**Анализ водородных связей в гомомолекулярных кристаллах**

**2R,2R′-1,3-пропандиолов**

***Доминник Е.Е., Гринева О.В.***

*Студентка, 3 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

*E–mail: dominnikjr@gmail.com*

Водородные связи (H-связи) оказывают существенное влияние на строение отдельных молекул и свойства конденсированных фаз, причем в последнем случае важен не только сам факт образования H-связей, но и вид тех молекулярных ассоциатов (H-ассоциатов), которые при этом реализуются. Сочетание гибкости молекул с наличием нескольких функциональных групп, способных к образованию классических водородных связей, может приводить к конкуренции между внутри- и межмолекулярными H-связями, а также делает потенциально возможными ассоциаты разнообразного строения. Выявление факторов, благоприятствующих образованию определенных H-ассоциатов, является одним из аспектов инженерии кристаллов и создания материалов, имеющих желаемое строение и свойства. Цель данной работы состояла в изучении влияния заместителей, находящихся в 2,2′-положениях молекулы 1,3-пропандиола, на систему водородных связей в гомомолекулярных (состоящих из одинаковых молекул) кристаллах.

Структуры для анализа были найдены в Кембриджском банке структурных данных (CSD; версия 5.43 с тремя дополнениями) с помощью программы ConQuest. В рамках данной работы из рассмотрения были исключены соединения, имеющие помимо двух гидроксильных групп иные функциональные группы, способные к участию в образовании H-связей в качестве донора протонов. Всего было рассмотрено 30 веществ (в том числе две полиморфные модификации одного из соединений).

Существуют два основных уровня анализа межмолекулярных контактов: локальный, характеризующий отдельные связи и окружение отдельных атомов, и тотальный, рассматривающий объединение молекул контактами определенного типа во всей фазе. Часть этой информации удобно представлять в виде символа графа, в котором ребра соответствуют анализируемым контактам, а вершинами обычно считают молекулы. При включении в символ графа слишком большого числа параметров он становится трудным для восприятия, поэтому разные авторы делают акценты на разных характеристиках системы. Например, в работах П. М. Зоркого и Л. Н. Кулешовой [1] в качестве основы классификации H-ассоциатов была выбрана их размерность: буквы *C*, *L*, *F* обозначают ассоциаты периодичные в одном, двух и трех измерениях соответственно, а *I* – непериодичные.

В кристаллах исходного соединения − 1,3-пропандиола − реализуются слоистые ассоциаты, при этом каждая гидроксильная группа участвует в двух водородных связях, а первичным фрагментом структуры является центросимметричный димер (символ графа по Зоркому−Кулешовой $L\_{3}^{4}\left(2,6\right);$ верхний индекс – число H-связей, образованных одной молекулой; нижний индекс – число молекул, связанных с исходной; числа в скобках – размеры неперекрывающихся циклов из связанных H-связями молекул). Для рассмотренных веществ участие обеих OH-групп каждой молекулы в двух H-связях с такими же группами типично (наблюдается в ~60% структур), однако точно такая же система H-связей, как в 1,3-пропандиоле, встречается очень редко. Наиболее распространенным (~20%) оказался ленточный мотив с графом $C\_{3}^{4}(2,4)$, в котором первичным фрагментом тоже является димер.

**Литература**

1. Kuleshova L. N.; Zorky P. M. Graphical enumeration of hydrogen-bonded structures //Acta Cryst. Sect. B. 1980. V. 36. No. 9. P. 2113−2115.