



**2-й Международный семинар по спектроскопии  
и фотохимии макрогетероциклических  
соединений 18–19 октября 2022 г.**

**Минск, БЕЛАРУСЬ**

**Синтез и спектральные свойства  
гекса(3,6-гексил)гемигексафиазина**

**Я.Е. Кибирева<sup>a,b</sup>, М.К. Исляйкин<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Шереметевский пр., д. 7, Иваново, Россия 153000*

*e-mail: filippova\_yae@stud.isuct.ru*

<sup>b</sup>*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Академическая ул., д. 1,  
Иваново, Россия 153045*

Гемигексафиазины имеют плоскостное строение макроциклического остова, а внутренний макроцикл содержит 30  $\pi$ -электронов, что отвечает правилу Хюккеля ( $4n+2$ ) [1]. Установлено, что присутствие алкильных заместителей в положениях 3,6-изоиндольных фрагментов фталоцианинов придает им способность к самоорганизации молекул с образованием тонких пленок [2], представляющих интерес в качестве перспективного материала для записи и хранения информации. Поэтому целью настоящей работы является синтез гекса(3,6-гексил)гемигексафиазина (Hhp).

Синтез Hhp проводили взаимодействием 3,6-бис(гексил)фталонитрила и 2,5-диамино-1,3,4-тиадиазола с добавлением небольшого количества металлического натрия. Целевой продукт экстрагировали тетрагидрофураном через celite, промывали гексаном и метанолом. Выход Hhp составил 21 %.

Соединение охарактеризовано данными электронной, ИК, <sup>1</sup>H ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии. В электронном спектре преобладают интенсивные полосы поглощения в УФ (250-350 нм) и видимой (350-550 нм) областях. Возбуждение светом в диапазоне от 400 до 500 нм приводит к широкому спектру флуоресценции с наиболее интенсивной полосой испускания при 580 нм и полосами меньшей интенсивности при 541 и 625 нм. Полученные результаты интерпретированы с применением квантово-химических расчетов, выполненных на уровне DFT/CAM-B3LYP/6-31G(d,p). Оценка ароматичности контуров сопряжения в молекуле Hhp проведена с использованием критерия NICS.

*Работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования РФ № 075-15-2021-579.*

**ЛИТЕРАТУРА**

- 1. М.К. Исляйкин, О.И. Койфман, Т. Торрес.** Гемигексафиазины. Синтез и перспективы применения в качестве новых функциональных материалов, Москва, ЛЕНАНД (2019).
- 2. М.Ж. Cook.** The Chemical Record. **2** (2002), 4, 225–236.