

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И GIAO ЯМР $^1\text{H}$ И $^{13}\text{C}$ СПЕКТРЫ 2-[2-(ПИРИДИН-2-ИЛ)-1H-БЕНЗИМИДАЗОЛ-1-ИЛ]АЦЕТАМИДА

Муратов А.В., Зубрицкий М.Ю., Берестнева Ю.В.,  
Ракша Е.В., Ересько А.Б.

*Государственное учреждение «Институт физико-органической химии  
и углехимии им. Л.М. Литвиненко», ул. Р.Люксембург, 70, г.Донецк, 83114,  
alex\_muratoff@email.ua, a\_eresko2002@yahoo.com*

В работе представлены результаты комплексного исследования структуры, внутримолекулярной динамики, параметров ЯМР спектров 2-[2-(пиридин-2-ил)-1H-бензимидазол-1-ил]ацетамида (РВА).

В приближении изолированной частицы и с учетом влияния растворителя в рамках модели РСМ выполнена оптимизация молекулярной геометрии (метод B3LYP/6-31G(d,p)) и рассчитано изменение полной энергии РВА при внутримолекулярном вращении пиридинового фрагмента в молекуле вокруг связи С–С. На кривой внутримолекулярного вращения локализовано три минимума. Для наиболее стабильного конформера (Рис. 1) получены линейные корреляции между экспериментальными (в растворе DMSO- $d_6$ ) и рассчитанными (B3LYP/6-31G(d,p)/GIAO/РСМ приближение) химическими сдвигами ядер  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  в спектре ЯМР.

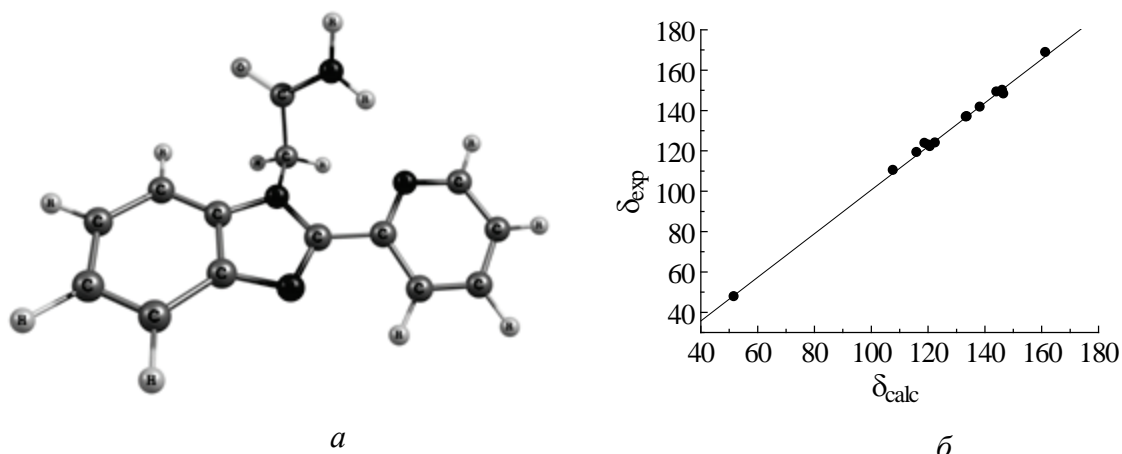


Рис. 1. Структура наиболее стабильного конформера 2-[2-(пиридин-2-ил)-1H-бензимидазол-1-ил]ацетамида (а) и соотношение между экспериментальными и рассчитанными химическими сдвигами ядер  $^{13}\text{C}$  (б)