

АНАТОМИЯ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ N...H В КОМПЛЕКСАХ МЕТАНОЛ-ИМИДАЗОЛ: ВЛИЯНИЕ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ И РАСТВОРЕ

Кривицкая А.В.^{1,2}, Хренова М.Г.^{2,3}, Цирельсон В.Г.^{1,2}

¹РХТУ имени Д.И. Менделеева, Москва, Миусская пл., 9

²ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Ленинский проспект, 33, стр. 2

³МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Ленинские Горы, 1

В настоящее время остро стоит вопрос нахождения физически обоснованных дескрипторов внутри- и межмолекулярных взаимодействий. В данной работе представлены результаты реализации одного из этапов этой программы, а именно, исследования пятнадцати модельных систем, представляющих собой комплексы метанол-имидазол с заместителями в газовой фазе и растворе. Мы сфокусировались на исследовании влияния заместителей на свойства водородных связей N...H, формирующих эти комплексы.

Расчет равновесных геометрий исследуемых систем в газовой фазе был произведен методом DFT/PBE0/6-31G**, а в растворе - комбинированным методом квантовой механики/молекулярной механики, где квантовая часть описывалась методом DFT/PBE0/6-31G**, а молекулы воды молекулярно-механической части - силовым полем TIP3P. Затем для всех КМ-подсистем проводился квантово-топологический анализ: определялись характеристики электронной плотности в критических точках связей N...H и энергии водородных связей. Также особенности водородной связи были определены с помощью электростатического потенциала и потенциала, действующего на один электрон в молекуле (РАЕМ) с учетом вклада обменной корреляции. Для визуализации РАЕМ был нанесен на замкнутые изоповерхности электронной плотности $\rho = 0,055$, пронизываемые N...H-связями (рис.1).

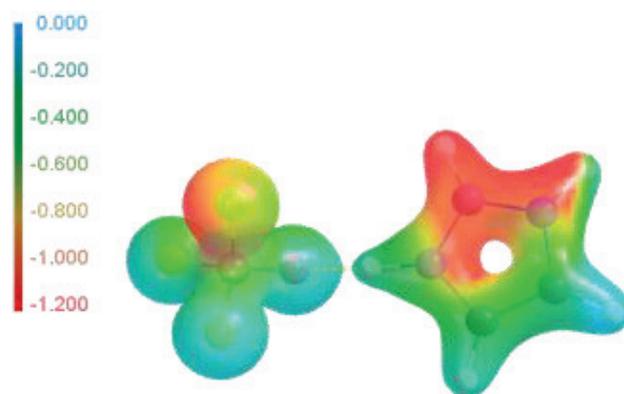


Рис. 1. РАЕМ на изоповерхности электронной плотности, $\rho = 0,055$

Это позволило выявить влияние заместителей в метаноле и имидазоле на химическую связь в исследуемых системах, а также сделать выводы об изменениях характеристик межмолекулярных взаимодействий в исследуемых системах в зависимости от фазы, в которой они находятся.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 18-74-10056).