**Исследование галогенной связи I‧‧‧N в растворе методами молекулярной динамики**

***Титова А.А., Крутин Д.В., Рожков А.С., Тупикина Е.Ю.***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Институт Химии, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail: st064215@spbu.ru*

Нековалентные взаимодействия, в частности, галогенные связи, играют важную роль в формировании структуры многих биологических объектов, материалов и т.д. Галогенная связь образуется путём взаимодействия σ-дырки галогена (например, иода) и электронной парой более электроотрицательного атома (например, азота). Изменение прочности галогенной связи определяет биологическую активность дофамина [1], а также может использоваться для стабилизации переходного состояния в энантиоселективном катализе [2]. Для детального исследования галогенных связей и прогнозирования свойств часто используются методы теоретической химии и компьютерного моделирования. Важно понимать, что в молекулярных системах являются подвижными не только электроны, но и ядра, что оказывает влияние в том числе на свойства галогенных связей. Поэтому для теоретического описания галогенных связей необходимо использовать не стационарный, а динамический подход – например, *ab initio* молекулярную динамику, позволяющую учесть динамику ядер, а также с высокой точностью описать электронное состояние системы.

В рамках данной работы проводились исследования динамики галогенных связей в растворе хлороформа – типичного органического растворителя с небольшим числом атомов. В качестве доноров галогенных связей были выбраны молекулы различных замещённых дииодтетрафторбензолов (4 атома фтора увеличивают электронодефицитную область на атомах иода), а в качестве акцептора – молекула уротропина (4 атома азота, способных к образованию галогенной связи с иодом).



Рис. 1. Примеры изучаемых систем, содержащие галогенную связь: **А** 1,2-дииод-3,4,5,6-тетрафторбензол и уротропин; **В** 1,3-дииод-2,4,5,6-тетрафторбензол и уротропин; **С** 1,4-дииод-2,3,5,6-тетрафторбензол и уротропин;

Равновесные геометрии исследуемых систем были получены на уровне теории PW6B95-D3/def2-TZVP, затем оптимизированные комплексы были помещены в ячейку с молекулами хлороформа. Динамическое моделирование проводилось в NVT ансамбле при комнатной температуре.

После проведения моделирования был определён диапазон изменений во времени геометрических характеристик (длин и углов галогенной связи). Также были проведены расчёты электронных параметров и построены их корреляции с геометрическими параметрами галогенной связи. Было показано, что прочность галогенной связи с точки зрения геометрических параметров может флуктуировать до 25 %, а с точки зрения электронных параметров – до 40 %, что может быть использовано для разработки адаптивных супрамолекулярных материалов.

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 24-73-10155.*

**Литература**

1. Kurczab, R., Kucwaj-Brysz, K., Sliwa, P. The Significance of Halogen Bonding in Ligand– Receptor Interactions: The Lesson Learned from Molecular Dynamic Simulations of the D4 Receptor. Molecules. 2020. Vol. 25. P 1–14.

2. Arai, T., Horigane, K., Watanabe, O., Kakino, J., Sugiyama, N., Makino, H., Yamanaka, M. Association of Halogen Bonding and Hydrogen Bonding in Metal Acetate-catalyzed Asymmetric Halolactonization. iScience. 2019. Vol. 12. P 280–292.