

## Молекулярное строение нового фотохромного 3,4-ди-(1,2-диметилиндолил-3)-2,5-дигидротиофена

© Ткачев Валерий Владимирович,<sup>a</sup> Утенышев Андрей Николаевич,  
Алдошин Сергей Михайлович и Боженко Константин Викторович<sup>b,\*+</sup>

Институт проблем химической физики РАН. Пр. Акад. Семенова. г. Черноголовка, 1142432. Россия.  
Тел.: <sup>a)</sup> (49652) 21563. E-mail: <sup>a)</sup> [vatka@icp.ac.ru](mailto:vatka@icp.ac.ru); <sup>b)</sup> [bogenko@icp.ac.ru](mailto:bogenko@icp.ac.ru)

\* Ведущий направления; + Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, дигетарилэтен, фотохромные соединения, квантово-химические расчеты.

### Аннотация

Проведено рентгеноструктурное исследование нового фотохромного дигетарилэтена – 3,4-ди-(1,2-диметилиндолил-3)-2,5-дигидротиофена. Показано, что в кристаллическом состоянии исследованное соединение имеет антипараллельное расположение индольных фрагментов с внутримолекулярным расстоянием между предполагаемыми реакционными атомами углерода 3.479 Å, что является достаточным условием для процесса фотоциклизации. Выполнены квантово-химические расчеты исходного соединения и его фотопродукта, в результате которых показано, что исходная открытая форма энергетически выгоднее фотопродукта на 22.5 ккал/моль.