

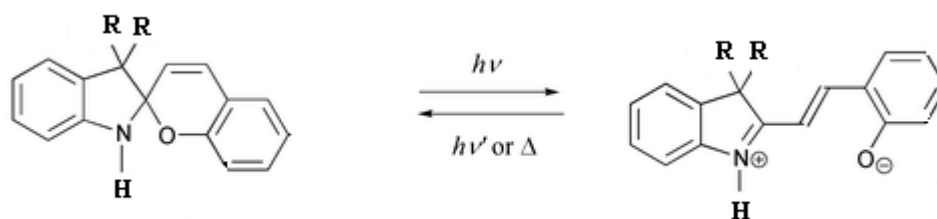
# НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ ОКРАШЕННОЙ ФОРМЫ СПИРОПИРАНОВ

**К. Г. Джапаридзе, Дж. П. Майсурадзе, Р. Ш. Бакурадзе, Ш. А. Ахобадзе**

*Институт кибернетики им. Чавчанидзе В.В. Грузия*

Проведено квантовохимическое исследование индолиновых спиропиранов при переходе из неокрашенного состояния в окрашенное при комнатной температуре.

Для изучения влияния заместителей в 3',3'-положении незамещённых индолиновых спиропиранов нами были сделаны квантовохимические расчёты по методу AM1.



Из расчёта видно, что в незамещённых индолиновых спиропиранах в положении 3',3' замена метильных групп фенильными вызывает увеличение внешнего валентного угла, что в свою очередь влечет уменьшение внутреннего угла пятичленного цикла и увеличение длины связи С–О пиранового кольца, и уменьшение разности между теплотами образования замкнутой и открытой форм от 4 Ккал/моль до 1 Ккал/моль.

Эти данные показывают, что в незамещённых индолиновых спиропиранах, содержащих фенильные группы в 3',3'-положении переход из неокрашенного состояния в окрашенное происходит при комнатной температуре.

Эти расчёты находятся в полном согласии с экспериментальными данными.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Джапаридзе К. Г. **Спирохромены**. Тбилиси «Мецниереба», 1979, 110ст.