

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

УДК 535.36; 539.2; 539.6

ИЗУЧЕНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ
МОЛЕКУЛЫ ТОЛУОЛА НА ОСНОВЕ ИЗОТРОПНЫХ И АНИЗОТРОПНЫХ
СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

А. А. Абсанов¹, Ш. У. Умидуллаев¹, М. Т. Шоимов¹,
И. Р. Абдурахмонов², Ф. А. Салахитдинов¹, Х. А. Кодиров¹,
А. Х. Сафаров¹, А. А. Болиев¹

С использованием спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) в сочетании с квантово-химическими расчётами исследован эффект несовпадения (Non-Coincidence Effect, NCE) [1] в молекуле толуола. На основе сравнительного анализа изотропных и анизотропных спектров КР установлены частотные сдвиги и спектральные изменения, характерные для соответствующих колебательных мод. Показано, что диполь-дипольные и иные межмолекулярные взаимодействия являются определяющими факторами возникновения эффекта несовпадения. Для характеристики электронных и геометрических свойств молекулы толуола проведены расчёты на уровне точности программы расчётов по теории DFT/B3LYP/6-311++G(d,p). Анализ граничных орбиталей HOMO–LUMO (Highest occupied molecular orbital–Lowest unoccupied molecular orbital) позволил охарактеризовать реакционную способность молекулы и особенности внутримолекулярного переноса заряда. Посредством карт молекулярного электростатического потенциала (МЭП) идентифицированы электрофильные и нуклеофильные центры молекулы. Установлено удовлетворительное согласие теоретических результатов с экспериментальными данными КР, что обеспечивает надёжную интерпретацию электронной структуры и межмолекулярных взаимодействий в толуоле.

Ключевые слова: комбинационное рассеяние света (КР), π -связь, толуол, эффекты несовпадения полос (non-coincidence effects), поверхность молекулярного электростатического потенциала (МЭП), граничные молекулярные орбитали (HOMO–LUMO).

¹ Самаркандский государственный университет им. Ш. Рашидова, 140104 Республика Узбекистан, Самарканд, Университетский бул., 15; e-mail: shoimovmurodjon@gmail.com.

² Самаркандский государственный медицинский университет, 140100 Республика Узбекистан, Самарканд, ул. Амира Темура, 18А.

1. Введение. Исследование молекулярной структуры и колебательных свойств ароматических углеводородов относится к числу приоритетных задач современной молекулярной спектроскопии [1–3]. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) и инфракрасная (ИК) спектроскопия зарекомендовали себя как высокоинформативные аналитические методы, позволяющие охарактеризовать природу химических связей, распределение электронной плотности и межмолекулярные взаимодействия [4, 5]. Делокализация π -электронов в ароматических молекулах оказывает существенное влияние на формирование колебательных спектров, и данный эффект отчетливо проявляется в интенсивности спектральных линий и частотных сдвигах [6]. Толуол (C_7H_8) является одним из самых простых и важнейших ароматических углеводородов среди производных бензола. Молекула состоит из бензольного кольца и метильной группы ($-CH_3$), и частота ароматического резонанса кольца определяется его электронной структурой [7]. Толуол находит широкое применение в химической промышленности в качестве органического растворителя, а также служит исходным сырьём для синтеза полимеров, красителей, фармацевтических препаратов, нефтехимических продуктов и высокоэнергетических материалов [8]. Комплексное исследование электронной структуры и колебательных свойств молекулы толуола представляет несомненный интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. В ранее выполненных работах колебательные спектры толуола, как правило, исследовались отдельно – методами КР или ИК-спектроскопии [9, 10]. При этом полное отнесение колебательных полос, в особенности обусловленных взаимодействием ароматического кольца с метильной группой, нередко оставалось неполным. Ряд публикаций ограничивался описанием лишь основных колебательных мод без детального анализа корреляции между спектральными интенсивностями и электронной структурой молекулы [11]. Помимо этого, в литературе сохраняются противоречия относительно чувствительности валентных колебаний $C=C$ и валентных мод $C-H$ в молекуле толуола к межмолекулярным взаимодействиям и эффектам поляризации [12]. Совместное применение спектроскопии комбинационного рассеяния и квантово-химических расчётов позволяет более полно интерпретировать колебательные свойства молекулы толуола. Спектроскопия КР обладает высокой чувствительностью к симметричным колебаниям ароматического кольца, в отличие от широко используемой инфракрасной спектроскопии, эффективной при определении колебательных мод, связанных с изменением дипольного момента [13]. Таким образом, применение спектроскопии комбинационного рассеяния позволяет идентифицировать основные колебательные моды молекулы и объяснить их физическую природу. Симмет-

ричное пульсирующее колебание ароматического кольца обычно наблюдается в области $\sim 1000 \text{ см}^{-1}$ и проявляется с высокой интенсивностью в спектре КР [14]. Кроме того, валентные колебания С-Н в диапазоне $2800\text{--}3100 \text{ см}^{-1}$ чувствительны к эффектам поляризации и межмолекулярным взаимодействиям [15]. В настоящей работе проведено исследование колебательных свойств молекулы толуола с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния и квантово-химических расчётов. Основное внимание уделено анализу колебательных мод, интенсивностей спектральных полос, частотных сдвигов, а также взаимосвязи колебательного поведения ароматического кольца с его электронными характеристиками. Полученные результаты служат научной основой для дальнейших исследований в области молекулярной физики и колебательной спектроскопии ароматических углеводородов.

2. Экспериментальный и теоретические методы. Спектры КР жидкого толуола регистрировались при комнатной температуре (298 К) с использованием рамановского спектрометра InViaRaman с дифракционной решеткой с периодом 1200 штрихов/мм и детектором Renishaw CCD Camera. Время экспозиции составляло 10 с, а разрешающая способность – 0.5 см^{-1} . В качестве источника возбуждающего света использовался непрерывный лазер Spectrum Stabilized Laser Module с длиной волны 532 нм и мощностью 50 мВт.

Для расчета оптимизированной геометрии и колебательных мод молекулы толуола использовался функционал B3LYP теории функционала плотности (DFT) и базисный набор 6-311++G(d,p) [16]. Эта комбинация является одним из эффективных методов для высокоточного расчета колебательных частот ароматических углеводородов [17]. В ходе расчетов была оптимизирована стабильная конфигурация молекулы с минимальной энергией; было установлено, что все рассчитанные колебательные частоты имеют положительные значения, что подтвердило соответствие структуры истинному состоянию минимума.

3. Результаты и обсуждение.

3.1. Изотропные и анизотропные спектры КР молекулы толуола и физический анализ колебательных мод. На рис. 1 представлены изотропная и анизотропная составляющие спектра комбинационного рассеяния молекулы толуола. Различия между изотропной и анизотропной составляющими спектра комбинационного рассеяния обусловлены различным характером изменения тензора поляризуемости молекулы при возбуждении отдельных нормальных колебательных мод. В зависимости от симметрии колебания вклад изотропной и анизотропной составляющих тензора поляризуемости

проявляется по-разному, что отражается в относительной интенсивности соответствующих полос спектра. Спектральные результаты показывают, что полностью симметричные колебания ароматического кольца формируют доминирующую интенсивность главным образом в изотропном компоненте, тогда как чувствительные к направлению и асимметричные колебательные моды усиливаются в анизотропном спектре.

В области $\sim 1000 \text{ см}^{-1}$ наблюдается интенсивная полоса, соответствующая полностью симметричному пульсирующему колебанию бензольного кольца (*ring-breathing vibration*) [13, 15]. В этой моде все связи C-C колеблются синфазно, в результате чего средняя поляризуемость молекулы изменяется до максимального значения. По этой причине данное колебание наблюдается как одна из самых интенсивных линий в изотропном спектре. Уменьшение интенсивности этой же моды в анизотропном компоненте указывает на то, что при данном колебании наряду с изменением изотропной поляризуемости некоторый вклад в формирование интенсивности спектра вносит изменение недиагональных компонентов тензора поляризуемости, обусловленное перераспределением электронной плотности под влиянием метильного заместителя. Полученные экспериментальные результаты хорошо согласуются с данными DFT-расчётов и свидетельствуют о том, что такое поведение обусловлено электронодонорным влиянием метильной группы, вызывающим перераспределение π -электронной плотности и появление анизотропной составляющей тензора поляризуемости. Дополнительная полоса при 1052 см^{-1} , проявляющаяся преимущественно в изотропной составляющей спектра, вероятно, обусловлена смешиванием пульсирующего колебания бензольного кольца с деформационными колебаниями метильной группы [15]. Возникновение данной полосы свидетельствует о наличии внутримолекулярного колебательного взаимодействия между ароматическим кольцом и заместителем, вследствие чего отдельные нормальные моды приобретают смешанный характер. Колебательные полосы в области $1156\text{--}1251 \text{ см}^{-1}$ относятся главным образом к плоскостным деформационным колебаниям ароматических связей C-H и валентным колебаниям связей C-C. При этом полоса 1206 см^{-1} относится к валентным колебаниям углерод-углеродной связи между кольцом и метильной группой C-CH₃ [13, 15]. Полосы 1379 и 1449 см^{-1} соответствуют деформационным колебаниям метильной группы (CH₃) [13, 15]. В ходе этих колебаний происходит угловая деформация связей C-H метильного заместителя, сопровождающаяся перераспределением электронной плотности между заместителем и ароматическим кольцом. В представленных спектрах обе полосы имеют более высокую интенсивность в анизотропной составляющей по сравнению с изотропной. Это свидетельствует о том, что данные ко-

лебательные моды сопровождаются преимущественным изменением анизотропной поляризуемости молекулы и вклад недиагональных компонентов тензора поляризуемости выражен более значительно. Следовательно, колебания метильной группы в данной области оказывают более существенное влияние на анизотропную составляющую спектра комбинационного рассеяния. В области $1606\text{--}1609\text{ см}^{-1}$ наблюдается интенсивная полоса, соответствующая валентному колебанию связи $\text{C}=\text{C}$ ароматического кольца [13, 15]. Данная колебательная мода характеризуется коллективным участием делокализованной π -электронной системы бензольного кольца и относится к числу наиболее интенсивных полос спектра комбинационного рассеяния. Максимум полосы в изотропной составляющей наблюдается при 1609 см^{-1} , тогда как в анизотропной составляющей – при 1606 см^{-1} . Небольшой частотный сдвиг (около 3 см^{-1}) может быть обусловлен различиями в регистрации изотропной и анизотропной составляющих спектра, а также особенностями изменения тензора поляризуемости при данном колебании. Высокая интенсивность полосы в обеих составляющих спектра свидетельствует о том, что валентное колебание $\text{C}=\text{C}$ вносит существенный вклад в формирование поляризационных характеристик молекулы толуола и отражает важную роль делокализованной π -электронной системы в её колебательном поведении. Высокочастотная область $2700\text{--}3100\text{ см}^{-1}$ соответствует валентным колебаниям связей C-H молекулы толуола. В представленных спектрах наблюдается отчётливое различие в распределении интенсивностей между изотропной и анизотропной составляющими [12, 15]. В изотропной составляющей наиболее интенсивными являются полосы 2866 , 2920 и 3053 см^{-1} , тогда как в анизотропной составляющей преобладают полосы 2947 и 3030 см^{-1} . Сильно выраженная полоса 3053 см^{-1} соответствует валентному колебанию ароматической связи C-H , а полоса 2920 см^{-1} соответствует симметричному валентному колебанию C-H связи в метильной группе (CH_3). Высокая интенсивность этих полос в изотропной составляющей свидетельствует о значительном изменении изотропной поляризуемости молекулы в процессе данного колебания. Слабая полоса в области 2733 см^{-1} не соответствует фундаментальному валентному колебанию и, вероятно, представляет собой обертона либо комбинационную полосу, возникающую вследствие эффекта ферми-резонанса. Появление данной полосы указывает на наличие внутримолекулярного взаимодействия между высокочастотными валентными и низкочастотными деформационными колебаниями, приводящего к перераспределению колебательной энергии между близкими по энергии модами. Полоса 2947 см^{-1} соответствует симметричному валентному колебанию связей C-H метильной группы, а полоса 3030 см^{-1} относится к валентному колебанию

ароматической связи С-Н. Более высокая интенсивность этих полос в анизотропной составляющей свидетельствует о существенном изменении недиагональных компонентов тензора поляризуемости при соответствующих колебаниях. Такое распределение интенсивностей может быть связано с влиянием электронодонорного метильного заместителя, который вызывает локальное перераспределение электронной плотности в π -системе бензольного кольца и может приводить к усилению анизотропной составляющей тензора поляризуемости. В целом анализ поляризационных спектров комбинационного рассеяния показывает, что различные колебательные моды молекулы толуола характеризуются неодинаковым вкладом изотропной и анизотропной составляющих тензора поляризуемости. Полосы 1000, 1052, 1206, 1251, 1609, 2866, 2920 и 3053 см^{-1} проявляют более высокую интенсивность в изотропной составляющей спектра, тогда как полосы 1156, 1379, 1449, 1606, 2947 и 3030 см^{-1} преобладают в анизотропной составляющей. Результаты квантово-химических расчётов DFT показали, а экспериментальные исследования методом спектроскопии комбинационного рассеяния подтвердили, что особенности распределения электронной плотности, обусловленные электронодонорным влиянием метильного заместителя, определяют различия между изотропной и анизотропной составляющими спектра КР молекулы толуола. Полученные результаты расширяют представления о взаимосвязи электронной структуры, распределения электронной плотности и колебательных свойств ароматических углеводородов и могут быть использованы при интерпретации спектров родственных ароматических соединений.

3.2. Молекулярный электростатический потенциал (МЭП). Карты молекулярного электростатического потенциала (МЭП) имеют важное значение для определения распределения электронной плотности и межмолекулярных взаимодействий в мономерном и димерном состояниях толуола. Анализ МЭП позволяет не только выявить электрофильные и нуклеофильные активные центры в молекуле, но и объяснить электронную природу изотропной и анизотропной интенсивностей, наблюдаемых в спектрах КР [18, 19]. На рис. 2(а) карта МЭП мономера толуола представлена в диапазоне от -2.568×10^{-2} эВ до 2.568×10^{-2} эВ. Красный цвет в центре кольца указывает на область с высоким отрицательным потенциалом, обусловленным делокализацией ароматических π -электронов.

Анализ карты молекулярного электростатического потенциала (МЭП) показывает, что распределение электронной плотности в молекуле толуола является неравномерным и определяется совместным влиянием ароматической π -электронной системы и

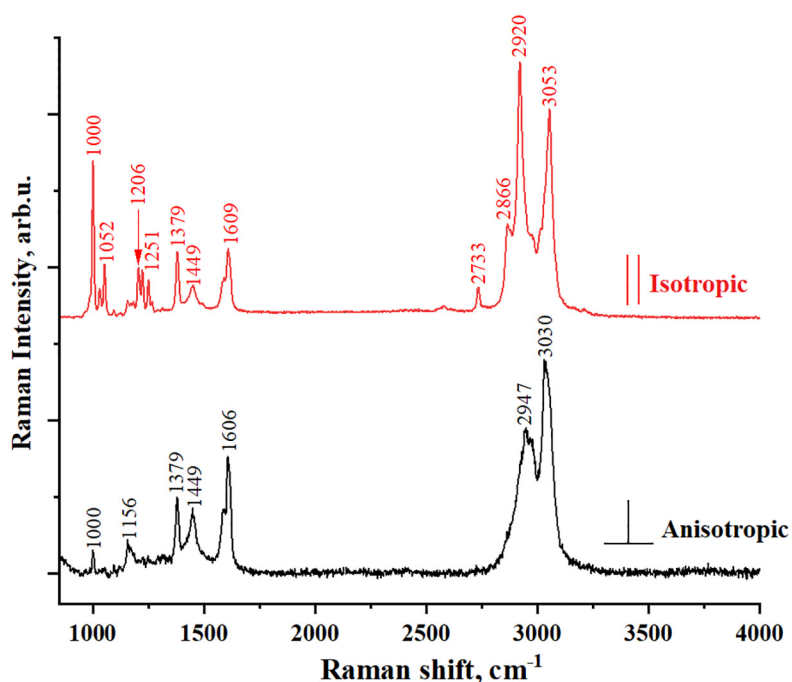


Рис. 1: Изотропные и анизотропные КР спектры толуола.

электронодонорного метильного заместителя. Области отрицательного электростатического потенциала локализованы преимущественно над ароматическим кольцом, тогда как положительный потенциал сосредоточен вблизи атомов водорода метильной группы. Такое распределение электронной плотности указывает на наличие выраженной электронной анизотропии молекулы и определяет особенности её поляризуемости. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными спектроскопии комбинационного рассеяния, свидетельствуя о том, что перераспределение электронной плотности оказывает существенное влияние на относительные интенсивности изотропной и анизотропной составляющих спектра КР. Таким образом, анализ МЭП подтверждает, что особенности электронной структуры молекулы толуола являются одним из основных факторов, определяющих её поляризационные свойства и характер проявления колебательных мод в спектре комбинационного рассеяния [20]. На рис. 2(б) приведена карта МЭП димера толуола в интервале от -2.568×10^{-2} эВ до 2.568×10^{-2} эВ. В структуре димера наблюдается, что атом водорода метильной группы одной молекулы образует межмолекулярное взаимодействие $\pi \dots \text{H}$ с ароматическим кольцом второй молекулы. По этой причине окраска области в центре кольца изменилась от красного к желтому цвету, то есть электронная плотность несколько снизилась.

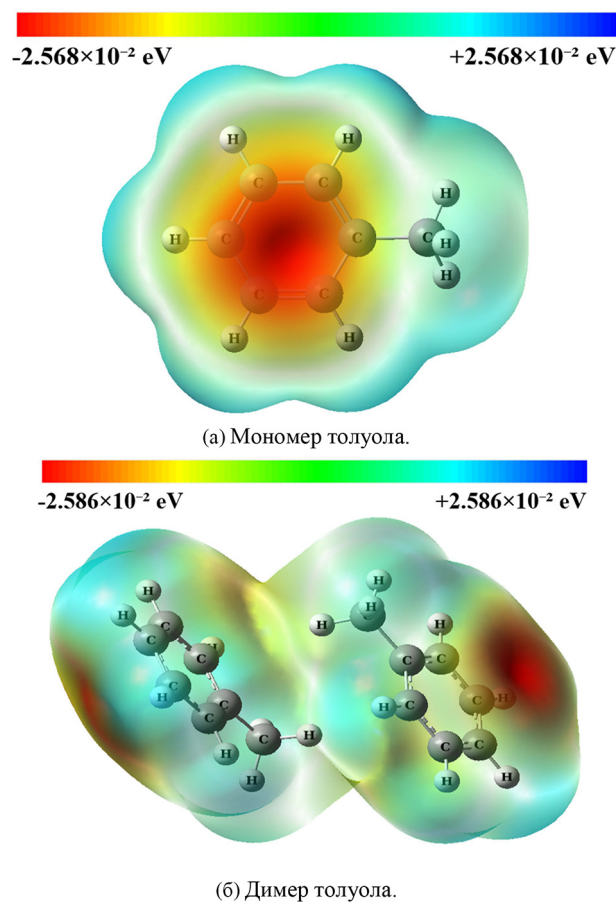


Рис. 2: Поверхности молекулярного электростатического потенциала для (а) мономерного и (б) димерного состояний толуола.

Результаты квантово-химических расчётов DFT показывают, что образование димера сопровождается перераспределением электронной плотности и усилением анизотропной составляющей тензора поляризуемости. Полученные экспериментальные данные хорошо согласуются с результатами DFT-расчётов, согласно которым образование димера сопровождается перераспределением электронной плотности и усилением анизотропии поляризуемости. Таким образом, ароматическая π -электронная система и межмолекулярные $\pi \dots \pi$ -взаимодействия являются одними из основных факторов, определяющих поляризационные свойства спектра комбинационного рассеяния молекулы толуола.

3.3. Анализ граничных молекулярных орбиталей (FMO). Граничные молекулярные орбитали – НОМО и LUMO – играют важную роль в определении электронной структуры, переноса заряда и химической стабильности молекулы. В молекуле толуола орбитали НОМО и LUMO преимущественно образованы π -электронами, делокализованными

по ароматическому кольцу. Анализ граничных молекулярных орбиталей показывает, что распределение электронной плотности НОМО локализовано главным образом на ароматическом кольце, тогда как орбиталь LUMO характеризуется иным распределением электронной плотности, отражающим возможные направления электронного перехода при возбуждении молекулы. Такое распределение электронной плотности указывает на особенности внутримолекулярного переноса заряда и согласуется с рассчитанной электронной структурой молекулы толуола. Также эта энергетическая щель (НОМО–LUMO) используется для демонстрации внутримолекулярного переноса заряда (ИСТ), кинетической поляризуемости и электронных спектров молекулы или молекулярной системы [21–23]. С помощью теоремы Купманса [24] можно рассчитать такие квантово-химические параметры, как глобальный индекс электрофильности, жесткость, химический потенциал, сродство к электрону и энергия ионизации. Граничные молекулярные орбитали толуола показаны на рис. 3. Используя энергии НОМО и LUMO, были рассчитаны различные квантово-химические параметры (табл. 1) с помощью следующих соотношений:

Жесткость:	$\eta = (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{НОМО}})/2$
Химический потенциал:	$\mu = (E_{\text{НОМО}} + E_{\text{LUMO}})/2$
Глобальный индекс электрофильности:	$\omega = \mu^2/2\eta$
Энергия ионизации:	$IE = -E_{\text{НОМО}}$
Сродство к электрону:	$EA = -E_{\text{LUMO}}$

Молекулы с большой разностью энергий НОМО–LUMO характеризуются высокой стабильностью и низкой реакционной способностью, тогда как малая энергетическая щель свидетельствует об обратном. Рассчитанная величина щели НОМО–LUMO для толуола составляет 6.306 эВ (табл. 1), что свидетельствует о значительной кинетической устойчивости и слабой реакционной способности молекулы. Широкая запрещённая зона препятствует свободному перераспределению электронов, вследствие чего в спектре КР преобладает изотропный вклад. Вместе с тем метильный заместитель усиливает локальную электронную анизотропию, обуславливая повышенную анизотропную интенсивность ряда колебательных мод.

Таблица 1

Некоторые квантово-химические параметры толуола

E_{HOMO}	–6.741 эВ
E_{LUMO}	–0.435 эВ
$E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$	6.306 эВ
Жесткость	3.153 В
Химический потенциал	–3.588 эВ
Глобальный индекс электрофильности	1.295
$IE = -E_{\text{HOMO}}$	6.741 эВ
$EA = -E_{\text{LUMO}}$	0.435 эВ

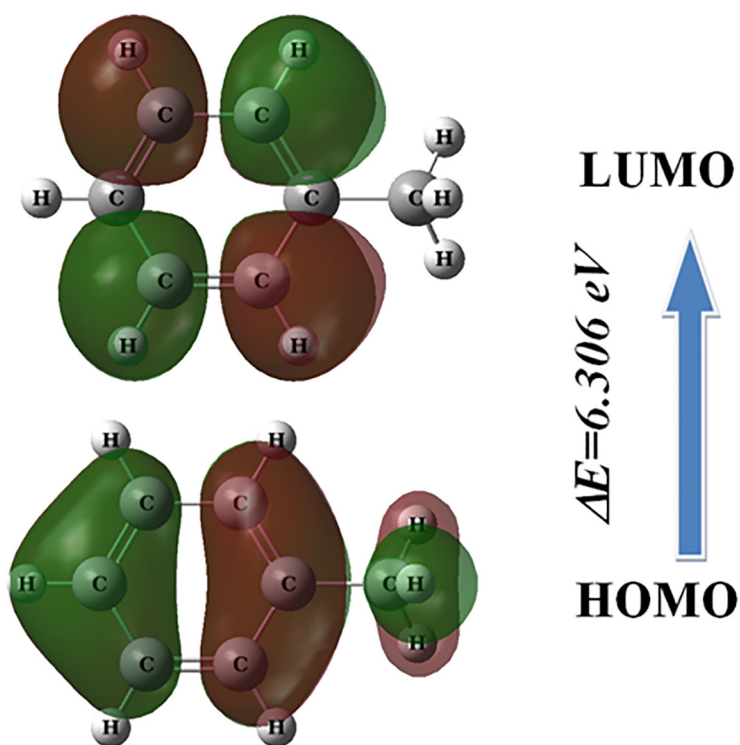


Рис. 3: Диаграмма граничных молекулярных орбиталей (HOMO и LUMO) молекулы толуола.

На рис. 3 зелёный и фиолетовый цвета обозначают противоположные фазы волновой функции (ψ) молекулярных орбиталей и используются для визуализации характера перекрывания атомных орбиталей. Эти цвета не характеризуют величину электронной плотности, а отражают только фазовые свойства орбиталей.

Заключение. Колебательные и электронные свойства молекулы толуола были исследованы с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния и квантово-химических расчётов на уровне точности программы расчётов по теории DFT. Результаты DFT-расчётов показали, а экспериментальные исследования методом спектроскопии комбинационного рассеяния подтвердили, что колебания ароматического кольца, особенно моды в области ~ 1000 и ~ 1600 см^{-1} , вносят определяющий вклад в формирование спектральных характеристик молекулы. Анализ распределения электронной плотности, молекулярного электростатического потенциала и граничных молекулярных орбиталей показал, что электронодонорное влияние метильной группы приводит к перераспределению электронной плотности и усилению анизотропной составляющей поляризуемости. Соотношение интенсивностей изотропной и анизотропной составляющих спектра КР, полученное экспериментально, находится в хорошем согласии с результатами DFT-расчётов и объясняется особенностями распределения электронной плотности в молекуле толуола. Полученные результаты подтверждают наличие тесной взаимосвязи между электронной структурой, распределением электронной плотности и колебательными свойствами молекулы, что обеспечивает надёжную интерпретацию поляризационных характеристик спектра комбинационного рассеяния. На основе МЭП-анализа локализованы области положительного и отрицательного электростатического потенциала, а также подтверждено наличие межмолекулярных взаимодействий $\pi \dots \pi$ в димерном состоянии. Анализ FMO показал, что энергетическая щель HOMO–LUMO толуола составляет 6.306 эВ, что свидетельствует о высокой кинетической устойчивости и низкой реакционной способности молекулы. Совокупность полученных результатов раскрывает взаимосвязь между электронной структурой и колебательными свойствами толуола, создавая основу для дальнейших исследований.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] Y. Sun, R. Zheng, Q. Shi, The Journal of Physical Chemistry B **116**(15), 4543 (2012). <https://doi.org/10.1021/jp300178v>.
- [2] A. Jumabaev, B. Khudaykulov, U. Holikulov, et al., Optical Materials **159**, 116683 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2025.116683>.
- [3] B. Khudaykulov, A. Norkulov, U. Holikulov, et al., Low Temperature Physics **51**(2), 220 (2025). <https://doi.org/10.1063/10.0035406>.
- [4] G. Socrates, *Infrared and Raman characteristic group frequencies: tables and charts* (John Wiley & Sons, 2004).

- [5] A. Jumabaev, H. Hushvaktov, A. Absanov, et al., Ukr. J. Phys. **69**, 742 (2024). <https://doi.org/10.15407/ujpe69.10.742>.
- [6] G. Varsányi, *Vibrational spectra of benzene derivatives* (Elsevier, 2012).
- [7] P. Chen, S. Liu, Z. Liu, X. Hu, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy **78**(1), 518 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.saa.2010.11.020>.
- [8] S. Chattopadhyay, G. S. Kastha, S. K. Brahma, Journal of Raman spectroscopy **22**(8), 449 (1991). <https://doi.org/10.1002/jrs.1250220805>.
- [9] H. Ouyang, M. Liu, Y. Zhao, et al., ACS omega **4**(6), 11074 (2019). <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00175>.
- [10] G. Keresztury, J. M. Chalmers, P. R. Griffith, Handbook of vibrational spectroscopy **1**, 71 (2002).
- [11] A. Jumabaev, H. A. Hushvaktov, A. A. Absanova, et al., Bulletin of the Lebedev Physics Institute **52**(12), 635 (2025). <https://doi.org/10.3103/S1068335625603176>.
- [12] C. Minejima, T. Ebata, N. Mikami, Physical Chemistry Chemical Physics **4**(9), 1537 (2002). <https://doi.org/10.1039/B108039C>.
- [13] M. Tasumi, T. Urano, M. Nakata, Journal of molecular structure **146**, 383 (1986). [https://doi.org/10.1016/0022-2860\(86\)80306-4](https://doi.org/10.1016/0022-2860(86)80306-4).
- [14] T. J. Johnson, R. L. Sams, T. A. Blake, et al., Applied optics **41**(15), 2831 (2002). <https://doi.org/10.1364/AO.41.002831>.
- [15] K. Hashimoto, V. R. Badarla, A. Kawai, T. Ideguchi, Nature Communications **10**(1), 4411 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-12442-9>.
- [16] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et al., Gaussian 09, Rev – D.1. Gaussian Inc, Wallingford (2009).
- [17] A. D. Becke, The Journal of chemical physics **98**(7), 5648 (1993). <https://doi.org/10.1063/1.464913>.
- [18] M. Govindammal, M. Prasath, M. Selvapandiyan, Chemical Papers **75**(8), 3771 (2021). <https://doi.org/10.1007/s11696-021-01576-0>.
- [19] A. Jumabaev, A. Absanov, Z. Ernazarov, et. al., J. Samarkand State Univ. **139**(1), 5 (2023). <https://doi.org/10.59251/2181-1296.2023.v4.139.1.2085>.
- [20] A. Jumabaev, H. Hushvaktov, A. Absanov, et al., Ukrainian Journal of Physics **71**(1), 28 (2026). <https://doi.org/10.15407/ujpe71.1.28>.
- [21] A. Jumabaev, A. A. Absanov, B. B. Khudaykulov, Z. I. Ernazarov, Uzbek Phys J., **25**(4), (2023). <https://doi.org/10.52304/.v25i4.471>.
- [22] N. Elangovan, S. A. Al-Hussain, S. Sowrirajan, et al., Journal of Fluorescence **1**, 30 (2026). <https://doi.org/10.1007/s10895-026-04817-1>.
- [23] A. Jumabaev, S. J. Koyambo-Konzapa, H. Hushvaktov, et al., J. Mol. Model. **30**(10), 349 (2024). <https://doi.org/10.1007/s00894-024-06147-0>.

- [24] Т. Коопманс, Physica 1(1-6), 104 (1934). [https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(34\)90011-2](https://doi.org/10.1016/S0031-8914(34)90011-2).

Поступила в редакцию 16 июля 2026 г.

После доработки 17 августа 2026 г.

Принята к публикации 20 августа 2026 г.