

гидросульфита натрия до обесцвечивания. Продукт реакции выделяли добавлением насыщенного раствора хлорида аммония. Перед измерением окислительно-восстановительных потенциалов соединения I а — и последовательно кристаллизовали из этанола, диоксиана и вновь из этанола или бензола. Чистоту контролировали методом ТСХ на пластинках «Силуфол УФ-254», элюент — смесь хлороформа и ацетона (3:1 по объему).

*Окислительное дезаминирование I а — и.* К раствору 0,025 моля I а — и в 150 мл уксусной кислоты добавляли раствор 8 г бихромата натрия в 40 мл воды. Через час отфильтровывали осадок (в случае Id) и продукт кристаллизовали из бензола или реакционную массу разбавляли двукратным количеством воды и экстрагировали бензолом. Бензольный слой промывали водой и дважды фильтровали через слой (2—3 см) силикагеля, растворитель отгоняли и продукт дважды кристаллизовали из бензола, каждый раз обрабатывая силикагелем. Выделение IV а — и методом колоночной хроматографии на окиси алюминия или силикагеле невозможно вследствие их разложения при длительном контакте с адсорбентом.

*Бензолсульфонил-1,4-аминофенолы (III б — д).* Суспензию 0,01 моля соответствующего хинонмина VI в 25 мл уксусной кислоты перемешивали 0,5 часа с 1,0 г цинковой пыли, нагревали до кипения, фильтровали и фильтрат разбавляли 100 мл воды. Осадок отделяли и кристаллизовали из уксусной кислоты.

1. Бурмистров К. С., Бурмистров С. И. Природа влияния заместителя при атоме азота в окислительно-восстановительных потенциалах *p*-бензохинонмоноимидов. — Журн. орган. химии, 1980, 16, № 7, с. 1487—1494.
2. Дубина В. Л., Бурмистров К. С. Окислительно-восстановительные потенциалы систем N-аренсульфонилхинонимин — аренсульфамидофенол. — Там же, 1977, 13, № 2, с. 378—380.
3. Fieser L. F. The potentials of some unstable oxidation-reduction systems. — J. Amer. Chem. Soc., 1930, 52, N 12, p. 4915—4940.
4. Corbett J. F. Benzoquinone imines. Pt 1. *p*-Phenyldiamin — ferricyanide and *p*-aminophenol — ferricyanide redox systems. — J. Chem. Soc. B. 1969, N 3, p. 207—212.
5. Электрохимические свойства N-ацилзамещенных хинондиимидов и монохинонминов / С. А. Петрова, К. С. Бурмистров, М. В. Колодяжный, О. С. Ксенжек. — Электрохимия, 1979, 15, № 11, с. 1666—1670.
6. Бурмистров К. С., Бурмистров С. И. Окислительно-восстановительные потенциалы хинондиимидов. — Вопр. химии и хим. технологии, 1981, вып. 65, с. 42—44.
7. Morgan G. T., Micklethwait F. M. G. The aryl sulphonyl-*p*-diazoimides. — J. Chem. Soc., 1905, 87, p. 921—930.
8. Adams R., Colgrove R. S. Quinone imides. XXXVI. Orientation of groups in adducts quinone diimides with different N-substituents. — J. Amer. Chem. Soc., 1954, 76, N 13, p. 3584—3587.
9. Adams R., Looker J. H. Quinone imides. IV. *p*-Quinone monosulfonimides. — Ibid., 1951, 73, N 3, p. 1145—1149.
10. Титов Е. А., Сухина Н. К. Гидрохлорирование N, O-бис-ацилхинониминоксимов. — Хим. технология, 1971, вып. 22, с. 15—19.

Днепропетровский  
химико-технологический институт

Поступила 22.12.82

УДК 517.572+541.651+539.196

## ПРИРОДА ПОЛОС ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ НЕПРЕДЕЛЬНЫХ КЕТОНОВ

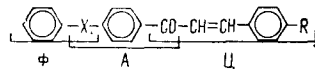
В. М. Никитченко, В. П. Чуев, В. Ф. Лаврушин

Электронные спектры непредельных кетонов и дикетонов, содержащих ядро дифенилсульфида, описаны в статьях [1, 2]. Там же проведен графический анализ спектров поглощения и рассмотрено их основное и возбужденное состояния л-электронных систем в рамках полуэмпирической теории МО. В настоящей работе мы исследовали электронные спектры непредельных кетонов, содержащих ядра дифенилметана, дифенилоксида, дифениламина и его N-метилпроизводного общей формулы:  $C_6H_5-X-C_6H_4-CO-CH=CH-C_6H_4-R$ , где  $X=CH_2, O, NH, NCH_3$ ;  $R=H, OCH_3, N(CH_3)_2, Cl, Br, NO_2$  (табл. 1, 2). Электронные спектры соединений I—XIV (табл. 1) измерены в изооктане и диоксане, а соединений XV—XXVII (табл. 2) в диоксане и этиловом спирте.

Для выяснения числа интенсивных полос и отнесения их к отдельным переходам для ряда соединений проведено графическое выделение

Таблица 1

## Спектральные характеристики соединений I—XIV



Номер соединения*	R	$\lambda$ , нм ( $\epsilon \cdot 10^{-3}$ ) изооктан	Отнесение полосы	$\lambda$ , нм ( $\epsilon \cdot 10^{-3}$ ) диоксан	Отнесение полосы	Номер соединения	R	$\lambda$ , нм ( $\epsilon \cdot 10^{-3}$ ) изооктан	Отнесение полосы	$\lambda$ , нм ( $\epsilon \cdot 10^{-3}$ ) диоксан	Отнесение полосы
I	H	298 (28,8) 263 (9,0)	$\Pi_1$ А	309 (26,5) 273 (7,2) 230 (13,6)	$\Pi_1$ А $\Pi_2$	VIII	H	310 (33,8) 278 (12,0) 227 (16,0)	$\Pi_1$ А $\Pi_2$	313 (33,9)	$\Pi_1$
II	OCH <sub>3</sub>	330 (27,0) 267 (10,5) 229 (15,3)	$\Pi_1$ А $\Pi_2$	341 (23,7)	$\Pi_1$	IX	OCH <sub>3</sub>	331 (33,6) 286 (10,8) 231 (20,6)	$\Pi_1$ А $\Pi_2$	336 (26,3)	$\Pi_1$
III	N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	387 (34,4) 261 (21,0)	$\Pi_1$ А	402 (34,1)	$\Pi_1$	X	N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	385 (34,7) 322 (3,6) 288 (12,0) 272 (3,01) 253 (10,0)	$\Pi_1$ Ф А Ф $\Pi_1$	402 (25,7)	$\Pi_1$
IV	Cl	309 (30,0) 270 (10,5)	$\Pi_1$ А	318 (30,4)	$\Pi_1$	XI	Cl	314 (40,0) 282 (16,0)	$\Pi_1$ А	317 (38,0)	$\Pi_1$
V	Br	310 (39,4) 270 (12,0)	$\Pi_1$ А	318 (28,4)	$\Pi_1$	XII	Br	314 (41,1) 282 (14,8)	$\Pi_1$ А	318 (37,2)	$\Pi_1$
VI	NO <sub>2</sub>	307 (35,3)	$\Pi_1$	313 (25,2)	$\Pi_1$	XIII	NO <sub>2</sub>	318 (25,2) 290 (16,6)	$\Pi_1$ А	321 (23,4)	$\Pi_1$
VII	H	—	—	338 (38,4) 274 (10,0) 235 (11,6)	$\Pi_1$ А $\Pi_2$	XIV	H	—	—	340 (43,5) 290 (12,0) 253 (8,0) 234 (19,6)	$\Pi_1$ А О $\Pi_2 + \Phi$
IA**	—	—	—	249 (14,4)	А	VIIIA***	—	267 (18,2)	А	—	—

\* Для соединений I—VII X=CH<sub>3</sub>; для VIII—XIV X=O; VII—  
 нилметан; \*\*\* 4-ацетилдифенилоксид.

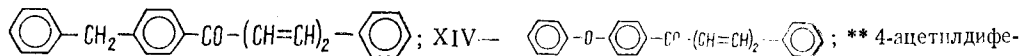
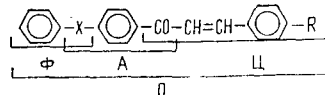


Таблица 2

## Спектральные характеристики соединений XV—XXVII



Номер соединения*	R	$\lambda$ , нм ( $\epsilon \cdot 10^{-3}$ ) диоксан	Отнесение полосы	$\lambda$ , нм ( $\epsilon \cdot 10^{-3}$ ) спирт	Отнесение полосы	Номер соединения	R	$\lambda$ , нм ( $\epsilon \cdot 10^{-3}$ ) диоксан	Отнесение полосы	$\lambda$ , нм ( $\epsilon \cdot 10^{-3}$ ) спирт	Отнесение полосы
XV	H	370 (27,8)	A	392 (23,6)	A <sub>1</sub>	XXII	H	357 (19,2)	A <sub>1</sub>	389 (25,2)	A <sub>1</sub>
		299 (19,2)	Ц <sub>1</sub>	303 (18,4)	Ц <sub>1</sub>			294 (12,0)	Ц <sub>1</sub>	303 (18,0)	Ц <sub>1</sub>
XVI	CH <sub>3</sub>	263 (6,4)	O	272 (8,2)	O	XXIII	OCH <sub>3</sub>	270 (3,2)	O	274 (8,0)	O
		369 (29,8)	A	341 (9,2)	Ф+A <sub>2</sub>			244 (10,8)	Ф+A <sub>2</sub>	274 (8,0)	A <sub>1</sub>
		306 (17,2)	Ц <sub>1</sub>	391 (25,2)	A <sub>1</sub>			363 (22,4)	A <sub>1</sub>	391 (32,6)	A <sub>1</sub>
		278 (7,2)	O	313 (16,0)	Ц <sub>1</sub>			317 (12,0)	Ц <sub>1</sub>	333 (16,8)	Ц <sub>1</sub>
XVII	OCH <sub>3</sub>	373 (35,8)	A	282 (8,8)	O	XXIV	N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	274 (5,4)	O	427 (44,4)	Ц <sub>1</sub>
		317 (10,0)	Ц <sub>1</sub>	241 (10,8)	Ф+A <sub>2</sub>			244 (16,0)	Ф+A <sub>2</sub>		
		282 (6,0)	C	397 (33,0)	A <sub>1</sub>			403 (36,0)	Ц <sub>1</sub>		
				333 (14,4)	Ц			345 (12,0)	A		
XVIII	N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	403 (45,8)	Ц <sub>1</sub>	282 (9,4)	O	XXV	Br	308 (2,8)	Ф		
		351 (16,4)	A	241 (14,6)	Ф+A <sub>2</sub>			279 (8,0)	O		
		308 (4,0)	Ф	431 (47,2)	Ц <sub>1</sub>			358 (20,0)	A <sub>1</sub>	394 (26,2)	A <sub>1</sub>
		283 (8,0)	O	370 (16,4)	A <sub>1</sub>			299 (12,0)	Ц <sub>1</sub>		
XIX	Cl	379 (26,8)	A	313 (3,6)	Ф	XXVI	NO <sub>2</sub>	272 (6,0)	O		
		308 (18,8)	Ц <sub>1</sub>	287 (11,0)	O			250 (15,2)	Ф+A <sub>2</sub>		
		280 (6,8)	O	397 (25,2)	A <sub>1</sub>			385 (13,4)	A <sub>1</sub>	413 (19,8)	A <sub>1</sub>
				308 (19,2)	Ц <sub>1</sub>			314 (25,2)	Ц <sub>1</sub>	314 (30,0)	Ц <sub>1</sub>
XX	Br	379 (27,9)	A	278 (7,2)	O	XXVII	H	256 (8,0)	Ф+A <sub>2</sub>		
		308 (20,8)	Ц <sub>1</sub>	241 (10,0)	Ф+A <sub>2</sub>			379 (37,7)	A <sub>1</sub>		
		280 (6,4)	O	397 (25,6)	A <sub>1</sub>			328 (27,2)	Ц <sub>1</sub>		
				308 (19,8)	Ц <sub>1</sub>			286 (12,7)	O		
XXI	NO <sub>2</sub>	395 (20,8)	A <sub>1</sub>	278 (6,8)	O	XXVIII**	—	265 (8,8)	Ф		
		315 (31,2)	Ц <sub>1</sub>	241 (11,6)	Ф+A <sub>2</sub>			317 (24,9)	A <sub>1</sub>		
		286 (4,8)	O	417 (21,2)	A <sub>1</sub>			276 (3,6)	Ф		
		260 (7,2)	Ф+A <sub>2</sub>	321 (30,8)	Ц <sub>1</sub>			241 (7,2)	Ф		
XXIX***	—			286 (6,8)	O	XXIX***	—	228 (8,4)	A <sub>2</sub>		
				263 (6,0)	Ф+A <sub>2</sub>			321 (26,4)	A <sub>1</sub>		
								236 (8,0)	Ф		
								224 (8,0)	A <sub>2</sub>		

\*Для соединений XV—XXI X = NH; для XXII—XXVI X = NCH<sub>3</sub>; XXVII — ; \*\* 4-ацетилметилдифениламин; \*\*\* 4-ацетилдифениламин (в изооктане).

полос поглощения. Кривым поглощения приписывали асимметрию и предполагали, что индивидуальные кривые могут быть описаны уравнением, приведенным в работе [3]. Природу полос исследуемых соединений обсуждали на основе расчетных данных, полученных по методу ППП. Расчет выполняли по программе [4], модифицированной и дополненной в работе [5] с учетом 25 однократно возбужденных конфигураций. Параметры расчета  $\gamma_x$ ,  $W_x$  и  $\beta_{c=x}$ , углы и межатомные расстояния  $r_{\mu\nu}$  для мостиковых гетероатомов, используемых нами при расчете, взяты из работы [6]. Для метиленовой группы мы воспользовались такими же параметрами, как и для метильной, подобно тому, как было предложено в [7]. Параметры  $\beta_{c-s}$  (алифат.),  $\beta_{c-s}$  (аромат.),  $\beta_{c=s}$  и  $\beta_{c=s}$  принимали равными  $-2,1$ ;  $-2,38$ ;  $-2,5$  и  $-3,3$  эВ соответственно. Оценка величин двухцентровых интегралов электронного отталкивания  $\gamma_{\mu\nu}$  проведена по Матага-Нишимото. При расчете принимали плоские *транс*-структуры с *S-цис*-расположением карбонильной группы и двойной связи (табл. 3, рис. 1).

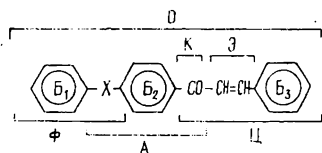
Характерной особенностью исследуемых соединений является наличие в них двух центров кросс-сопряжения различной электронной природы — X и карбонильной группы. Исходя из этого, следует полагать, что в каждом из них можно выделить три фрагмента, определенным образом взаимодействующих друг с другом — циннамоильный (Ц), ацетофеноновый (А) и соответствующий фрагмент замещенного фенила (Ф). Поэтому в спектрах следует ожидать проявление полос соответствующих фрагментов, несколько смещенных в результате их взаимного влияния [8]. Взаимодействие кросс-сопряженных фрагментов должно проявляться в преимущественной локализации электронных переходов на том или ином из них. Мету локализации  $L_A$  мы оценивали как сумму диагональных элементов квадрата переходной матрицы плотности [9].

На основании интенсивности экспериментальных полос и их реакции на переход от инертного растворителя к полярному, исследуемые непредельные кетоны обладают в области 220—420 нм двумя — четырьмя интенсивными полосами  $\pi-\pi^*$ -типа. Первую, наиболее длинноволновую в ряду соединений I—XIV (табл. 1, рис. 2, а), мы отнесли к баттохромно смещенной полосе циннамоильного фрагмента, что подтверждается данными квантово-химического расчета (рис. 1, а, табл. 3), а

Таблица 3

Перенос заряда при переходах  $\Psi_0-\Psi_n \left( \sum_{\mu \in \text{ФР}} [\Delta P_{\mu\mu}] \right), e \cdot 10^3$ , локализация  $L$  электронных пере

Фрагмент	L, %				
	I		VIII		
	$\Psi_0-\Psi_1$	$\Psi_0-\Psi_4$	$\Psi_0-\Psi_1$	$\Psi_0-\Psi_2$	$\Psi_0-\Psi_5$
X	0 (-6)	5 (-86)	3 (-60)	5 (-90)	9 (-173)
B <sub>1</sub>	1 (-11)	12 (-220)	6 (-73)	9 (-122)	66 (+418)
B <sub>2</sub>	9 (+43)	47 (-210)	20 (-9)	36 (-58)	20 (-313)
K	15 (+225)	20 (+265)	15 (+262)	18 (+202)	2 (-5)
Э	34 (-15)	11 (+181)	27 (+27)	16 (+106)	2 (+39)
B <sub>3</sub>	41 (-238)	5 (+65)	29 (-147)	16 (-39)	1 (+35)
Тип перехода	Ц	А	Ц	А	Ф



\* Приняты обозначения:

, для соединений I, VIII, XV, X равен

также изменением ее положения при введении в циннамоильный фрагмент заместителей различной электронной природы. Согласно расчету, эта полоса формируется электронным переходом  $\Psi_0-\Psi_1$  и является полосой внутримолекулярного переноса заряда с R-замещенного фенильного кольца на пропеную цепь (табл. 3).

Вторая полоса (рис. 2, а) в соединениях I и VIII сильно перекрыта с первой и поэтому выделяется только графически. Введение донорных заместителей (II, III, IX, X), а также переход к пентадиенонам (VII и XIV) приводит к существенному батохромному смещению первой полосы, в то время как вторая практически не изменяет своего положения и поэтому становится легко наблюдаемой. Мы отнесли ее к батохромно смещенной полосе ацетофенонового фрагмента ( $\Delta\lambda=18$  и  $19$  нм, ср. II и IX с IA и VIIIA табл. 1). Она формируется переходами  $\Psi_0-\Psi_4$  и  $\Psi_0-\Psi_2$  (для соединений I и VIII соответственно), локализованными преимущественно на ацетофеноновом фрагменте (рис. 1, а), причем, как видно из рис. 1, б, эти переходы мало чувствительны к замещению в циннамоильной группе.

Третью полосу, там где возможно было ее выделить, исходя из влияния на ее положение заместителей R, по нашему мнению, можно отнести к батохромно смещенной второй циннамоильной полосе, что подтверждается и данными квантово-химического расчета (например, переходы  $\Psi_0-\Psi_7$  и  $\Psi_0-\Psi_8$ ) для соединений I и VIII (рис. 1, а). Хотя полосу поглощения фенильного фрагмента Ф нам выделить не удалось из-за малой интенсивности и перекрывания с другими полосами, в расчетном спектре соединения VIII имеется переход  $\Psi_0-\Psi_6$  (рис. 1, а), локализованный в основном на фенильном фрагменте (табл. 3).

Несколько иное расположение полос обнаруживают производные 4-ацетилдифениламина и его N-метилзамещенные (табл. 2, рис. 2, б). Интерпретация интенсивной наиболее длинноволновой  $\pi-\pi^*$ -полосы в ряду соединений XV—XXVI, за исключением соединений XVIII и XXIV, не вызывает сомнения. Она относится к батохромно смещенной полосе ацетофенонового фрагмента, возмущенной за счет взаимодействия с бензольным кольцом через мостиковый гетероатом и циннамоильным фрагментом через карбонильную группу. Поэтому введение таких заместителей, как метил, метокси, хлор или бром, в циннамоильный фрагмент, а также переход к молекулам пентадиенонов практически не

ходов\*

$(\Delta P_{\mu\mu})$				
XV				
$\Psi_0-\Psi_6$	$\Psi_0-\Psi_1$	$\Psi_0-\Psi_2$	$\Psi_0-\Psi_4$	$\Psi_0-\Psi_6$
6 (−118)	16 (−298)	2 (−28)	16 (−315)	16 (−325)
18 (−152)	18 (−147)	3 (−21)	60 (+534)	26 (−104)
49 (−219)	35 (−1)	5 (+49)	17 (−276)	26 (−151)
6 (+78)	17 (+287)	16 (+167)	2 (0)	1 (−14)
9 (+172)	10 (+125)	34 (+22)	3 (+35)	11 (+205)
12 (+239)	4 (+32)	40 (−184)	2 (+24)	20 (+389)
О	А	Ц	Ф	О

соответственно  $\text{CH}_2$ , О, NH.

сказываются на положении этой полосы (табл. 2). Природа ее не изменяется и в том случае, если в молекулу вводить мощный акцептор — нитрогруппу (XXI и XXVI, табл. 2), хотя из-за сильного поляризующего действия нитрогруппы наблюдается значительное батохромное смещение. Исходя из данных квантово-химического расчета, проведен-

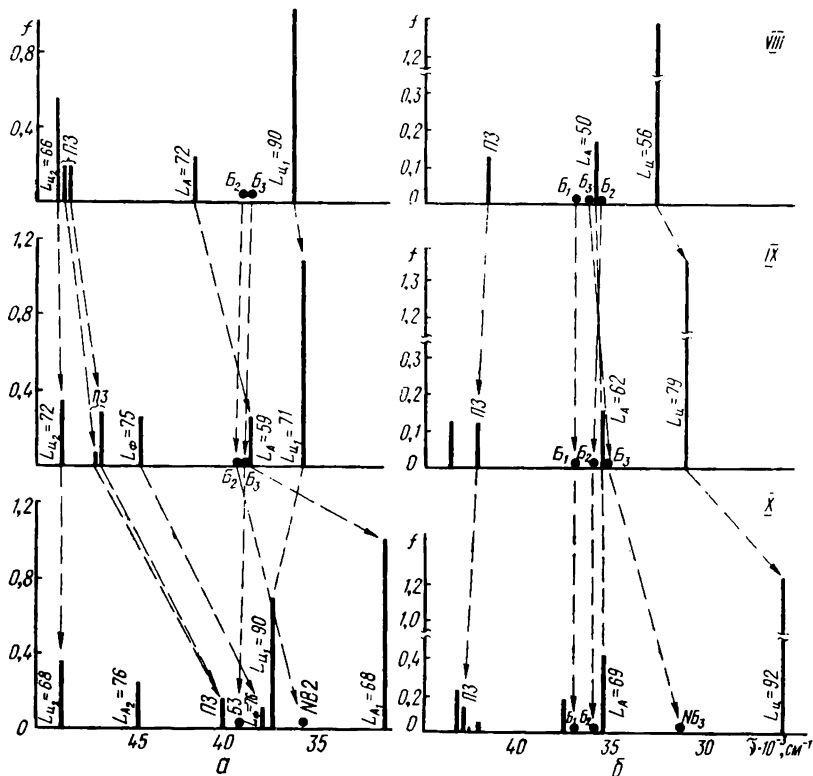


Рис. 1. Данные квантово-химического расчета.

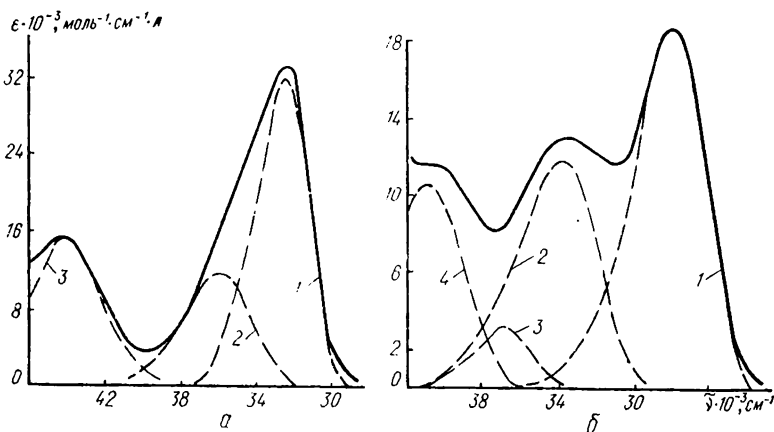


Рис. 2. Графический анализ спектров поглощения. а. Соединение VIII: 1, 3 — циннамольный; 2 — ацетофеноновый фрагмент. б. Соединение XXII: 1 — ацетофеноновый; 2 — циннамольный фрагмент; 3 — обшомолекулярная; 4 — сложная полоса.

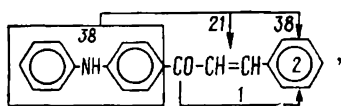
ного на примере соединения XV, можно сказать, что эта полоса относится к интенсивному переходу  $\Psi_0 \rightarrow \Psi_1$ , локализованному на ацетофеноновом фрагменте (68%), и является полосой внутримолекулярного переноса заряда ( $-0,446 e$ ) с дифениламинового фрагмента на карбонильную группу (рис. 1, а, табл. 3). На последовательность расположения полос в спектрах этого ряда соединений заместители различной электронной природы не оказывают существенного влияния. Лишь введение в молекулу соединения XV такого сильного донора, как диме-

тиламиногруппа, приводит к изменению характера первой полосы (она становится диметиламиноциннамоильной), что подтверждается и значительным bathochromным смещением на 33 и 46 нм (ср. XV с XVIII и XXII с XXIV).

Метилирование ядра дифениламина в большинстве случаев приводит к гипсохромному смещению длинноволновой полосы с одновременным падением ее интенсивности (табл. 2). Исключение составляют соединения, содержащие в фенильном кольце дополнительные стерические препятствия, приводящих к нарушению общей  $\pi$ -электронной системы молекул [10].

Вторая полоса (рис. 2, б) соединений XV—XXVII относится к первой полосе циннамоильного фрагмента, что подтверждается ее чувствительностью к заместителям различной электронной природы (табл. 2), а также данными расчета (рис. 1, а, табл. 3, переход  $\Psi_0$ — $\Psi_3$ ). Только в соединениях XVIII и XXIV вторая полоса является ацетофеноновой.

Интерпретация третьей полосы, выделенной графически, вызывает затруднения. Вероятнее всего, она относится к «общемолекулярной» (0). В расчетном спектре соединения XV ей соответствует переход  $\Psi_0$ — $\Psi_6$  общемолекулярного типа, который описывается диаграммой



где в циклах указаны парциальные числа локализации соответствующих фрагментов, а числа у стрелок обозначают числа переноса заряда (в %) [5].

Переходы общемолекулярного типа обнаруживаются и в расчетных спектрах соединений I—XIV (табл. 3) и для некоторых других 4-замещенных халконов. Следует отметить, что по мере возрастания донорного характера заместителя эти переходы также смещаются bathochromно. В работе [8] отмечали полосы, не относящиеся ни к одному из кросс-сопряженных фрагментов. Вероятно, они и формируются переходами общемолекулярного типа со сквозным переносом заряда.

Четвертая полоса для соединений XV—XXVII сложна и, вероятнее всего, обусловлена перекрытием второй полосы ацетофенонового и фенилзамещенного фрагментов.

1. Никитченко В. М., Чуев В. П., Лаврушин В. Ф. Электронные спектры ненасыщенных кетонов и дикетонов, производных дифенилсульфида.— Укр. хим. журн., 1981, 47, № 5, с. 528—533.
2. Чуев В. П., Никитченко В. М., Лаврушин В. Ф. Электронные спектры непредельных кетонов и дикетонов, содержащих ядро дифенилсульфида.— Там же, № 8, с. 835—839.
3. Siano D. P., Meller D. E. Band Shapes of Electronic Spectra of Complex Molecules.— J. Chem. Phys., 1969, 51, N 5, p. 1856—1861.
4. Методы расчета электронной структуры и спектров молекул / Ю. А. Кругляк, Г. Г. Дядюша, В. А. Куприевич и др.— К.: Наук. думка, 1969.—307 с.
5. Лузанов А. В., Педаш В. Ф. Интерпретация возбужденных состояний с помощью чисел переноса заряда.— Теорет. и эксперим. химия, 1979, 15, № 4, с. 436—441.
6. Belligsley F. P., Bloor J. E. Theoretical Studies on the Electronic Spectra of substituted aromatic molecules.— Theoretical Chim. Acta, 1968, 11, N 1, p. 325—343.
7. Хибаум Г., Фратев Ф. Квантово-химично изследован на влиянието на метилната група върху електроните спектри и електроната структура на спертнати системи.— Изв. отд. хим. науки Бълг. АН, 1973, 6, № 4, с. 753—761.
8. Интерпретация электронных спектров вишилогов бензофенона / А. А. Сухоруков, О. В. Лаврушина, В. Х. Гриф и др.— Журн. общ. химии, 1978, 48, № 2, с. 377—385.
9. Лузанов А. В., Сухоруков А. А., Уманский В. Э. Применение переходной матрицы плотности для анализа возбужденных состояний.— Теорет. и эксперим. химия, 1974, 10, № 4, с. 456—464.
10. Теоретический конформационный анализ некоторых соединений дифениламинового ряда / А. Н. Панкратов, Е. Е. Федоров, Н. И. Гусакова, С. П. Муштакова, Л. А. Грибов.— Саратов. 1980.—35 с.— Рукопись деп. в ОНИИТЭХИМ, Черкассы, 12.01.81, № 176.

Харьковский государственный университет

Поступила 17.08.82