

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

© Ткачев Валерий Владимирович,^a Утенышев Андрей Николаевич,
Алдошин Сергей Михайлович и Боженко Константин Викторович^{b,*+}

Институт проблем химической физики РАН. Пр. Акад. Семенова. г. Черноголовка, 1142432. Россия.
Тел.: ^{a)} (49652) 21563. E-mail: ^{a)} vatka@icp.ac.ru ; ^{b)} 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.