

КЛАССИФИКАЦИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КРИСТАЛЛАХ АЗАГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

¹Салмина Е.С., ²Гришина М.А., ²Потемкин В.А.

¹«Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского» УрО РАН, г.Екатеринбург

²Челябинская государственная медицинская академия, г.Челябинск

¹Салмина Е.С.
²Гришина М.А.
²Потемкин В.А.
¹«Институт органического
синтеза
им. И.Я. Постовского»
УрО РАН
²Челябинская
государственная
медицинская академия

В данной работе проведен количественный анализ невалентных межмолекулярных взаимодействий в кристаллах азаетероциклических соединений с целью классификации последних на водородные связи и ван-дер-ваальсовы контакты [1, 2].

Согласно квантовой теории Р. Бейдера [3], критерием наличия взаимодействия между атомами является присутствие критической точки типа (3:-1) (или критической точки связи (КТС)) на линии атомного связывания. Положения данных точек определяются в ходе топологического анализа функции распределения электронной плотности (ЭП). Таким образом, рассмотрение пространственного размещения КТС между молекулами в кристалле позволяет выделить все межмолекулярные взаимодействия, обеспечивающие образование кристаллических мотивов, а характеристики функции ЭП в данных точках дают возможность провести их количественное описание. Данная квантовая теория, как правило, применяется для топологического анализа электронной плотности, рассчитанной в рамках квантово-механических методов (например, DFT или метод Хартри-Фока). Проведение анализа топологии ЭП, определяемой на данных уровнях теории, для кристаллической ячейки требует больших затрат компьютерного времени. Кроме того, для осуществления подобных расчетов необходимо использовать оптимизированную молекулярную геометрию, которая, зачастую, далека от реальной. Поэтому в данной работе для исследования топологии ЭП внутри кристаллических фрагментов применяется эмпирический подход AlteQ, основные принципы которого описаны в [4]. В данном методе распределение ЭП описывается функцией $\rho(r)^{Alt}$, полученной в результате сопоставления логарифма экспериментальной ЭП (определяемой в рамках прецизионного РСА) с расстояниями до атомных ядер. Вследствие этого, ЭП, рассчитываемая в рамках приближения AlteQ, максимально близка к экспериментально определяемой величине (минимальный коэффициент корреляции между экспериментальными и расчетными величинами составляет 0.97 для полярных связей (например С-S) и 0.99 – для неполярных (например, С-С)). Кроме того, AlteQ позволяет проводить исследование топологии ЭП внутри больших молекулярных ансамблей (например, фрагментов кристаллов), геометрия которых является экспериментально определенной (например, РСА). Что, в свою очередь, позволяет получить полное представление о межмолекулярных взаимодействиях, которые формируются между молекулами внутри кристаллах.

В работе использовались данные 44 рентгеноструктурных экспериментов, хранящиеся в Кембриджской базе структурных данных. Количественный анализ геометрических и топологических характеристик невалентных взаимодействий позволил выделить критерии водородных связей и ван-дер-ваальсовых контактов для их распознавания в кристаллических соединениях.

Литература

1. *Desiraju G.R.* Crystal engineering: a holistic view// *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007. №44. P.8342-8356.
2. *Desiraju G.R., T. Steiner.* The weak hydrogen bond in structural chemistry and biology. Oxford: Oxford Universe Press, 1999.
3. *Bader R.W.F.* Atoms in molecules: A Quantum Theory. USA: Oxford University Press, 1994.
4. *Potemkin V.A., Grishina M.A.* A new paradigm for pattern recognition of drugs// *J. Comput. Aided Mol. Des.* 2008. №6-7. P. 489-505.