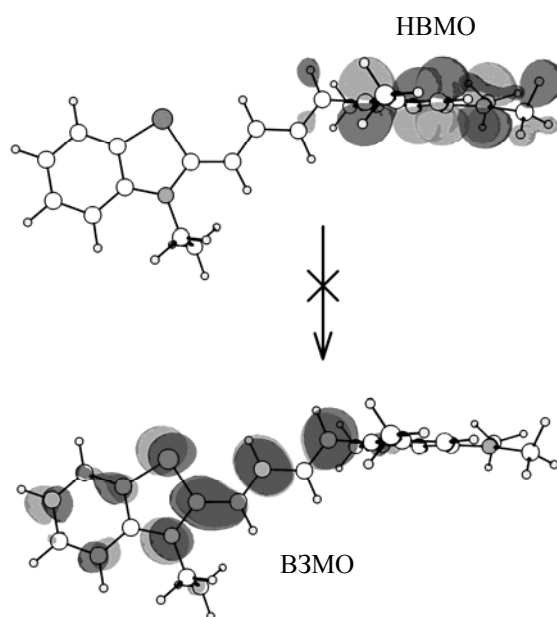


Рис. 3. Граничные молекулярные орбитали для ТИСТ-конформации молекулы Th-C23

Для определения роли торсионной релаксации в тушении флуоресценции Th-C23 изучена зависимость квантового выхода флуоресценции 98 %-го глицеринового раствора красителя от температуры. Спектры флуоресценции Th-C23 в глицерине при изменении температуры раствора от 20 до 50° С представлены на рис. 3. Видно, что изменение вязкости от 939 до 104 мПа · с вызывает уменьшение интенсивности флуоресценции в максимуме в 6.5 раз.

Квантовый выход флуоресценции зависит от соотношения констант скоростей излучательного перехода  $k_r$  и всех остальных процессов, приводящих к безызлучательной дезактивации возбужденного состояния:

$$q = k_r / (k_r + \sum k_{\text{инт}}), \quad (1)$$

где  $\sum k_{\text{инт}}$  — сумма констант скоростей процессов безызлучательной дезактивации возбужденного состояния. Для многих ароматических красителей, не являющихся молекулярными роторами, в качестве основного канала дезактивации возбужденного состояния рассматривается интеркомбинационная конверсия в триплетное состояние. Однако нами не выявлено заметной фосфоресценции красителя, в том числе при низкой температуре (77 К). На основе квантово-химических расчетов полагаем, что торсионная релаксация является основным тушащим флуоресценцию процессом. В таком случае  $\sum k_{\text{инт}} \approx k_{\text{ф}}$  ( $k_{\text{ф}}$  — константа скорости внутренней конверсии, обусловленной поворотом ароматических фрагментов молекулы относительно друг друга в возбужденном состоянии). В соответствии с соотношением Дебая—Стокса—Эйнштейна время торсионной релаксации прямо пропорционально  $\eta/T$ :

$$\tau = \frac{4\pi a^3}{3k_B} \eta/T,$$

где  $a$  — гидродинамический радиус фрагмента молекулы;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $\eta$  — вязкость;  $T$  — температура раствора. Поскольку  $k_\phi \sim 1/\tau_\phi$ , то  $k_\phi \sim T/\eta$ .

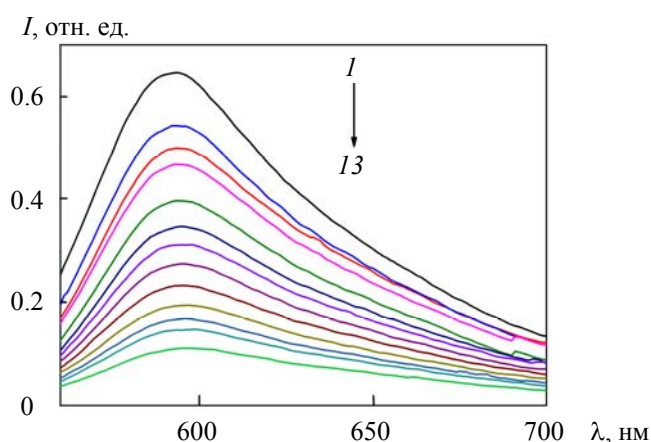


Рис. 4. Спектры флуоресценции красителя Th-C23 в 98 %-ном глицериновом растворе при температурах 20, 21, 22.5, 25, 27.5, 30, 32.5, 35, 37.5, 40, 42.5, 45 и 50 °C (1—13);  $\lambda_{\text{возб}} = 520$  нм

Поскольку константа скорости излучательного перехода не зависит от вязкости и температуры, из выражения (1) следует  $(1/q - 1) \sim T/\eta$ . Линейная зависимость  $(1/q - 1)$  от  $T/\eta$  (рис. 5, а) подтверждает, что в соответствии с рассматриваемым механизмом тушения флуоресценции красителя изменение квантового выхода в рассматриваемом интервале температур однозначно определяется соотношением  $T/\eta$ .

Как известно, вязкость растворителя зависит от температуры в соответствии с условием Аррениуса [18]:

$$\eta^{-1} = \eta_0^{-1} \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right),$$

где  $\Delta E_a$  — энергия активации вязкого течения растворителя.

Используя зависимость квантового выхода от  $T/\eta$ , можно записать  $1/q - 1 \sim T \exp(-\Delta E_a/k_B T)$ , или  $\ln((1/q - 1)/T) \sim (-\Delta E_a/k_B T)$ . Из рис. 5, б видно, что зависимость  $\ln((1/q - 1)/T)$  от  $1/T$  линейная, по углу наклона зависимости определена энергия активации тушащего процесса  $4.0 \cdot 10^3$  см<sup>-1</sup>, что близко к энергии активации вязкого течения глицерина ( $4.7 \cdot 10^3$  см<sup>-1</sup>). Это служит подтверждением того, что торсионная релаксация фрагментов молекулы Th-C23, а значит, и изменение квантового выхода флуоресценции определяются не энергией активации поворота фрагментов, а вязкостью растворителя.

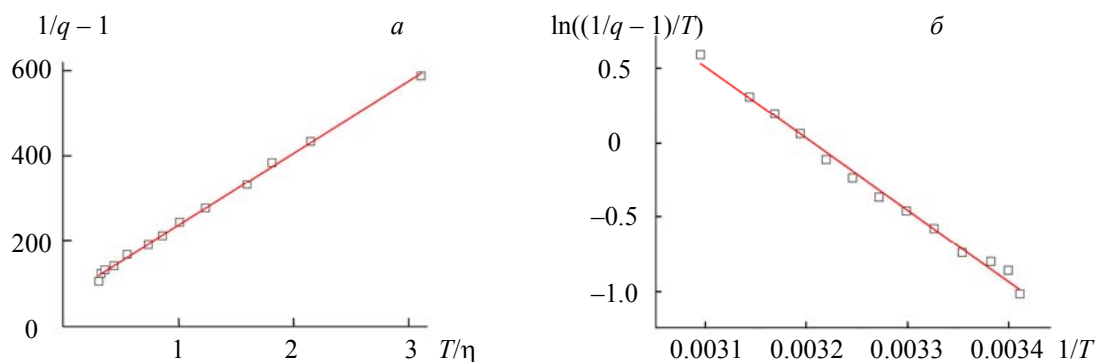


Рис. 5. Зависимости  $(1/q - 1)$  от  $T/\eta$  (а) и  $\ln((1/q - 1)/T)$  от  $1/T$  (б)

Полученные результаты показывают, что Th-C23 является флуоресцентным молекулярным ротором. В маловязких растворах торсионная релаксация — основной тушащий флуоресценцию процесс. Значительное увеличение квантового выхода флуоресценции красителя в вязких растворах вызвано уменьшением скорости торсионного вращения фрагментов молекулы, приводящего к тушению флуоресценции.

**Влияние полярности растворителей.** Для определения влияния полярности растворителей на спектральные свойства Th-C23 изучены спектры поглощения и флуоресценции красителя в воде, глицерине, этаноле и хлороформе с диэлектрическими проницаемостями  $\epsilon = 80, 42, 24, 4.8$  соответственно. Спектры поглощения и флуоресценции приведены на рис. 6 и 7. Основные спектральные характеристики нового красителя приведены в табл. 1. Видно, что в водном растворе спектр поглощения красителя наиболее коротковолновый. В малополярном хлороформе происходят значительный батохромный сдвиг ( $\sim 50$  нм) и уменьшение полуширины спектра. Гипсохромный сдвиг спектра поглощения в полярных растворителях характерен также для тиофлавина Т и большинства стироловых производных [9, 17]. Это является результатом сольватной и торсионной релаксации и значительной стабилизации основного состояния молекулы в полярном микроокружении [17, 19].

Спектр поглощения водного раствора красителя в присутствии АФ испытывает значительное уширение (рис. 6, кривая 3), что вызвано появлением длинноволновой полосы, обусловленной поглощением молекул красителя Th-C23, встроенного в фибриллы в мономерной форме. Регистрируемый спектр представляет собой суперпозицию спектра свободного красителя и связанного с АФ. Результат разложения спектра также представлен на рис. 6. Видно, что краситель встраивается в малополярную область фибрилл и имеет спектр поглощения при  $\sim 570$  нм. В присутствии БСА спектр поглощения красителя испытывает также значительный батохромный сдвиг  $\sim 30$  нм. При встраивании в малополярную область белка или бороздки АФ молекулы красителя попадают в жесткое малополярное окружение, ограничивающее релаксационные процессы. В этом случае стабилизация и уменьшение энергии основного состояния не происходят, спектр поглощения красителя является наиболее длинноволновым.

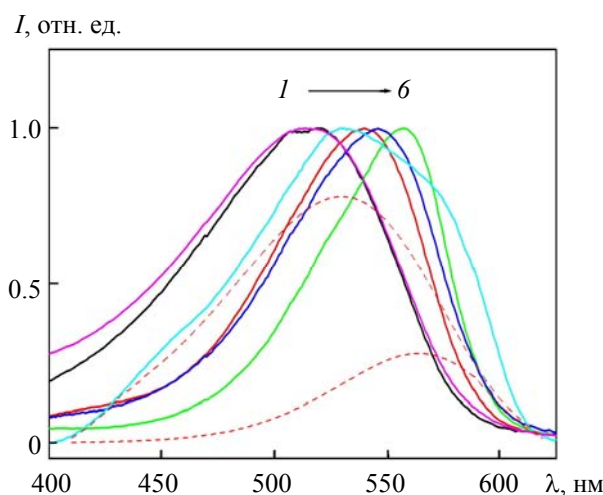


Рис. 6. Нормированные спектры поглощения красителя Th-C23 (2.5 мкмоль/л) в различных растворителях: вода (1), глицерин (2), вода + 0.1 мг/мл АФ (3), этанол (4), вода + 1.0 мг/мл БСА (5), хлороформ (6); спектр красителя в присутствии АФ представлен после вычитания рэлеевского рассеяния раствора; штриховые кривые — результат разложения спектра 3 на две лог-нормальные компоненты

Интенсивность и квантовый выход флуоресценции Th-C23 возрастают с уменьшением диэлектрической проницаемости растворителя (рис. 7, табл. 1), т. е. зависят не только от вязкости растворителя. Также в полярных растворителях наблюдается незначительный батохромный сдвиг спектров ( $\sim 10$  нм). Измерения наведенного поглощения с фемтосекундным временным разрешением показывают, что в полярных растворителях константа скорости безызлучательной дезактивации молекул ThT и его производных увеличивается [20]. На основе корреляции между константой скорости

безызлучательной дезактивации и полярностью растворителя в [20] сделан вывод о том, что наряду с вязкостью диэлектрические свойства растворителя влияют на фотофизические процессы в этих молекулах. Наши исследования позволяют предположить, что для производных ThT, характеризующихся удлиненной цепочкой  $\pi$ -сопряжения, влияние полярности растворителя на скорость внутримолекулярного переноса заряда, сопровождающего торсионную релаксацию, и на квантовый выход флуоресценции может быть еще более существенным, чем для ThT.

**Т а б л и ц а 1.** Спектральные характеристики красителя Th-C23 в различных растворителях

Растворитель	$\epsilon$	$\eta$ , мПа · с	$\lambda_{\text{погл}}$ , нм	$\lambda_{\text{фл}}$ , нм	$q$
Вода	80	1.0	520	582	0.0001
Глицерин	42	939	515	593	0.0090
Этанол	24	1.2	540	590	0.0002
Хлороформ	4.8	0.57	558	595	0.0004
Вода + БСА (1 мг/мл)	80	1.0	546	588	0.2
Вода + АФ (0.1 мг/мл)	80	1.0	570	597	0.8

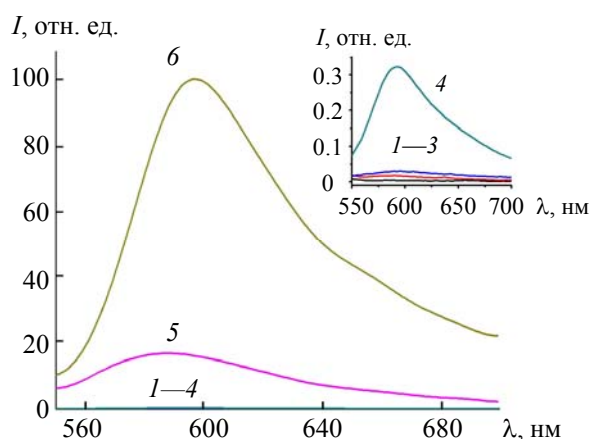


Рис. 7. Спектры флуоресценции Th-C23 (2.5 мкмоль/л) в различных растворителях: вода (1), этанол (2), хлороформ (3), глицерин (4), вода + 1.0 мг/мл БСА (5), вода + 0.1 мг/мл АФ (6); на вставке — спектры 1—4 в увеличенном масштабе

Квантовый выход флуоресценции красителя в водном растворе при добавлении белка БСА и АФ значительно возрастает (0.2 и 0.8). Интенсивность флуоресценции в присутствии БСА и АФ увеличивается в  $4 \cdot 10^3$  и  $2 \cdot 10^4$  раз. На основании модели молекулярного ротора можно дать объяснение увеличения квантового выхода флуоресценции красителя в присутствии в растворе белков или АФ. Действительно, при встраивании в структуру биополимеров имеет место значительное (в случае БСА) или полное ограничение (в случае АФ) торсионного вращения фрагментов молекулы, что приводит к увеличению квантового выхода на 3—4 порядка.

Ограничение торсионного движения фрагментов молекулы мало влияет на положение спектра флуоресценции. Поскольку флуоресценция происходит из неравновесного возбужденного состояния, когда релаксация осуществляется лишь частично, положение спектра поглощения в большей степени зависит от полярности растворителя, чем положение спектра флуоресценции.

**Заключение.** На основании экспериментальных данных и квантово-химических расчетов показано, что новый бензтиазоловый краситель (Th-C23) в водном растворе имеет спектр поглощения с максимумом при 520 нм и спектр флуоресценции в красной области и относится к классу молекулярных роторов. Торсионная релаксация фрагментов молекулы является основным тушащим флуоресценцию процессом. Квантовый выход флуоресценции в вязких растворах возрастает в результате ограничения торсионной подвижности молекулы. При встраивании в структуру белков и амилоидных фибрилл происходит практически полное блокирование торсионной динамики молекулы, при этом квантовый выход свечения увеличивается более чем на три порядка. Новый краситель может

быть эффективным инструментом для изучения белков, детекции амилоидных фибрилл и исследования механизмов их образования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования Республики Беларусь (ГПНИ “Конвергенция-2025”, задание 3.01.3, ГПНИ “Фотоника и электроника для инноваций”, задание 1.5). Бензтиазоловый полиметиновый краситель Th-C23 синтезирован доцентом кафедры лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета А. А. Луговским.

- [1] **N. H. Mudliar, P. K. Singh.** *Chem. Comm.*, **55** (2019) 3907—3910, doi: 10.1039/C9CC01262A
- [2] **A. K. Mora, S. Nath.** *J. Phys. Chem. B*, **123**, N 41 (2019) 8767—8776, doi: 10.1021/acs.jpcc.9b05922
- [3] **S. Freire, M. H. de Araujo, W. Al-Soufi, M. Novo.** *Dyes and Pigments*, **110** (2014) 97—105, doi: 10.1016/j.dyepig.2014.05.004
- [4] **A. Hawe, M. Sutter, W. Jiskoot.** *Pharm. Res.*, **25** (2008) 1487—1499, doi: 10.1007/s11095-007-9516-9
- [5] **W. L. Goh, M. Y. Lee, T. X. Lim, J. S. Chua, S. Brenner, F. J. Ghadessy, Y. N. Teo.** *Sci. Rep.*, **8** (2018) 12946—12958, doi: 10.1038/s41598-018-31197-9
- [6] **D. Dziuba, R. Pohl.** *Chem. Comm.*, **51** (2015) 4880—4882, doi: 10.1039/C5CC00530B
- [7] **N. R. Rovnyagina, N. N. Sluchanko, T. N. Tikhonova, V.V. Fadeev, A. Yu. Litskevich, A. A. Maskevich, E. A. Shirshin.** *Int. J. Biol. Macromol.*, **108** (2018) 284—290, doi: 10.1016/j.ijbiomac.2017.12.002
- [8] **A. A. Маскевич, С. А. Кургузенков, А. В. Лавыш.** *Вісник ГрДЗУ імя Янкі Купалы. Сер. 2, Матэматыка. Фізіка. Інфарматыка, вылічальна тэхніка і кіраванне*, **151**, № 2 (2013) 75—85
- [9] **A. I. Sulatskaya, M. I. Sulatsky, O. I. Povarova, N. P. Rodina, I. M. Kuznetsova, A. A. Lugovskii, A. A. Maskevich, E. S. Voropay, A. V. Lavysh, K. K. Turoverov.** *Dyes and Pigments*, **157** (2018) 385—395, doi: 10.1016/j.dyepig.2018.05.006
- [10] **K. Vus, V. Trusova, G. Gorbenko, R. T. Sood, P. Kinnunen.** *J. Lumin.*, **159** (2015) 284—293, doi: 10.1016/j.jlumin.2014.10.042
- [11] **A. I. Sulatskaya, A. A. Maskevich, I. M. Kuznetsova, V. N. Uversky, K. K. Turoverov.** *PLoS One*, **5**, N 10 (2010) 15385-e15385, doi: 10.1371/journal.pone.0015385
- [12] **V. I. Stsiapura, A. A. Maskevich, V. A. Kuzmitsky, V. N. Uversky, I. M. Kuznetsova, K. K. Turoverov.** *J. Phys. Chem. B*, **112**, N 49 (2008) 15893—15902, doi: 10.1021/jp805822c
- [13] **A. A. Granovsky.** *Fire Fly* version 8.1.0; <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
- [14] **R. G. Par, W. Yang.** *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press (1989) 352
- [15] **A. D. Becke.** *J. Chem. Phys.*, **98** (1993) 1372—1377, doi: 10.1063/1.464304
- [16] **R. Ditchfield, W. J. Hehre, J. A. Pople.** *J. Chem. Phys.*, **54** (1971) 724—728, doi: 10.1063/1.1674902
- [17] **A. A. Maskevich, V. I. Stsiapura, V. A. Kuzmitsky, I. M. Kuznetsova, O. I. Povarova, V. N. Uversky, K. K. Turoverov.** *J. Proteome Res.*, **6**, N 4 (2007) 1392—1401, doi: 10.1021/pr0605567
- [18] **R. O. Loutfy, B. A. Arnold.** *J. Phys. Chem.*, **86** (1982) 4205—4211, doi: 10.1021/j100218a023
- [19] **A. A. Маскевич.** *Журн. Бел. гос. ун-та. Фізика*, № 2 (2021) 4—14 [**A. A. Maskevich.** *J. Belarusian State University. Physics*, **2** (2021) 4—14, doi: 10.33581/2520-2243-2021-2-4-14]
- [20] **V. I. Stsiapura, A. A. Maskevich, S. A. Tikhomirov, O. V. Buganov.** *J. Phys. Chem. A*, **114** (2010) 8345—8350, doi: 10.1021/jp105186z