

ЛОКАЛЬНОЕ ЭЛЕКТРОННОЕ ДАВЛЕНИЕ И ОСОБЕННОСТИ МОСТИКОВОЙ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ В КРИСТАЛЛЕ $(C_{22}H_{16}I_2N_2S_2)^+I_3^-$

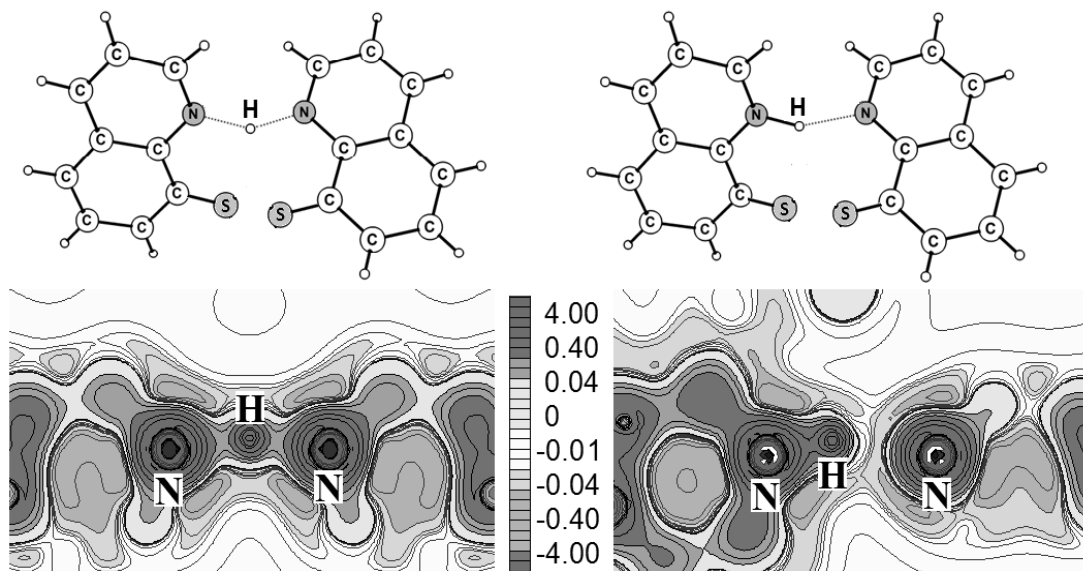
Барташевич Е.В.^а, Кропотина К.К.^а, Сташ А.И.^б, Цирельсон В.Г.^в

^аЮжно-Уральский государственный университет (НИУ), Челябинск, Россия

^бНаучно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я.Карпова, Москва, Россия

^вРоссийский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева, Москва, Россия

Мостиковая водородная связь $[N...H...N]^+$ является одним из сравнительно сильных нековалентных взаимодействий в кристалле нового соединения (Е)-8-((2,3-диiodо-4-(хинолин-8-илтио)бут-2-ен-1-ил)тио)хинолин-1-ия триiodида $(C_{22}H_{16}I_2N_2S_2)^+I_3^-$ (**1**) [1]. На основании РСА при 293 и 100К найдены аргументы в пользу динамического характера разупорядочения атома Н между парой соседних тиохинолиниевых циклов. Чтобы убедиться в надежности определения положения атома Н в общей $[N...H...N]^+$ или частной $[N^+-H...N]$ позициях, мы детализировали распределение расчетной электронной плотности (CRYSTAL14/TOPOND/V3LYP/TZP) и исследовали недавно введенную функцию локального электронного давления LEP [2] (см. рисунок).



Пространственное распределение локального электронного давления, формируемое эластической средой электронов и ядер в кристалле, показывает регионы сопротивления сжатию ($LEP > 0$) и регионы, допускающие возможное уплотнение среды ($LEP < 0$). Сопротивление сжатию в **1** наблюдается в ковалентных связях, а также в электронных оболочках атомов (где они разделены сферами с $LEP < 0$). При совершении виртуальной работы, в этих областях будет возникать наибольшее сопротивление дальнейшему сжатию. Если атом Н находится в общей позиции, LEP равномерно распределена между двумя связями $[N...H...N]^+$. Это отвечает более высокой энергии кристалла. Под действием теплового фактора атом Н может случайно сместиться в одну из частных позиций $[N^+-H...N]$. Тогда между атомом Н и удаленным атомом N возникает область минимального сопротивления сжатию ($LEP < 0$). В результате, при благоприятных температурных условиях атом Н может сместиться в сторону общей позиции, а затем перескочить к противоположному атому N. Таким образом, локальное электронное давление иллюстрирует тонкие особенности атомных взаимодействий в кристаллах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты 16-03-00057а и 14-03-00961.

1. E.V. Bartashevich, A.I. Stash, V.I. Batalov, I.D. Yushina, T.N. Drebuschak, E.V. Boldyreva, V.G. Tsirelson. Готовится к печати.
2. V.G. Tsirelson, A.I. Stash, I.V. Tokatly. (2016): Bonding in molecular crystals from the local electronic pressure viewpoint, *Molecular Physics*, DOI:10.1080/00268976.2015.1101173