

(2-ՄՎՏ) էլեկտրոնային կառուցվածքները: Հաշվարկային տվյալների համաձայն էլեկտրոնֆիլային հարձակման ամենահավանական կենտրոնը տետրազոլային օղակում 4 դիրքի ազոտի ատոմն է: Ենթադրվում է, որ վինիլ խմբի ռեակցիոնունակությամբ 1-ՎՏ-ն և 1-ՄՎՏ-ն մոտ են և տարբերվում են 2-ՎՏ-ից և 2-ՄՎՏ-ից:

THE ELECTRONIC STRUCTURE OF 5-VINYLTETRAZOLES

V. H. KHARATIAN, V. B. GHAVALIAN, N. SH. MAILIAN, G. V. ASRATIAN, O. N. BOOBEL, E. M. RAKHMANKO, E. G. DARBINIAN and S. G. MATSOYAN

The electronic structures of 1-H-5-vinyltetrazole (I-VT), 2-H-5-vinyltetrazole (2-VT), 1-methyl-5-vinyltetrazole (I-MVT), and 2-methyl-5-vinyltetrazole (2-MVT) have been estimated by the MNDO method with complete optimization of geometrical parameters. According to calculation data the most probable center for the electrophilic attack in the tetrazole ring appears to be the nitrogen atom in position 4. It is assumed that by the reactivity of their vinyl groups I-VT and 1-MVT are similar and differ from 2-VT and 2-MVT.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Г. И. Колдобский, В. А. Островский, В. С. Поплавский, ХГС, 1981, 1299.
2. В. А. Островский, Н. С. Панина, Г. И. Колдобский, Б. В. Гидаспов, И. Ю. Широбоков, ЖОрХ 15, 844 (1979).
3. Г. И. Колдобский, В. А. Островский, Б. В. Гидаспов, ХГС, 1980, 867.
4. M. J. S. Dewar, W. Thiel, J. Am. Chem. Soc., 99, 4899 (1977).
5. В. А. Круглова, В. Н. Кижняев, ВМС, 27Б, 243 (1985).
6. Е. С. Кронгауз, Д. А. Бочвар, И. В. Станкевич, В. В. Коршах, ДАН СССР, 179, 94 (1968).

Армянский химический журнал, т. 38, № 12, стр. 755—756 (1985 г.)

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 621.315.592+678.769

ОРГАНИЧЕСКИЙ ПОЛУПРОВОДНИК—[CH(LiAlH₄)_y]_x

В. Х. КСИПТЕРИДИС

Ереванский государственный университет

Поступило 22 XI 1983

Полимерам, проявляющим свойства полупроводников и преобразователей солнечной энергии, в последние годы уделяется особое внимание. Большой интерес представляют полимеры на основе ацетилена, т. к. он является самым доступным и дешевым сырьем.

На основе полиацетилена нам удалось получить полупроводниковый материал с общей формулой [CH(LiAlH₄)_y]_x [1]. Такой комплекс впервые получен авторами работы [2] способом, предложенным ими в

качестве способа получения анионов полиенов. Полиацетилен, полученный при комнатной температуре (60% *цис*- и 40% *транс*-формы), имеет электропроводность $10^{-7} - 10^{-8} \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$. При прибавлении к нему насыщенного раствора LiAlH_4 в тетрагидрофуране образуется комплекс общей формулы $[\text{CH}(\text{LiAlH}_4)_y]_x$, электропроводность которого достигает $19 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$.

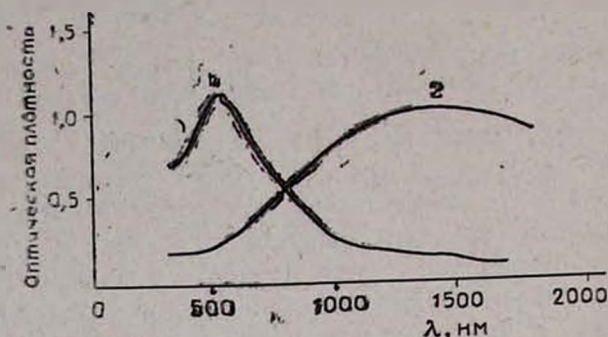


Рис. Видимый и ближний ИК спектры: 1 — $(\text{CH})_x$, 2 — $[\text{CH}(\text{LiAlH}_4)_y]_x$.

Исчезновение в ИК спектре полосы поглощения при 650 нм (характерная полоса поглощения полиацетилена) (рис.), а также появление новой полосы поглощения при 1350 нм свидетельствуют об образовании комплекса с переносом заряда.

Экспериментальная часть

Полиацетилен в виде пленки получили по методу Ширикава [3]. В качестве катализатора использовали $(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{Al}$ и $(\text{C}_4\text{H}_9\text{O})_4\text{Ti}$ в объемном соотношении 2 : 1. Катализатор нанесли на стеклянную пластинку с платиновыми электродами. В инертной атмосфере в течение нескольких минут пропускали ацетилен. Для удаления катализатора полученный полимер несколько раз промывали обескислороженным гексаном и метанолом. Во избежание окисления полиацетилен хранился в вакууме или метаноле. В зависимости от количества катализатора и ацетилена получены пленки полимера различной толщины. Для исследования электрических и оптических свойств полиацетилен получили толщиной от 0,05 до 0,15 мкм.

Спектр в видимой и ближней ИК областях снят на спектрометре Cary-14.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. M. Dohan, V. Kspteridis, E. Vander Donckt, Proceeding of the International Conference of "Polymer Electroactifs", France, 1983.
2. J. M. Dohan, S. Boue, E. Vander Donckt, J. Chem. Soc., Chem. Com., 1982, 917.
3. H. Shirakawa, J. of Polymer Science, 12, 11 (1974).