

Введение Диоксидинитробензофуоксан и комплексные соединения на его основе с s-элементами обладают разнообразной биологической активностью [1-5]. Мононатриевый комплекс диоксидинитро-бензофуоксана  $\text{NaHDODNBF}$  был получен из динатриевого комплекса диоксидинитробензофуоксана  $\text{Na}_2\text{DODNBF}$  по реакции:  $\text{Na}_2\text{DODNBF} + \text{HCl} = \text{NaHDODNBF} + \text{NaCl}$ . (1) Описан методами ИК спектроскопии и РСТА [5]. В кристалле  $\text{NaHDODNBF}$  имеет трехмерную полимерную структуру, состоящую из слоев, связанных между собой мостиковыми молекулами воды. Для более полного изучения структуры  $\text{NaHDODNBF}$  были проведены исследования методами квантовохимического моделирования. Экспериментальная часть Квантово-химические расчёты проводились в рамках теории функционала плотности с использованием «негибридного» обменно-корреляционного функционала  $w\text{PBEhPBE}$ , встроенного в программный пакет «Gaussian-09» [6]. Для описания валентных электронов атомов C, N, H, O, Cl и Na применялся стандартный базисный набор TZVP [7-8]. Системы с открытой оболочкой считали в рамках спин-поляризованной версии уравнений Кона-Шэма. Геометрия исследуемых комплексов оптимизировалась без ограничения по симметрии. Наличие энергетического минимума (стационарной точки) на поверхности потенциальной энергии подтверждалось отсутствием отрицательных частот нормальных колебаний. Влияние растворителя (вода) учитывалось в рамках континуальной модели COSMO (Conductor-like Screening Model) [9]. Результаты и обсуждение По данным РСТА (рис. 1) осуществлены тестовые оптимизации геометрии  $\text{NaHDODNBF}$  с использованием различных приближений BLYP, PBERPBE,  $w\text{PBEhPBE}$  (рис. 2-4). Применение BLYP-функционала приводит к большим длинам связей, чем в случае PBE-функционалов. Особенно это относится к различным типам связей N-O (нитрогруппы, фуоксановый цикл). Длины связей, полученные PBE-функционалами, не существенно отличаются от данных РСТА или совпадают. Следует отметить, что  $w\text{PBEhPBE}$ -функционал дает длины связей на 0,001-0,002 Å короче, чем PBERPBE-функционал, соответственно (рис. 1-4). Рис. 1 Геометрические параметры  $\text{NaHDODNBF}$  (длины связей в Å и валентные углы в градусах) по данным РСТА [5] Рис. 2 Геометрические параметры  $\text{NaHDODNBF}$  (длины связей в Å и валентные углы в градусах), полученные в результате оптимизации геометрии в вакууме с использованием «негибридного» DFT-функционала BLYP Рис. 3 Геометрические параметры  $\text{NaHDODNBF}$  (длины связей в Å и валентные углы в градусах), полученные в результате оптимизации геометрии в вакууме с использованием «негибридного» DFT-функционала PBERPBE Рис. 4 Геометрические параметры  $\text{NaHDODNBF}$  (длины связей и валентные углы), полученные в результате оптимизации геометрии в вакууме с использованием «негибридного» DFT-функционала  $w\text{PBEhPBE}$  Заключение Таким образом, полученные данные указывают на достаточно хорошую сходимость с данными РСТА по длинам и углам связей «негибридного» обменно-

корреляционного функционала  $w_{PBEhPBE}$ . Это позволит использовать эти данные для дальнейших расчетов. Авторы выражают благодарность д.х.н. проф. Л.М. Юсуповой за предоставление для работы натриевой соли диоксидинитробензофураксана.