Осенняя сессия

Тема доклада: Периодические DFT расчеты межмолекулярных взаимодействий в кристаллах: сопоставление методов AIM и поверхностей Хиршфельда

Венер Михаил Владимирович



Двумерные диаграммы отпечатков пальцев (2D-диаграммы), полученные из анализа поверхности Хиршфельда очень широко используются при интерпретации межмолекулярных (нековалентных) взаимодействий в кристаллах. Во многих органических и многокомпонентных кристаллах лекарственного назначения. 2D-диаграммы часто указывают на существенный вклад контактов H···H, обычно составляющий от 20% до 50%. При использовании 2D-диаграмм обычно опускаются два важных аспекта: верификация вклада контактов H···H и обсуждение их роли в формировании структуры кристалла. В литературе эти вопросы были изучены посредством сопоставления вкладов контактов H···H, найденных из 2D-диаграмм с вкладами, полученных с использованием анализа Бадера кристаллической электронной плотности (AIM). Установлено, что 2D-диаграммы следует использовать с осторожностью для идентификации контактов H···H в молекулярных кристаллах с умеренными и сильными водородными связями.

Доктор физико-математических наук
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН)

