Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 14-37-3-1

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/ Поступила в редакцию 06 мая 2014 г. УДК 548.31+ 544.03 + 544.169.

Трийодид-анион в кристалле аллилуротропиния: нековалентные взаимодействия и спектральные характеристики

© Юшина $^{1+}$ Ирина Дмитриевна, Рудаков 1 Борис Викторович, Слепухин 2 Павел Александрович и Барташевич 1* Екатерина Владимировна

¹ Химический факультет. Южно-Уральский государственный университет. Просп. Ленина, 76. г. Челябинск, 454080. Россия. Тел.: (351) 267-95-64. E-mail: idu-xda@mail.ru ² Институт органического синтеза им. Постовского, УрО РАН. С. Ковалевской, 20. г. Екатеринбург, 620041. Россия.

*Ведущий направление; *Поддерживающий переписку

Ключевые слова: трийодид-анион, полийодиды, Раман-спектроскопия, нековалентные взаимодействия, QTAIM, периодические граничные условия.

Аннотация

Синтезирована и уточнена методом рентгеноструктурного анализа новая кристаллическая структура аллилуротропиния трийодида $C_9H_{17}N_4^{\ +}I_3^{\ -}$. Исследованы Раман спектральные характеристики монокристалла как в неполяризованном свете, так и с различной взаимной ориентацией осей кристалла и вектора поляризации падающего и рассеянного света. Вычислены моды колебаний, активные в Раман спектре с использованием кристаллического приближения, периодических граничных условий и локализованных атомных базисных наборов. По данным квантово-топологического анализа электронной плотности (QTAIM) охарактеризованы нековалентные взаимодействия с участием атомов йода в исследуемой структуре кристалла.