

использованием карбоната калия в диоксане приводит к образованию монофункционализованного производного. Метанол и ацетонитрил протекание реакции не обеспечивают. Использование карбоната натрия также не приводит к желаемой конверсии 2-гидроксиацетофенона. Попытка проведения алкилирования непосредственно натриевой соли 2-гидроксиацетофенона также не привела к получению продукта. Наилучшие результаты были получены в среде диметилформамида, но экспериментальную методику необходимо оптимизировать, поскольку параллельно протекает осмоление реакционной массы.

Дальнейшую конденсацию 1,2-бис(2-ацетилфенокси)этана с рядом сложных эфиров проводили как с использованием стандартных оснований, так и ранее выявленных конденсирующих агентов ряда алкоксидов металлов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-7702.2015.3.*

### **ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИЙ ВЗМО И НСМО В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ (2Z)-{(2Z)-2-[2,4,5-ТРИОКСОПИРРОЛИДИН-3-ИЛИДЕН]-4-ОКСО-1,3-ТИАЗОЛИДИН-5-ИЛИДЕН}АЦЕТАТА**

*Галуцкий А.Н., Обыденнов К.Л., Свалова Т.С.,  
Костерина М.Ф., Моржерин Ю.Ю.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Сопряженные гетероциклы используются при создании красителей для солнечных элементов [1] и молекулярных переключателей [2] благодаря их электронодефицитным свойствам и способности к изомеризации вокруг двойной экзоциклической С=С связи. В этом плане особый интерес представляют гетероциклические ансамбли на основе 1,3-тиазолидинилиденов, состоящих из двух и более гетероциклов, соединенных двойными С=С связями [3]. Целью данной работы стало определение значений энергии ВЗМО и  $\Delta E_g$  для гетероциклических ансамблей, содержащих 1,3-тиазолидиновый и пирролидиновый цикл, а также оценка факторов, стабилизирующих возможные геометрические изомеры.

Для изучения изомеризации и оценки электронодефицитных свойств путем определения окислительно-восстановительного потенциала мы выбрали производные (2Z)-2-[2,4,5-триоксопирролидин-3-илиден]-4-оксо-1,3-тиазолидин-5-илидена в качестве модельных соеди-

нений. Окислительный и восстановительный потенциалы соединений в ацетонитриле были определены при помощи циклической вольтамперометрии (ЦВА). Для всех соединений мы наблюдали один окислительный и один восстановительный пик. Для определения  $\Delta E_g$  были сняты УФ-спектры рассматриваемых соединений, в которых наблюдается один максимум поглощения в области 375–385 нм.

Из-за E,Z-изомерии соединений в растворе определение энергий граничных орбиталей индивидуально E- и Z- изомера физико-химическими методами в значительной степени затруднено. Поэтому нами были проведены квантово-химические расчеты энергий молекулярных орбиталей для каждого изомера в газовой фазе с использованием методов DFT в базисе G 6-31(d,p). Сопоставление экспериментальных данных с расчетными показало лучшую сходимость с результатами полученных при помощи ЦВА.

Таким образом, в данной работе нами были определены значения  $\Delta E_g$  различными методами, а также изучены окислительно-восстановительные свойства. [2,4,5-триоксопирролидин-3-илиден]-4-оксо-1,3-тиазолидин-5-илиденовых систем с учетом влияния изомерии.

1. Schade A., Menzel R., Görls H. et al. // J. Phys. Chem. C. 2013. V. 2, № 6. P. 498–503.
2. Naumov P., Kowalik J., Solntsev K.M. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2010. V. 132, № 16. P. 5845–5857.
3. Baryshnikov G.V., Minaev B.F., Minaeva V.A. et al. // J. Struct. Chem. 2012. V. 53, № 3. P. 428–435.

## **РЕАКЦИИ 3-(ДИФЕНИЛФОСФИНО)ПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТЫ С НЕПРЕДЕЛЬНЫМИ КАРБОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ**

*Гарифуллина Ю.Р., Миннуллин Р.Р., Бахтиярова Ю.В.*

Казанский федеральный университет  
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18

В настоящей работе мы провели реакции 3-(дифенилфосфино)пропионовой кислоты с различными непредельными кислотами: монокарбоновые - акриловая, метакриловая, кротоновая, коричная; дикарбоновые – итаконовая, малеиновая, фумаровая.