

# ***N*-(2,3-ДИГИДРОКСИ-4-ИОД-2,3-ДИМЕТИЛБУТИЛ)-ТРИФТОРАЦЕТАМИД: ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ В КРИСТАЛЛЕ И В РАСТВОРЕ**

**И. В. Стерхова\*, И. М. Лазарев, Б. А. Шаинян**

*Иркутский институт химии имени А. Е. Фаворского Сибирского отделения  
Российской академии наук, ул. Фаворского 1, Иркутск, 664033 Россия  
\*e-mail: irina\_sterkhova@irioch.irk.ru*

Поступило в Редакцию 21 марта 2019 г.  
После доработки 21 марта 2019 г.  
Принято к печати 27 марта 2019 г.

Методами ИК спектроскопии и квантово-химических расчетов на уровне DFT изучено строение *N*-(2,3-дигидрокси-4-иод-2,3-диметилбутил)трифторацетамида и его димеров в кристалле, растворе и газовой фазе. Полученные данные сопоставлены с данными рентгеноструктурного анализа.

**Ключевые слова:** водородные связи, ИК спектроскопия, расчеты DFT

**DOI:** 10.1134/S0044460X19080043

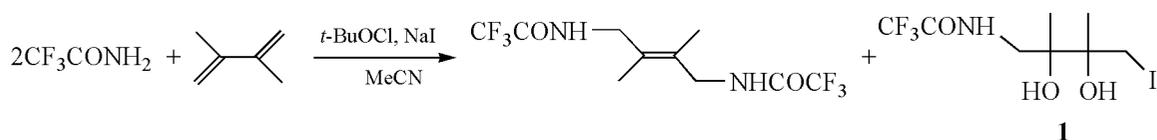
Синтез и изучение строения и свойств амидов является важной фундаментальной задачей, так как хорошо известно, что такие соединения проявляют различные виды биологической активности и входят в состав многих лекарственных средств. Синтезу соединений, содержащих амидный фрагмент, и изучению их фармакологических свойств посвящен ряд недавних исследований [1–6]. Формирование надмолекулярной структуры органических соединений как правило происходит за счет слабых невалентных взаимодействий, таких как водородное связывание,  $\pi$ -стекинг, галогенные связи и др. Изучение таких взаимодействий важно, так как они влияют на свойства и реакционную способность соединений. Настоящее исследование является продолжением работ по изучению строения и водородного связывания в кристалле, растворе и изолированном состоянии новых про-

изводных трифторацетамида методами РСА, ИК спектроскопии и квантовой химии [7–9].

*N*-(2,3-Дигидрокси-4-иод-2,3-диметилбутил)-трифторацетамид **1** был получен как побочный продукт в реакции 2,3-диметилбута-1,3-диена с трифторацетамидом (схема 1) [10].

В молекуле амида **1** присутствует несколько протонодонорных и -акцепторных центров – группы NH, C=O, и две группы OH, что может приводить к образованию различных водородо-связанных структур как в изолированной молекуле амида **1**, так и в его самоассоциатах в кристалле и в растворах. Структура амида **1** была доказана методом РСА [10] (рис. 1). Экспериментальные и геометрические характеристики [10], и вычисленные для конформера, существующего в кристалле, сопоставлены в табл. 1.

Схема 1.

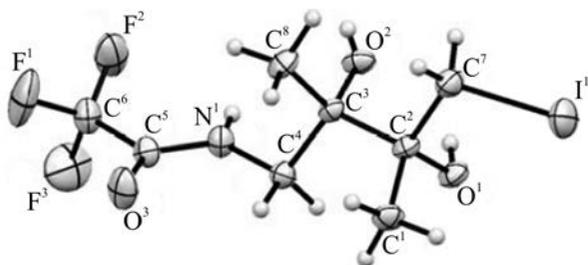


**Таблица 1.** Экспериментальные и вычисленные длины связей, валентные и торсионные углы в соединении **1**

Связь	<i>d</i> , Å		Угол	φ, град		Угол	θ, град	
	эксперимент	расчет		эксперимент	расчет		эксперимент	расчет
I <sup>1</sup> –C <sup>7</sup>	2.152(5)	2.201	O <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>1</sup>	107.2(3)	106.3	O <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> O <sup>2</sup>	–45.8(4)	–50.0
O <sup>1</sup> –C <sup>2</sup>	1.432(5)	1.422	C <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>7</sup>	112.2(4)	111.4	C <sup>7</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> O <sup>2</sup>	71.6(4)	–69.7
N <sup>1</sup> –C <sup>5</sup>	1.332(6)	1.349	C <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup>	112.9(4)	112.8	C <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>8</sup>	74.4(5)	71.1
C <sup>1</sup> –C <sup>2</sup>	1.525(6)	1.529	O <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>8</sup>	111.4(3)	104.5	O <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>4</sup>	67.3(4)	–62.5
C <sup>2</sup> –C <sup>7</sup>	1.534(6)	1.540	C <sup>8</sup> C <sup>3</sup> C <sup>4</sup>	111.2(4)	110.9	C <sup>7</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>4</sup>	–175.3(4)	–177.7
C <sup>3</sup> –C <sup>8</sup>	1.521(6)	1.529	C <sup>8</sup> C <sup>3</sup> C <sup>2</sup>	113.3(4)	109.5	O <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>4</sup> N <sup>1</sup>	–56.8(4)	–51.9
O <sup>2</sup> –C <sup>3</sup>	1.428(5)	1.451	N <sup>1</sup> C <sup>4</sup> C <sup>3</sup>	110.9(4)	111.6	C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>4</sup> N <sup>1</sup>	–169.9(3)	–165.8
O <sup>3</sup> –C <sup>5</sup>	1.216(6)	1.213	O <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>7</sup>	109.1(4)	111.0	C <sup>4</sup> N <sup>1</sup> C <sup>5</sup> C <sup>6</sup>	–177.8(4)	–180.0
N <sup>1</sup> –C <sup>4</sup>	1.455(6)	1.455	O <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup>	107.0(3)	107.4	C <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>7</sup> I <sup>1</sup>	63.9(5)	–66.2
C <sup>2</sup> –C <sup>3</sup>	1.566(6)	1.587	C <sup>7</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup>	108.3(3)	108.0	C <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> O <sup>2</sup>	–163.5(3)	–166.7
C <sup>3</sup> –C <sup>4</sup>	1.544(6)	1.546	O <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>4</sup>	105.6(3)	104.5	O <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>8</sup>	–168.0(4)	–172.2
C <sup>5</sup> –C <sup>6</sup>	1.529(7)	1.555	O <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>2</sup>	105.5(3)	106.6	C <sup>7</sup> C <sup>2</sup> C <sup>3</sup> C <sup>8</sup>	–50.5(5)	–52.4

Данные о структурных аналогах соединения **1** в литературе отсутствуют. Длины связей и углы амидного фрагмента амида **1** близки к таковым в трифторацетамиде [11]. Гидроксильные группы участвуют в образовании внутримолекулярной водородной связи Н–О···Н–О длиной 2.104 Å (рис. 2а); в кристалле молекулы связаны межмолекулярными водородными связями NH···O=C и OH···OH длиной 2.065 и 2.153 Å соответственно (рис. 2б).

С целью изучения возможных изменений в формировании Н-связей в газовой фазе и растворе в сравнении с твердой фазой мы провели ИК-спектроскопическое исследование процессов водородного связывания в растворе CCl<sub>4</sub> и квантово-



**Рис. 1.** Общий вид молекулы *N*-(2,3-дигидрокси-4-иод-2,3-диметилбутил)трифторацетамида **1** в кристалле.

химические расчеты различных конформеров мономерных молекул амида **1**, а также его димеров **2**.

По данным ИК спектроскопии в твердой фазе (KBr), молекулы амида **1** полностью ассоциированы. В области OH и NH колебаний (3200–3600 см<sup>–1</sup>) наблюдаются три полосы поглощения при 3485, 3377 и 3282 см<sup>–1</sup>, относящиеся к колебаниям гидроксильных и амидной групп соединения **1**, а в области валентных колебаний C=O – две полосы поглощения при 1730 и 1703 см<sup>–1</sup> (табл. 2). В растворе CCl<sub>4</sub> появляются дополнительно две полосы поглощения при 3540 и 3436 см<sup>–1</sup>, интенсивность которых увеличивается при понижении концентрации раствора. Очевидно, эти полосы относятся к колебаниям OH- и NH-групп свободных мономерных молекул, не участвующих в водородном связывании. Положение и интенсивность полосы при 3485 см<sup>–1</sup> не меняются при изменении концентрации раствора соединения **1** в CCl<sub>4</sub>, что указывает на ее принадлежность внутримолекулярной водородной связи HO···Н–O [ $\nu(\text{OH}_{\text{ввс}})$ ] в молекуле амида **1** и согласуется с данными PCA (рис. 2а).

Спектральный сдвиг между полосами поглощения свободных и связанных OH-групп составляет  $\nu(\text{OH}_{\text{своб}}) - \nu(\text{OH}_{\text{связ}}) = 3540 - 3379 = 161 \text{ см}^{-1}$ , в

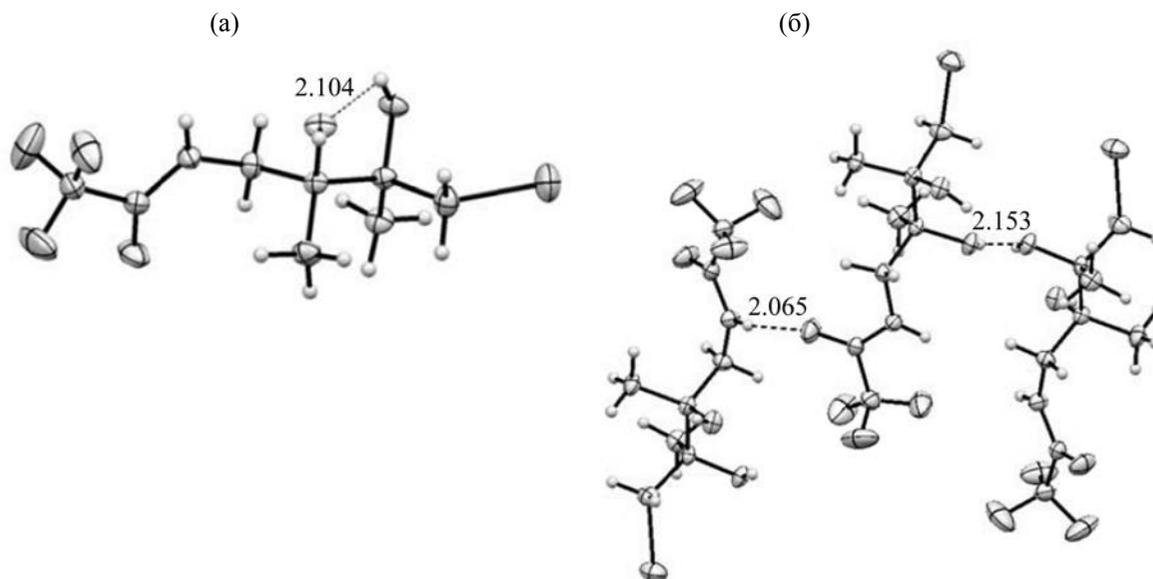


Рис. 2. Внутри- (а) и межмолекулярные (б) водородные связи в кристалле амида 1.

то время как для NH-группы эта величина равна:  $\nu(\text{NH}_{\text{своб}}) - \nu(\text{NH}_{\text{связ}}) = 3436 - 3281 = 155 \text{ см}^{-1}$ . В растворе  $\text{CCl}_4$  увеличивается интенсивность полосы поглощения свободных групп C=O при  $1732 \text{ см}^{-1}$  по сравнению с частотой связанных в ассоциаты групп C=O ( $1697 \text{ см}^{-1}$ ), хотя в кристалле (KBr) эти полосы поглощения близки по интенсивности.

Квантово-химические расчеты были выполнены на уровне DFT методом B3LYP с использованием базисного набора 6-311G++G(d,p) для атомов C, H, N, O, и базисного набора SDD для атома иода [12, 13]. Расчет с использованием геометрии, взятой из данных PCA как стартовой при оптимизации, дает структуру **1a**, близкую к экспериментальной с внутримолекулярной водородной связью Н–О…Н–О немного длиннее ( $2.192 \text{ \AA}$ ), чем экспериментально измеренная в кристалле ( $2.104 \text{ \AA}$ ) (схема 2). Расчет отлично воспроизводит конформацию молекулы, определяемую торсионными углами (табл. 1). Среднее отклонение расчетных валентных углов от экспериментальных равно  $0.7^\circ$ , кроме углов  $\text{O}^2\text{C}^3\text{C}^8$  и  $\text{C}^8\text{C}^3\text{C}^2$ , прилежащих к пятичленному циклу, замкнутому водородной связью Н–О…Н–О. Отклонение большинства вычисленных значений длин связей от экспериментальных не превышает  $0.01 \text{ \AA}$ ; большие величины наблюдаются для связей C–гетероатом (O, N, I). Наибольшие отклонения ожидаемо наблюдаются

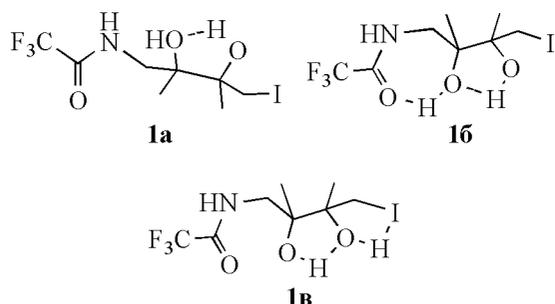
для водородосвязанного пятичленного цикла, так как расчет выполнен для изолированной молекулы, а на геометрию в кристалле сильно влияют межмолекулярные водородные связи с участием ОН-групп. Тем не менее, в обоих случаях Н-цикл имеет конформацию *конверт* с плоским (расчет) или близким к плоскому (PCA) фрагментом О–Н…О–С и выходящим из этой плоскости четвертичным атомом углерода  $\text{C}(\text{Me})\text{CH}_2\text{I}$ .

В связи с наличием в молекуле амида **1** карбонильной группы, превосходящей по основности гидроксильную, в растворе или в газовой фазе возможно образование структуры **1б** с двумя внутримолекулярными водородными связями  $\text{C}=\text{O} \cdots \text{H}-\text{O}$

Таблица 2. Частоты валентных колебаний свободных и связанных групп ОН, NH и C=O амида 1

Отнесение	$\nu, \text{ см}^{-1}$	
	KBr	$\text{CCl}_4$
$\text{OH}_{\text{своб}}$		3540
$\text{OH}_{\text{ввс}}$	3485	3483
$\text{NH}_{\text{своб}}$		3436
$\text{OH}_{\text{связ}}$	3377	3379
$\text{NH}_{\text{связ}}$	3282	3281
$\text{C}=\text{O}_{\text{своб}}$	1730	1732
$\text{C}=\text{O}_{\text{связ}}$	1703	1697

Схема 2.



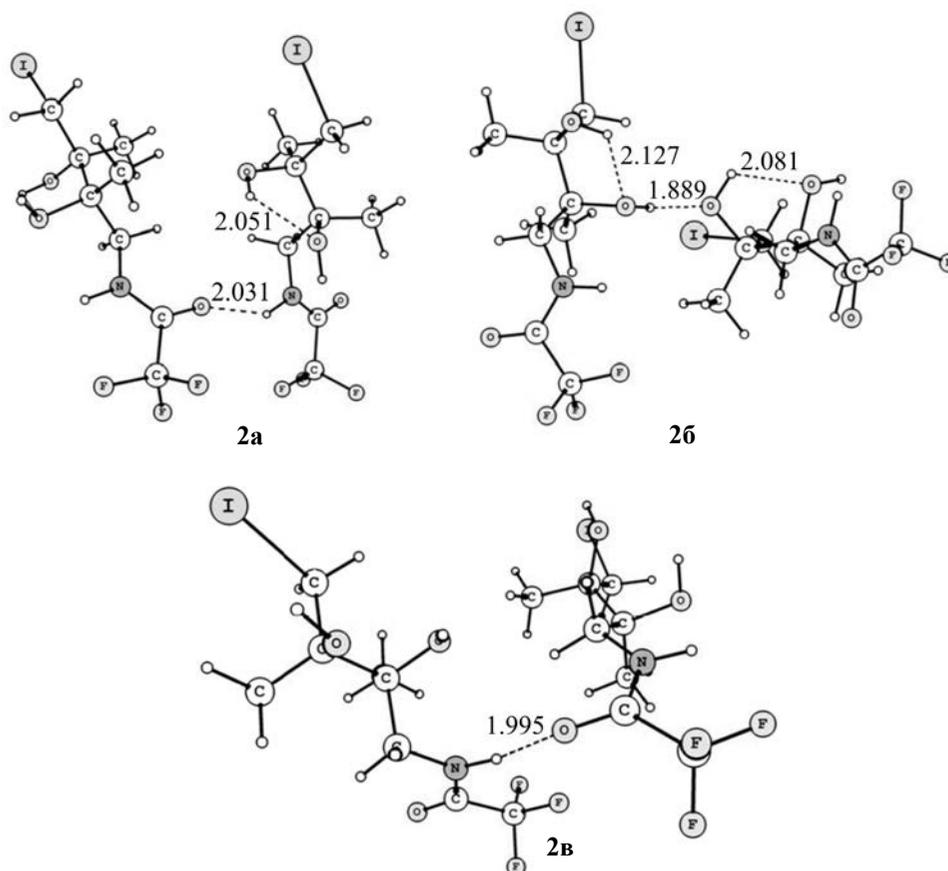
и  $\text{H-O}\cdots\text{H-O}$  с бифуркацией на атоме кислорода (схема 2). Действительно, расчет структуры **1b** показал наличие в ней весьма прочной (1.869 Å) внутримолекулярной водородной связи  $\text{C=O}\cdots\text{H-O}$  и гораздо более слабой связи  $\text{H-O}\cdots\text{H-O}$  (2.249 Å). Отметим, что образование внутримолекулярной водородной связи с карбонильной группой в структуре **1b** ослабляет внутримолекулярную водородную связь  $\text{HO}\cdots\text{HO}$ , которая удлиняется на 0.145 Å в сравнении со структурой **1a**. Структура **1b** лежит на поверхности потенциальной энергии на 0.39 ккал/моль ниже, чем структура **1a**. Такая незначительная энергетическая предпочтительность, очевидно, не соответствует выигрышу энергии за счет образования прочной внутримолекулярной водородной связи  $\text{C=O}\cdots\text{H-O}$  и, возможно, связана с некоторым напряжением, возникающим при образовании сочлененных  $\text{H}$ -связанных колец и дестабилизирующим структуру **1a**. Кроме того, циклическая структура **1b** должна быть менее выгодна энтропийно за счет потери степени свободы при образовании внутримолекулярной водородной связи, и действительно, разность свободных энергий  $\Delta G(\mathbf{1a}) - \Delta G(\mathbf{1b}) = -0.76$  ккал/моль, т.е. в пользу открытой структуры. Однако оказалась, что глобальному минимуму на поверхности потенциальной энергии неожиданно соответствует структура **1в** (схема 2) с двумя внутримолекулярными водородными связями:  $\text{CH}_2\text{CON}\cdots\text{OH}$  (2.065 Å) и  $\text{OH}\cdots\text{ICH}_2$  (2.760 Å, на 0.59 Å короче суммы ван-дер-ваальсовых радиусов). Структура **1в** лежит ниже структуры **1a** на поверхности как потенциальной ( $\Delta E = 3.7$  ккал/моль), так и свободной энергии ( $\Delta G = 3.1$  ккал/моль). Вычисленные значения частот в конформерах **1a–в** составляют для колебаний  $\nu(\text{C=O})$  1784, 1761 и 1781  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu(\text{NH})$  3625, 3626 и 3604  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu(2\text{-OH})$  3844, 3631

и 3738  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu(3\text{-OH})$  3776, 3771 и 3761  $\text{cm}^{-1}$ . Отметим близкие значения ( $\Delta\nu = 5$   $\text{cm}^{-1}$ ) и очень сильную скоррелированность колебаний  $\nu(\text{NH})$  и  $\nu(2\text{-OH})$  в конформере **1b**, причем более низкочастотная полоса отвечает симметричным, а высокочастотная – асимметричным колебаниям  $2\text{-O-H}$  и  $\text{N-H}$  связей.

В кристалле молекулы амида **1** образуют два вида линейных димеров **2** (рис. 3): с межмолекулярной водородной связью  $\text{NH}\cdots\text{O=C}$  (**2a**) и с бифуркационной связью, образуемой группой  $2\text{-OH}$ , вовлеченной во внутримолекулярную водородную связь с группой  $3\text{-OH}$ , и группой  $2\text{-OH}$  соседней молекулы, также участвующей в формировании внутримолекулярной водородной связи (**2б**). При образовании межмолекулярной водородной связи  $\text{HO}\cdots\text{H-O}$  длина внутримолекулярной водородной связи в обеих молекулах уменьшается (**2б**). Вычисленная энергия образования димера **2a** на 0.9 ккал/моль больше, чем димера **2б**. Вероятно, это связано с ослаблением  $\text{N-H}$  связи в структуре **2б** за счет бифуркации.

Кроме того, была рассчитана структура димера **2в** (рис. 3), образующегося из наиболее выгодного конформера **1в**, также за счет межмолекулярной водородной связи  $\text{NH}\cdots\text{O=C}$ . Отметим, что димеры **2a–в** построены по типу *голова к голове*, что допускает образование, кроме межмолекулярной водородной связи  $\text{NH}\cdots\text{O=C}$ , связывание с участием  $\text{OH}$ -групп двух молекул. Попытка рассчитать структуру димера типа *голова к хвосту*, исключая такую возможность, привела к разрыву в ходе оптимизации геометрии связи  $\text{NH}\cdots\text{O=C}$  и формированию димера с энергией на 0.6 ккал/моль ниже, чем у димера **2б**, и с межмолекулярной водородной связью  $2\text{-OH}\cdots\text{O=C}$  длиной 1.896 Å. В связи с тем, что данная структура не образуется в кристалле и не является глобальным минимумом для изолированных димеров в газовой фазе, она не рассматривалась. Полные и относительные энергии димеров и образующих их мономеров, а также некоторые характеристики рассчитанных димеров приведены в табл. 3.

Вычисленный спектральный сдвиг  $\Delta\nu(\text{NH})$  при переходе от мономера к димеру меньше, чем  $\Delta\nu(\text{OH})$ , что качественно согласуется с экспериментальными данными, хотя различия между



**Рис. 3.** Димеры амида **1** на основе конформера **1а**, существующего в кристалле, и наиболее выгодного конформера изолированной молекулы **1в**.

расчетными значениями сдвигов гораздо больше, чем экспериментальные (табл. 2). Возможно, это связано с наложением колебаний  $\nu(\text{OH})$  различного типа двух различных гидроксильных групп в амиде **1** и формированием широких полос поглощения в результате образования самоассоциатов различного типа. Вычисленный спектральный сдвиг  $\Delta\nu(\text{C}=\text{O})$  близок к экспериментальному ( $27 \text{ см}^{-1}$ ).

Таким образом, согласно данным РСА, ИК спектроскопии и квантово-химических расчетов, в кристалле *N*-(2,3-дигидрокси-4-иод-2,3-диметилбутил)трифторацетамид существует в виде структуры с внутримолекулярной водородной связью  $3\text{-OH}\cdots\text{OH}$ . В газовой фазе глобальному минимуму на поверхности как потенциальной, так и свободной энергии отвечает структура с внутримолекулярной водородной связью  $2\text{-OH}\cdots\text{OH}$  и  $3\text{-OH}\cdots\text{I}$ . Димеры амида **1** как в кристалле (РСА),

**Таблица 3.** Энергии образования, дипольные моменты, спектральные сдвиги и длины Н–связей

Структура	$-E$ , ат. ед.	$\Delta E$ , ккал/моль	$\mu$ , Д	$\Delta\nu_{\text{NH}}$ , $\text{см}^{-1}$	$\Delta\nu_{\text{OH}}$ , $\text{см}^{-1}$	$\Delta\nu_{\text{C}=\text{O}}$ , $\text{см}^{-1}$	$l$ , Å
<b>1а</b>	904.337978	3.68	3.31				2.192
<b>1в</b>	904.343846	0	4.72				2.192
<b>2а</b>	1808.688312	5.82	4.77	107		23	2.031
<b>2б</b>	1808.686896	6.71	7.44		200		1.889
<b>2в</b>	1808.697594	0	4.86	99		23	1.995

так и в растворе (ИК спектроскопия) и в газовой фазе (DFT расчеты) образуются за счет межмолекулярных водородных связей  $\text{NH}\cdots\text{O}=\text{C}$  и  $\text{OH}\cdots\text{O}$  при сохранении внутримолекулярной водородной связи  $\text{OH}\cdots\text{OH}$ .

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры твердых образцов в КВг и растворов в  $\text{CCl}_4$  получены на спектрометре FTIR Varian 3100. Квантово-химические расчеты с полной оптимизацией геометрии и решением колебательной задачи выполнены с помощью комплекса программ GAUSSIAN 09 [14]. Кристаллографические данные для амида **1** депонированы в Кембриджский банк кристаллоструктурных данных (CCDC 1469523).

Авторы выражают благодарность В.В. Астаховой и М.Ю. Москалику (Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН) за предоставление амида **1** для спектральных исследований. Основные результаты получены с использованием оборудования материально-технической базы Байкальского аналитического центра коллективного пользования СО РАН.

### КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Gunia-Krzyzaka A., Zelaszczyk D., Rapacz A., Zeslawska E., Waszkielewicz A. M., Panczyk K., Stoczynska K., Pekala E., Nitek W., Filipek B., Marona H.* // Bioorg. Med. Chem. 2017. Vol. 25. P. 471. doi 10.1016/j.bmc.2016.11.014
2. *Boto A., Gallardo J. A., Álvarez E.* // Eur. J. Org. Chem. 2012. P. 391. doi 10.1002/ejoc.201101274
3. *Sanhueza C.A., Baksh M.M., Thuma B., Roy M.D., Dutta S., Prévile C., Chrunyk B.A., Beaumont K., Dullea R., Ammirati M., Liu S., Gebhard D., Finley J.E., Salatto C.T., King-Ahmad A., Stock I., Atkinson K., Reidich B., Lin W., Kumar R., Tu M., Menhaji-Klotz E., Price D.A., Liras S., Finn M.G., Mascitti V.* // J. Am. Chem. Soc. 2017. Vol. 139. P. 3528. doi 10.1021/jacs.6b12964
4. *Cecioni S., Vocadlo D.J.* // J. Am. Chem. Soc. 2017. Vol. 139. P. 8392. doi 10.1021/jacs.7b01948
5. *Mathiselvama M., Loganathan D., Varghese B.* // Carbohydr. Res. 2013. Vol. 380. P.1. doi 10.1016/j.carres.2013.06.023
6. *Srivastava A., Varghese B., Loganathan D.* // Carbohydr. Res. 2013. Vol. 380. P. 92. doi 10.1016/j.carres.2013.07.014
7. *Sterkhova I.V., Nikonov A.Yu., Lazarev I.M., Smirnov V.I., Lazareva N.F.* // J. Mol. Struct. 2015. Vol. 1098. P. 408. doi 10.1016/j.molstruc.2015.06.018
8. *Sterkhova I.V., Astakhova V.V., Shainyan B.A.* // J. Mol. Struct. 2017. Vol. 1141. P. 351. doi 10.1016/j.molstruc.2017.03.095
9. *Стерхова И.В., Астахова В.В., Шаинян Б.А.* // ЖОХ. 2017. Т. 87. Вып. 8. С. 1266; *Sterkhova I.V., Astakhova V.V., Shainyan B.A.* // Russ. J. Gen. Chem. 2017. Vol. 87. N 8. P. 1680. doi 10.1134/S1070363217080060
10. *Astakhova V.V., Moskalik M.Yu., Sterkhova I.V., Shainyan B.A.* // Mend. Comm. 2017. Vol. 27. P. 293. doi 10.1016/j.mencom.2017.05.026
11. *Kalyanaraman B., Kispert L.D., Atwood J.L.* // Acta Cryst. (B). 1978. Vol. 34. P. 1131. doi 10.1107/S0567740878005075
12. *Godbout N., Salahub D.R., Andzelm J., Wimmer E.* // Can. J. Chem. 1992. Vol. 70. P. 560. doi 10.1139/v92-079
13. *Sosa C., Andzelm J., Elkin B.C., Wimmer E., Dobbs K.D., Dixon D.A.* // J. Phys. Chem. 1992. Vol. 96. P. 6630. doi 10.1021/j100195a022
14. *Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J.L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kita O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J.A., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.N., Staroverov V.N., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J.M., Klene M., Knox J.E., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J.* // Gaussian 09. Revision A.01. Gaussian Inc., Wallingford, CT, 2009.

## ***N*-(2,3-Dihydroxy-4-iodo-2,3-dimethylbutyl)acetamide: Hydrogen Bonds in Crystal and Solution**

**I. V. Sterkhova\*, I. M. Lazarev, and B. A. Shainyan**

*A. E. Favorskii Irkutsk Institute of Chemistry, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,  
ul. Favorskogo 1, Irkutsk, 664033 Russia  
\*e-mail: irina\_sterkhova@irioch.irk.ru*

Received March 21, 2019; revised March 21, 2019; accepted March 27, 2019

The structure of *N*-(2,3-dihydroxy-4-iodo-2,3-dimethylbutyl)trifluoroacetamide and its dimers was studied in the crystal, solution and gas phase by the methods of IR spectroscopy and quantum chemical calculations at the DFT level. The obtained data were compared to the data of X-ray diffraction analysis.

**Keywords:** hydrogen bonds, IR spectroscopy, DFT calculations