

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛА БЕНЗОЛЬНОГО СОЛЬВАТА ТЕТРАЗИНОТЕТРАЗИНТЕТРОКСИДА*

А. В. Дзябченко¹, Д. В. Хакимов², Т. С. Пивина³

Аннотация: Аппроксимацией *ab initio* молекулярного электростатического потенциала (МЭП) по программе FitMER получены модели эффективных зарядов (ЭЗ) в молекулах изомеров тетразинотетразинтетроксидов (ТТТО) симметрии C_{2h} (I) и C_{2v} (II), а также бензола. Для наиболее точных моделей зарядов с использованием программы РМС выполнен поиск оптимальных упаковок в разных пространственных группах для бензольного сольвата II, которые свидетельствуют об отличном согласии расчетной структуры в глобальном минимуме поверхности потенциальной энергии (ППЭ) с экспериментально установленной структурой.

Ключевые слова: высокоплотные высокоэнергоемкие (ВПВЭ) соединения; метод атом-атомных потенциалов; молекулярный электростатический потенциал; энергия электростатического взаимодействия молекул; предсказание кристаллической структуры; плотность молекулярных кристаллов

Литература

1. Churakov A. M., Tartakovsky V. A. New high nitrogen heterocycles with alternation of charges: Stability and strategy of synthesis // 37th Annual Conference (International) of ICT Proceedings. — Karlsruhe, Germany, 1998. Vol. 7. P. 1–14.
2. Churakov A. M., Tartakovsky V. A. Progress in 1,2,3,4-tetrazine chemistry // Chem. Rev., 2004. Vol. 104. P. 2601–2616.
3. Shechter H. Synthesis of high energy 1,2,3,4-tetrazine 1,3-di N-oxides and pentazine poly-N-oxides. Los Alamos, NM, USA: Los Alamos National Laboratory, 2004. Report AFRL-SR-AR-TR-05-0032.
4. Song X., Li J., Hou H., Wang B. Extensive theoretical studies of a new energetic material: Tetrazino-tetrazine-tetraoxide (TTTO) // J. Comput. Chem., 2009. Vol. 30. P. 1816–1820. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.21182/abstract>.
5. Christe K. S., Dixon D. A., Vasiliu M., Wagner R. I., Haiges R., Boatz J. A., Ammon H. L. Are DTTO and iso-DTTO worthwhile targets for synthesis? // Propel. Explos. Pyrot., 2010. Vol. 35. P. 1–7.
6. Politzer P., Lane P., Murray J. S. Computational characterization of two di-1,2,3,4-tetrazine tetraoxides, DTTO and iso-DTTO as potential energetic compounds // Cent. Eur. J. Energ. Mat., 2013. Vol. 10. P. 37–52.
7. Mendoza-Cortes J. L., An Q., Goddard III W. A., Ye C., Zybin S. Prediction of the crystal packing of di-tetrazine-tetroxide (DTTO) energetic material // J. Comp. Chem., 2015. Vol. 37. No. 2. P. 163–167. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.23893/abstract>.
8. Klenov M. S., Guskov A. A., Anikin O. V., Churakov A. M., Strelenko Yu. A., Fedyanin I. V., Lyssenko K. A., Tartakovsky V. A. Synthesis of tetrazino-tetrazine 1,3,6,8-tetraoxide (TTTO) // Angew. Chem., 2016. Vol. 55. P. 1.
9. Дзябченко А. В. Мультипольная аппроксимация электростатического потенциала молекул // Ж. физ. химии, 2008. Т. 82. № 5. С. 875–884.
10. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al. Gaussian 98. Revision A.11.3. Pittsburgh, PA, USA: Gaussian Inc., 2002.
11. Дзябченко А. В. От молекулы к твердому телу: предсказание структур органических кристаллов // Ж. физ. химии, 2008. Т. 82. № 10. С. 1861–1870.
12. Belsky V. K., Zorkaya O. N., Zorky P. M. Structural classes and space groups of organic homomolecular crystals: New statistical data // Acta Crystallogr. A, 1995. Vol. 51. P. 473–481.
13. Cruz Cabeza A. J., Pidcock E., Day G. M., Motherwell W. D. S., Jones W. Space group selection for crystal structure prediction of solvates // Cryst. Eng. Commun., 2007. Vol. 9. P. 556–560. doi: 10.1039/b702073b. <http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2007/CE/b702073b#!div>.
14. Dzyabchenko A. V. Symmetry of the lattice-energy functional of a molecular crystal // Acta Crystallogr. A, 1983. Vol. 39. P. 941–946.
15. Momany F. A., Carruthers L. M., McGuire R. F., Scheraga H. A. Intermolecular potentials from crystal data. III. Determination of empirical potentials and application to the packing configurations and lattice energies in crystals of hydrocarbons, carboxylic acids, amines, and

*Вычисления кристаллических структур сольвата по программе РМС проводились параллельно с привлечением ресурсов СВК «Ломоносов» НИВЦ МГУ и «МВС100К» МСЦ РАН. Финансовая поддержка работы осуществлялась в рамках проекта РФФИ 14-03-01091.

¹Физико-химический институт им. Л. Я. Карпова, adz@cc.nifhi.ac.ru

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, 7933765@mail.ru

³Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, tsp@ioc.ac.ru

- amides // J. Phys. Chem., 1974. Vol. 78. No. 16. P. 1595–1620.
16. *Dzyabchenko A. V.* Method of crystal-structure similarity searching // Acta Crystallogr. B, 1994. Vol. 50. No. 4. P. 414–425.

Поступила в редакцию 12.05.17