

СТРУКТУРА И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ (Е-)/(Z-) ИЗОМЕРОВ 1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНОМЕТИЛ)ИМИДАЗОЛИЯ

Михеенко В. М.¹, Сердюк А. А.², Капитанов И. В.^{2,3}

¹Донбасская национальная академия строительства и архитектуры,
Краматорск, Украина

²Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ,
Киев, Украина

³Таллиннский технологический университет, Таллин, Эстония
vmmikheenko@gmail.com

1,3-Диметил-2-(гидроксииминометил)имидазолий йодид (DMHMI) является высокоэффективным реагентом в процессах расщепления активированных эфиров кислот углерода, фосфора и серы. Поскольку данное соединение может существовать в виде Е- и Z-изомеров (рис. 1, 2), свойства и реакционная способность которых могут существенно отличаться, с целью выполнения дальнейшего сравнительного анализа и установления корреляций «структура–свойства/реакционная способность» нами рассчитаны ключевые термодинамические и структурные параметры этих структур с использованием программного пакета Gaussian 09 (метод DFT; функционал B3LYP; базисный набор 6-31+G(d)). Конъюгационные и гиперконъюгационные взаимодействия учитывались путем проведения расчетов в программе NBO 5.0. Полученные результаты приведены в таблице 1.

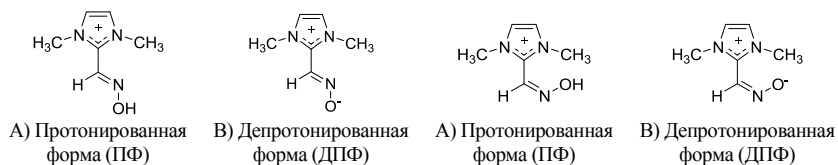


Рис. 1. Е-изомер DMHMI

Рис. 2. Z-изомер DMHMI

Таблица 1. Термодинамические и структурные параметры Е- и Z-изомеров 1,3-диметил-2-(гидроксииминометил)имидазолия (протонированная и депротонированная формы; расчет в программе «Gaussian-09»)

Параметр	Е-изомер (основное состояние BS)		Z-изомер (основное состояние BS)	
	ПФ (q = +1)	ДПФ (q = 0)	ПФ (q = +1)	ДПФ (q = 0)
Полная энергия молекулы, кДж/моль	-1221224,83	-1243053,25	-1221208,87	-1243035,67
Е (ВЗМО), кДж/моль	-1166,87	-451,43	-1227,93	-443,57
Е (НСМО), кДж/моль	-3,52	-100,03	46,39	-111,81
q (N; NOH-группа)	0,008	-0,041	0,025	-0,015
q (O; NOH-группа)	-0,207	-0,462	-0,239	-0,524
q (H; NOH-группа)	0,270	–	0,272	–
Угол (N-C-C-N), град.	180	0	-54,85	-35,41
Угол (C-C-N-O), град.	180	180	-0,31	-2,66