

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВОДОРОДНОГО СВЯЗЫВАНИЯ В СТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ АРАМИДОВ

Токарь А. В., Чигвинцева О. П.

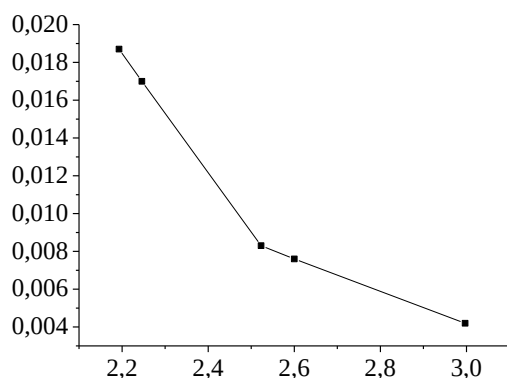
Днепровский государственный аграрно-экономический университет
atokar_2004@ukr.net

С использованием метода функционала плотности в приближении B3LYP/6-311++G(d,p) осуществлен детальный структурный анализ внутри- и межмолекулярных взаимодействий отдельных участков макромолекул, содержащих ариламидные фрагменты. В рамках АИМ-теории Бейдера рассчитаны значения электронной плотности для критических точек наиболее значимых водородных связей, а также слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий, позволяющие произвести их дополнительную оценку с точки зрения эффективности связывания.

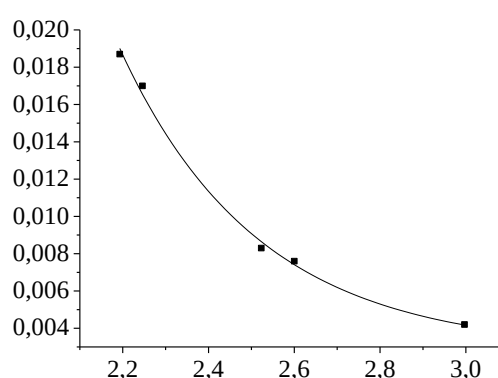
Как показывают данные табл., найденные значения электронной плотности хорошо коррелируют с длинами соответствующих связей во всем диапазоне приведенных значений. На рис. показан ход зависимостей $\rho(r)$, который в случае линеаризации (кривая А) демонстрирует наличие перегиба при $r \sim 2,500$ Å, отвечающего плавному переходу из области промежуточных по силе водородных связей в область слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий.

Таблица. Расчетные значения электронной плотности (ρ) в критических точках связей в зависимости от их длины (r) [приближение B3LYP/6-311++G(d,p)]

$\rho, \text{e}/\text{\AA}^3$	0,0187	0,0170	0,0083	0,0076	0,0042
$r, \text{\AA}$	2,193	2,246	2,523	2,600	2,997



А



В

Рис. Зависимости электронной плотности ($\rho, \text{e}/\text{\AA}^3$) как функции межатомных расстояний ($r, \text{\AA}$) некоторых внутри- и межмолекулярных взаимодействий

В случае экспоненциальной зависимости $\rho(r)$ (кривая В) корреляционное уравнение, а также его основные параметры имеют вид:

$$\rho(r) = (0,0028 \pm 0,0009) + (0,0162 \pm 0,0009) \cdot \exp[(2,193 - r)/(0,325 \pm 0,047)].$$

В целом, полученные результаты согласуются с имеющимися литературными данными относительно особенностей распределения электронной плотности в молекулярных кристаллах ароматических структур и, таким образом, могут быть использованы для идентификации характера связей внутри одного их типа. При этом следует отметить, что лапласиан электронной плотности $\nabla^2\rho(r)$ в таком качестве столь явно не проявляется.