

Экспериментальное и теоретическое исследование таутомерии в 1N-(2'-гидрокси-5'-метилфенил)метилимино)-2-*n*-бутиламинобензимидазоле

Борисова Александра Олеговна

студент

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: xelatik@gmail.com

При изучении строения 1N-(2'-гидрокси-5'-метилфенил)метилимино)-2-*n*-бутиламинобензимидазола (**1**) и его медного комплекса, который существует в виде двух полиморфных модификации (**2** и **3**) было обнаружено, что в свободном лиганде и в комплексе реализуются различные таутомерные формы (**A** и **B** соответственно, см. рис. 1). Интересно, что в таутомере, реализующемся в кристалле **1**, вместо ожидаемой Н-связи с замыканием 6-членного Н-связанного цикла наблюдается конформация с необычным 5-членным Н-связанным циклом.

Чтобы изучить роль внутримолекулярных Н-связей в стабилизации таутомерных форм **1**, было проведено прецизионное рентгенодифракционное исследование распределения электронной плотности в кристалле **1** и квантово-химическое исследование изолированной молекулы **1**. Анализ функции распределения электронной плотности проводили в рамках теории Р.Ф. Бейдера «Атомы в Молекулах» [1].

Топологический анализ $\rho(\mathbf{r})$ в изолированной молекуле показал наличие критической точки (КТ) (3,-1) для Н-связи N-H...N типа. Однако расстояние между КТ (3,-1), отвечающей Н-связи, и КТ (3,+1), появляющейся в результате замыкания 5-членного цикла, столь мало, что даже незначительно изменение конформации молекулы может привести к изменению молекулярного графа. Действительно, топологический анализ $\rho(\mathbf{r})$ в кристалле **1** показал отсутствие КТ (3,-1), соответствующей контакту N-H...N. Вероятно, отсутствие такого связывающего взаимодействия в данном случае связано с эффектами кристаллической упаковки, оказывающими влияние на конформацию молекулы, в частности, межмолекулярным стекинг-взаимодействием между π -электронной плотностью циклических ароматических фрагментов, реализующимся в кристалле **1**.

Квантово-химическое моделирование таутомера **B**, наблюдающегося в медном комплексе, позволило оценить относительную термодинамическую стабильность двух таутомеров. Показано, что несмотря на образование в таутомере **B** устойчивого шестичленного Н-связанного цикла (рис.1), таутомер **A** характеризуется более низкой энергией.

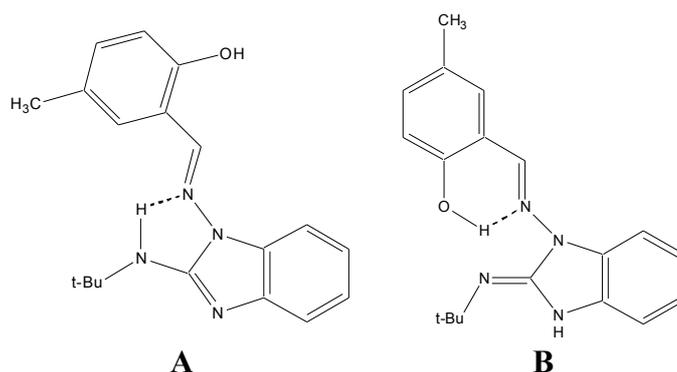


Рис. 1. Таутомерные формы соединения **1**.

1. Bader R. F. W. Atoms in molecules. A quantum theory, Clarendon Press, Oxford, 1990.