

# МОДЕЛЬ ЭФФЕКТИВНЫХ ЗАРЯДОВ И ПРЕДСКАЗАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ УПАКОВКИ ФУРАЗАНОТЕТРАЗИНДИОКСИДА (ФТДО)



*Барaboшкин Н.М.<sup>1</sup>, Дзябченко А.В.<sup>2</sup>*

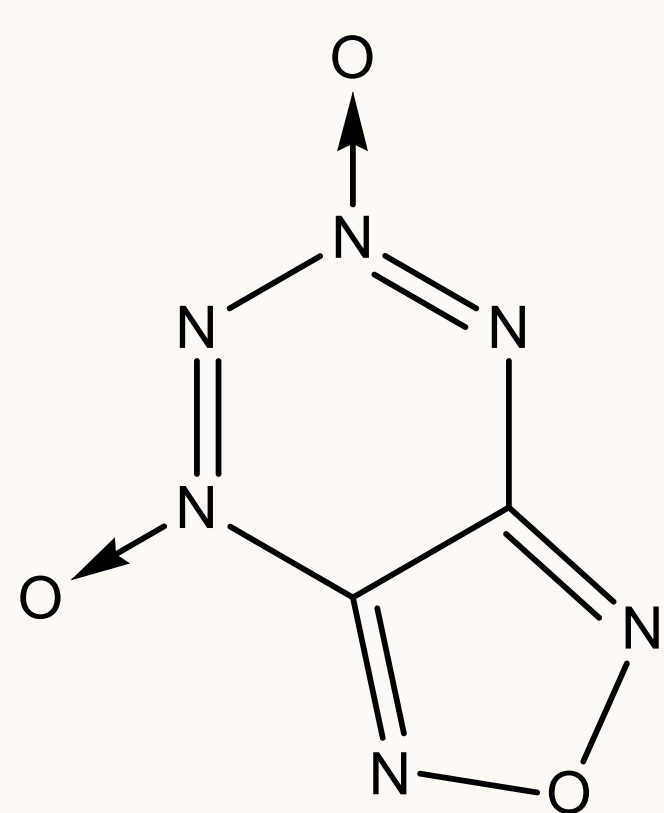
<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва

<sup>2</sup>ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я. Карпова, г. Москва

nikitabaraboshkin@gmail.com

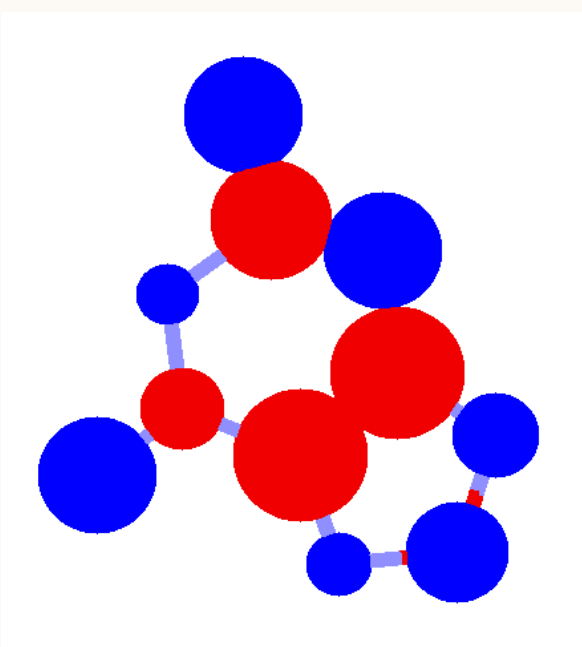
На основе ранее разработанной методики моделирования строения кристаллов органических соединений [1] выполнен глобальный поиск оптимальных упаковок молекул ФТДО. Моделирование осуществлялось поэтапно: (1) в начале генерировалась сетка пробных точек вокруг молекулы в радиусе 7,5 Å, для чего использовалась программа FitMEP; (2) методом квантовой-химии (DFT/B3LYP) рассчитывалось 3D-распределение молекулярного электростатического потенциала (МЭП); (3) выполнялась минимизация отклонений значения Кулоновского электростатического потенциала от квантово-механического путем варьирования величины заряда и его расположения для каждого атома. Качество модели оценивалось по относительному среднеквадратичному отклонению модельного потенциала от квантово-механического ( $R_{\text{отн}}$ ). Как наилучшая была выбрана модель смещенных зарядов ( $R_{\text{отн}} = 1.1\%$ ) для вычисления электростатической энергии в кристалле. Энергия сил Ван-дер-Ваальса вычислялась с применением атом-атомных потенциалов 6-12 Леннард-Джонса.

Поиск оптимальных упаковок осуществлялся с применением программы PMS [2] в статистически наиболее распространённых пространственных группах симметрии. Наиболее выгодная по энергии структура с плотностью 1.87 г/см<sup>3</sup> найдена в группе *Pbca*,  $Z = 8$ .

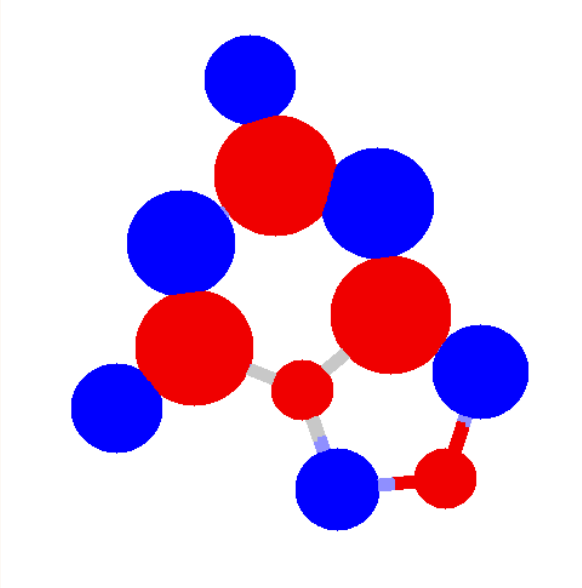


Gaussian,  
FitMEP

Расчет МЭП и эффективных зарядов в молекуле.



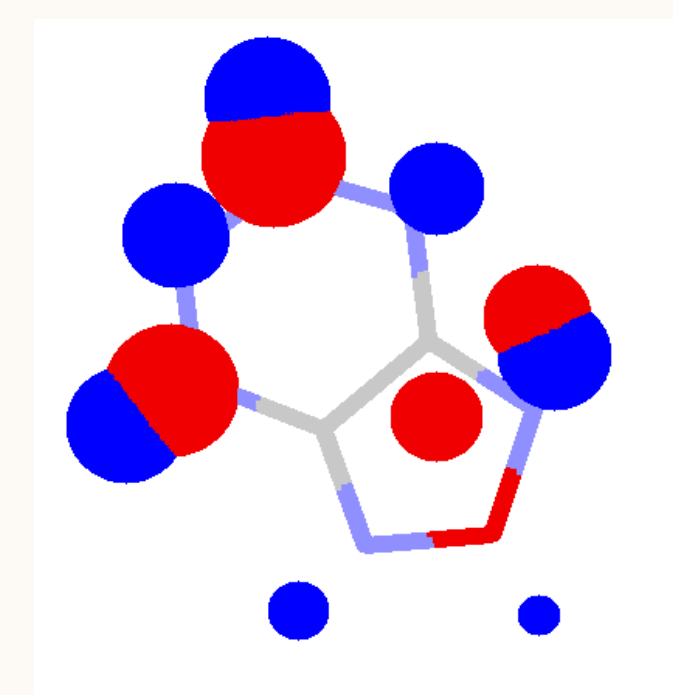
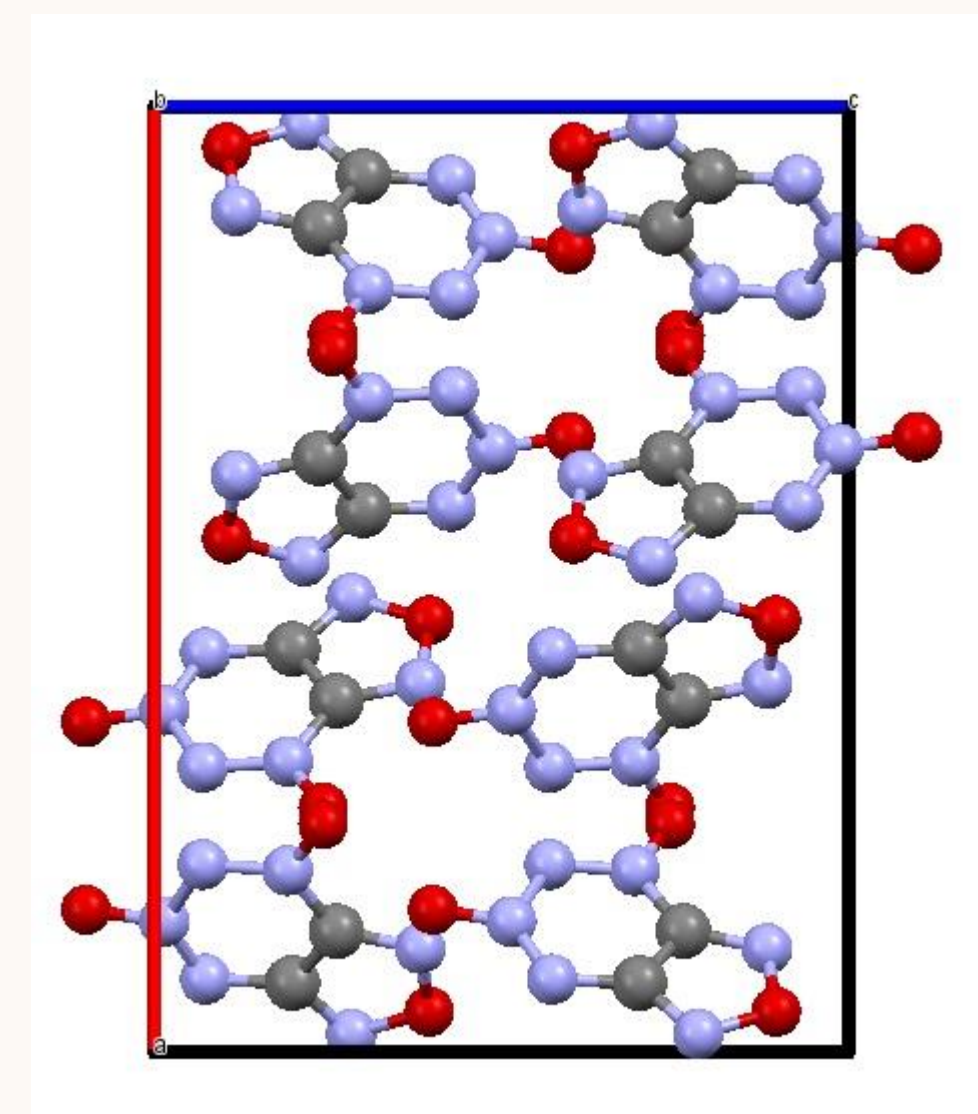
Модель зарядов по Малликену  $R = 162\%$



Модель уточненных зарядов  $R_{\text{отн}} = 6.6\%$

PMS

Расчет оптимальной упаковки молекулы ФТДО



Модель смещенных зарядов  $R_{\text{отн}} = 1.1\%$

Литература:

1. Дзябченко А.В. Мультипольная аппроксимация электростатического потенциала молекул. *Ж. физической химии*. 2008, 82, 875–884.

2. Дзябченко А.В., От молекулы к твердому телу: предсказание структур органических кристаллов, *Ж. физической химии*. 2008, 82, 1861–1870.