

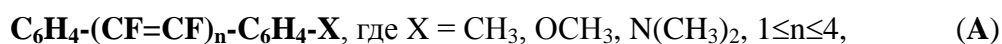
**ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ В РЯДАХ
КВАЗИЛИНЕЙНЫХ ПОЛИЕНОВ И МОДЕЛИ ГРАНИЧНЫХ УРОВНЕЙ**
**Е.Х. Озиева^а, П.В. Мельников^а, Е.В. Васильев^а, Е.А. Поленов^а, Б.И. Шапиро^а,
Л.М. Ягупольский^б**

^аМосковская государственная академия тонкой химической технологии

им. М.В. Ломоносова, г. Москва

^бИнститут органической химии НАН Украины, г. Киев

В апротонных растворителях (ДМФА, АЦ) было изучено электрохимическое восстановление симметричных диарилперфторполиенов (А) и полиметинцианинов (Б). Структуры в обеих сериях квазилинейные:



Потенциалы начала первых волн, отвечающие начальным скоростям электронного переноса, содержат основную информацию. С удлинением цепи их смещение положительное, и интервалы между гомологами уменьшаются. Модифицированная модель одномерного потенциального ящика учитывает дополнительное удлинение системы сопряжения на заместители и избыток электронных пар, количественно передавая прогрессии сдвигов.

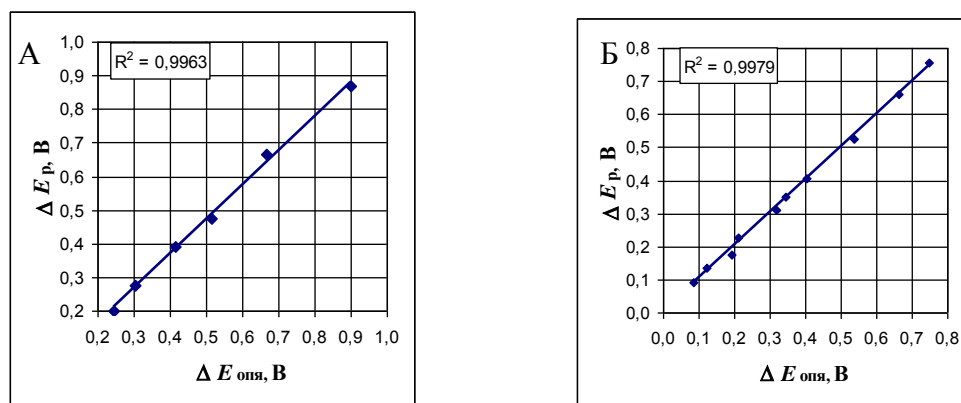


Рис. 1. Корреляции сдвигов потенциалов восстановления в рядах (А) и (Б) со сдвигами уровней НВМО в модели одномерного потенциального ящика.

Прогрессии коррелируют с рассчитанными уровнями граничных МО в методах PM3 и RHF (6-31 G, *ab initio*). У серии Б коррелируют лишь данные RHF (6-31 G, *ab initio*). Квазиодномерные свойства обеспечены стереорегулярностью цепей, но стереохимия рядов А и Б различна. Структуры Б плоские, но в А, чередуясь, фрагменты (-CF=CF-) образуют две плоскости под двугранным углом $\sim 30^\circ$.