

Молекулярное строение нового фотоацилотропного (2Z)-2-(N-ацил-N-ариламинометил)бензо[b]тиофен-3(2H)-она с мигрирующей хиральной группой

© Алдошин Сергей Михайлович,* Боженко Константин Викторович,*⁺
Ткачев Валерий Владимирович и Утенышев Андрей Николаевич
Институт проблем химической физики РАН. Просп. Акад. Семенова, 1.
г. Черноголовка, 142432. Россия. E-mail: bogenko@icp.ac.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: неэмпирические квантово-химические расчеты, фотохромные кетонамины, фталимидный и анизольный фрагменты, взаимное влияние, стерические препятствия, рентгеноструктурный анализ.

Аннотация

Проведено рентгеноструктурное исследование нового фотоацилотропного (2Z)-2-(N-ацил-N-ариламинометил)бензо[b]тиофен-3(2H)-она с мигрирующей хиральной группой и представлены особенности его молекулярного строения.

Выполнены неэмпирические расчеты (приближение B3LYP/LANL2DZ) данного соединения с полной оптимизацией геометрии. Показано, что фрагменты – фталимидный, анизольный и бензо[b]тиофеновый являются структурно жесткими элементами этого соединения и влияние кристаллического окружения на его геометрическую структуру сводится к незначительному взаимному повороту.