

НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

УДК 541.6

**КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР 2-(2'-ПИРИДИЛ)ИМИДАЗОЛА  
В ТВЕРДОМ СОСТОЯНИИ И РАСТВОРАХ: ЭКСПЕРИМЕНТ  
И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ**

**Владимир Маркович Сенявин, Гульнара Маратовна Курамшина**

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

**Автор, ответственный за переписку:** Владимир Маркович Сенявин,  
senyavin@phys.chem.msu.ru

**Аннотация.** Исследованы ИК-Фурье спектры поглощения и спектры КР 2-(2'-пиридил)имидазола (2ПИ) в твердом состоянии, а также ИК-спектры растворов в тетрахлорметане и дихлорметане. Выполнены квантово-химические расчеты молекулы 2ПИ и ряда ее кластеров на разных уровнях теории. На основе совместного анализа экспериментальных спектров и результатов расчетов предложена интерпретация спектров с учетом возможности образования ассоциатов молекулы с межмолекулярными водородными связями.

**Ключевые слова:** 2-(2'-пиридил)имидазол, строение молекулы, колебательный спектр, теория функционала плотности

DOI: 10.55959/MSU0579-9384-2-2025-66-1-43-51

**Финансирование.** Работа выполнена по госбюджетной тематике НИР (номер ЦИТИС: 121031300176-3).

**Для цитирования:** Сенявин В.М., Курамшина Г.М. Колебательный спектр 2-(2'-пиридил)имидазола в твердом состоянии и растворах: эксперимент и квантово-химические расчеты // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2025. Т. 66. № 1. С. 43–51.

ORIGINAL ARTICLE

**VIBRATIONAL SPECTRA OF 2-(2'-PYRIDYL)IMIDAZOLE IN SOLID  
AND SOLUTIONS: EXPERIMENT AND QUANTUM-CHEMICAL  
CALCULATIONS**

**Vladimir M. Senyavin, Gulnara M. Kuramshina**

Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry

**Corresponding author:** Vladimir M. Senyavin, senyavin@phys.chem.msu.ru

**Abstract.** FT-infrared and Raman spectra of 2-(2'-pyridyl)imidazole (2PI) in solid state as well as FTIR solutions spectra in carbon tetrachloride and dichloromethane were investigated. Quantum-chemical calculations of 2PI molecule and some of its clusters were fulfilled within several theory levels. Basing on joint analysis of experimental and simulated data the spectra were interpreted taking into account a possibility of intermolecular hydrogen bonds formation.

**Keywords:** 2-(2'-pyridyl)imidazole, molecular structure, vibrational spectra, density functional theory

**Financial Support.** The work was carried out on the state budget subject of research (CITIS number: 121031300176-3).

**For citation:** Senyavin V.M., Kuramshina G.M. Vibrational Spectra of 2-(2'-pyridyl)imidazole in Solid and Solutions: Experiment and Quantum-Chemistry Calculations // Vestn. Mosk. un-ta. Ser. 2. Chemistry. 2025. T. 66. № 1. S. 43–51.

Способность 2-(2'-пиридил)имидазола (2ПИ) к образованию комплексов с различными переходными металлами определяет востребованность в координационной химии и, соответственно, привлекает особый интерес к строению и спектральным свойствам соединения [1–4]. Конформационное поведение 2ПИ в твердом состоянии достаточно сложное: по результатам рентгеноструктурного анализа [5] элементарная ячейка кристалла содержит восемь молекул 2ПИ, четыре из которых участвуют в образовании водородных связей (Н-связей) внутри одной асимметричной ячейки. Эти восемь молекул характеризуются разными величинами двугранного угла между пиридилным и имидазольным циклами (угла внутреннего вращения, ВВ), изменяющимися в диапазоне от 1 до 17 град.

В настоящей статье представлены результаты исследования колебательных (ИК и КР) спектров 2ПИ в твердом состоянии и в растворах разной концентрации в тетрахлориде углерода и в хлористом метиле. Интерпретация спектров проведена на основе результатов квантово-химических расчетов строения и колебательных спектров молекулы 2ПИ и ряда ее кластеров.

### Экспериментальная часть

Исследованный образец 2ПИ – продукт компании Sigma-Aldrich Chemical Company (США) с чистотой более 97% ( $T_{пл.} = 135–140$  °С). Колебательные спектры чистого соединения, его растворов и использованных растворителей  $CCl_4$  и  $CH_2Cl_2$  зарегистрированы для образцов, предварительно высушенных в вакууме в течение 48 ч над гидроокисью калия. ИК-спектры твердых образцов исследованы в области  $4000–400$   $cm^{-1}$  в виде таблеток с KBr, а также в режиме НПВО с помощью спектрометра Tensor 27 (Bruker). Спектры растворов зарегистрированы в жидкостных кюветах с окнами KBr при варьировании концентрации и толщины слоя образцов. Спектры КР порошкообразного образца исследованы с помощью интерферометра Equinox-55 (Bruker), снабженного приставкой FRA-106 в области  $3500–100$   $cm^{-1}$ , с использованием геометрии обратного рассеяния на возбуждающей линии 1064 нм лазера Nd:YAG с мощностью 200–500 мВт

при усреднении сигнала по 200 сканам с разрешением  $2$   $cm^{-1}$ .

### Детали вычислений

Квантово-химические расчеты возможных изомеров и ассоциатов (кластеров) 2ПИ выполнены с помощью комплекса программ GAUSSIAN 09 (Revision D.01) [6] на различных уровнях теории: на уровне Хартри – Фока, теории возмущений Меллера – Плессетта 2-го порядка (MP2) и теории функционала плотности с функционалами B3LYP, PBE и BVP86 с рядом базисных наборов (6-31G\*, 6-31+G\*\*, DGDZVP, TZVP) [7] без использования ограничений на структуры рассмотренных систем. Минимумы потенциальной энергии находили при полной релаксации всех геометрических параметров, стационарные точки подтверждены расчетами гармонических частот колебаний с учетом поправок на суперпозицию базиса (BSSE) для кластеров. Матрицы силовых постоянных для стабильных структур рассчитаны с использованием аналитических методов. Потенциальные функции внутреннего вращения (ПФВВ) вокруг центральной связи  $C_i-C_p$  рассчитаны на двух уровнях теории (B3LYP/6-31+G\*\* и MP2/6-31+G\*\*) с шагом в 10 град. для угла вращения  $N_i-C_i-C_p-N_p$  (индексами  $i$  и  $p$  обозначены имидазольный и пиридилный циклы молекулы) при полной релаксации молекулярной геометрии и подтверждены аналитическим расчетом частот колебаний для каждой точки. Для визуализации оптимизированных структур и рассчитанных колебательных спектров использована программа Chemcraft (1.6) [8]. С помощью комплекса программ СПЕКТР [9] проводили преобразование Гессiana в матрицу силовых постоянных в зависимых внутренних координатах в рамках канонической модели [10–11] и для анализа нормальных колебаний.

### Обсуждение результатов

По результатам квантово-химических расчетов на обоих уровнях теории (B3LYP/6-31+G\*\* и MP2/6-31+G\*\*), минимуму потенциальной энергии молекулы 2ПИ соответствует плоская конформация с двугранным углом  $N_i-C_i-C_p$ –

$N_p$ , равным 0 град. Устойчивая структура с геометрическими параметрами, рассчитанными на уровне V3LYP/6-31+G\*\*, приведена на рис. 1. Значения длин связей и валентных углов хорошо совпадают с экспериментальными рентгеноструктурными данными [5].

На рис. 2 представлены потенциальные функции внутреннего вращения (ПФВВ) вокруг центральной связи C–C, полученные на двух уровнях теории: V3LYP/6-31+G\*\* и MP2/6-31+G\*\*. На обоих уровнях расчета на ПФВВ обнаружены дополнительные неглубокие минимумы, относительная энергия которых составляет 9,75 (при угле ВВ 155 град. на уровне V3LYP/6-31+G\*\*)

или 8,94 ккал/моль (при угле 140 град. на уровне MP2/6-31+G\*\*). Эти значения лишь немногим ниже величины барьера ВВ, составляющего (при угле ВВ 100 град. на обоих уровнях расчета) 11,54 и 9,57 ккал/моль для расчетов V3LYP/6-31+G\*\* и MP2/6-31+G\*\* соответственно. Отметим, что если на уровне MP2/6-31+G\*\* плоской транс-( $NiNp$ )-конформации (с углом ВВ 180 град.) отвечает некоторый энергетический барьер, то на уровне V3LYP/6-31+G\*\* конформации с углами ВВ в диапазоне 150–210 град. имеют практически одинаковую энергию. На основании вида ПФ и расчетных относительных энергий гипотетические неплоские конформе-

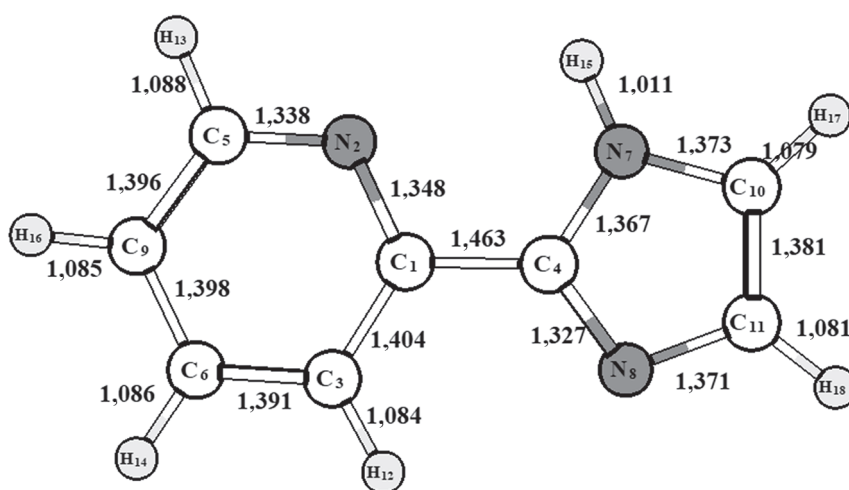


Рис. 1. Оптимизированная структура молекулы 2ПИ

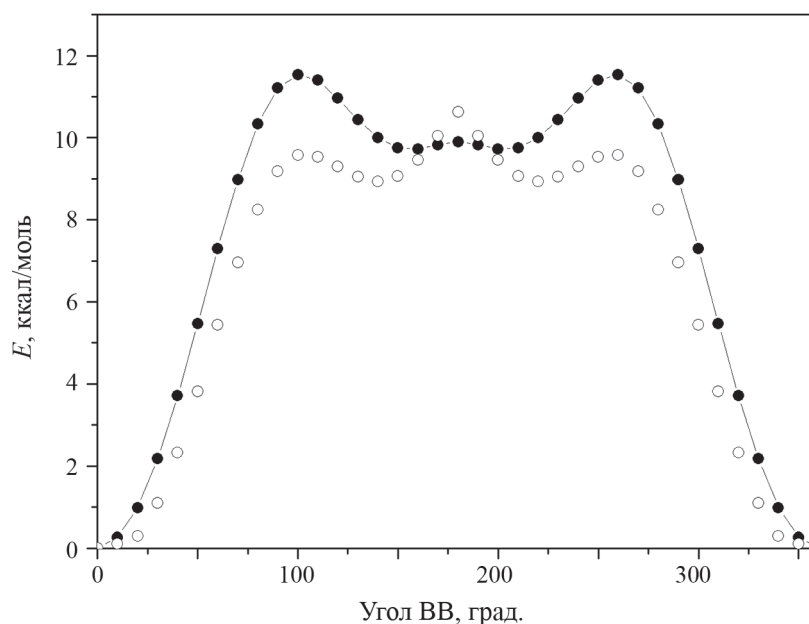


Рис. 2. ПФВВ в молекуле 2ПИ, рассчитанные на уровнях V3LYP/6-31+G\*\* (черные кружки) и MP2/6-31+G\*\* (пустые кружки)

ры молекулы 2ПИ исключены из дальнейшего рассмотрения.

Полученные в работе ИК-спектры разбавленного раствора 2ПИ в тетрахлорметане приведены на верхней кривой рис. 3. На нижней кривой рис. 3 представлены результаты расчета ИК-спектра молекулы 2ПИ, выполненного на уровне B3LYP/6-31+G\*\*. Расчеты хорошо воспроизводят экспериментальные данные и позволяют провести полную интерпретацию спектра разбавленного раствора.

Для анализа форм нормальных колебаний был выбран набор из 69 зависимых внутренних координат молекулы 2ПИ, включающий 19 координат растяжения связей ( $q$ ), 29 координат изменений валентных углов ( $\beta$  для углов с участием атомов водорода,  $\gamma$  – для тяжелых атомов), 21 координату выходов атомов из плоскости ( $\chi$ ) и изменений двугранных углов ( $\tau$ ). Итоговое условное отнесение спектра, выполненное на основании анализа распределения потенциальной энергии (р.п.э.) по частотам колебаний, приведено в таблице.

Небольшие различия между расчетом и экспериментом состоят в проявлении в спектрах раствора слабой очень широкой полосы с максимумом около  $3200\text{ см}^{-1}$  и некотором перераспределении интенсивностей линий в средней области спектра. Причина этих различий состоит, очевидно, в возможной ассоциации молекул 2ПИ даже в разбавленных растворах.

В целях поиска механизмов ассоциации нами исследована концентрационная зависимость ИК-спектров растворов, а также проведены расчеты устойчивости и колебательных спектров димеров, тримеров и тетрамеров 2ПИ. Рассчитанные на уровне B3LYP/6-31+G\*\* наиболее устойчивые структуры димера, тримера и тетрамера 2ПИ представлены на рис. 4.

Как показали проведенные нами расчеты, иминная группа образует водородную связь только с атомом азота соседнего имидазольного цикла, причем энергия этой связи практически одинакова в ряду кластеров и составляет  $5,7\text{ ккал/моль}$  в димере и  $5,8\text{ ккал/моль}$  в тримере и тетрамере 2ПИ.

В экспериментальных спектрах при повышении концентрации растворов (рис. 5) существенно возрастает интегральная интенсивность широкой полосы в области  $3200\text{ см}^{-1}$ , обусловленная появлением водородной связи с образованием (на начальной стадии ассоциации) димера 2ПИ. Одновременно с этим наблюдаются и другие изменения в спектрах, наиболее заметные в области «отпечатков пальцев»  $1200\text{--}900\text{ см}^{-1}$  (рис. 6, А).

Наблюдаемые в эксперименте эффекты хорошо интерпретируются на основании квантово-химических расчетов колебательных спектров кластеров 2ПИ (рис. 6, Б). По результатам расчетов на уровне B3LYP/6-31+G\*\*, в кластерах 2ПИ частота NH-валентного колебания связанной группы уменьшается на  $300\text{--}350\text{ см}^{-1}$ , а

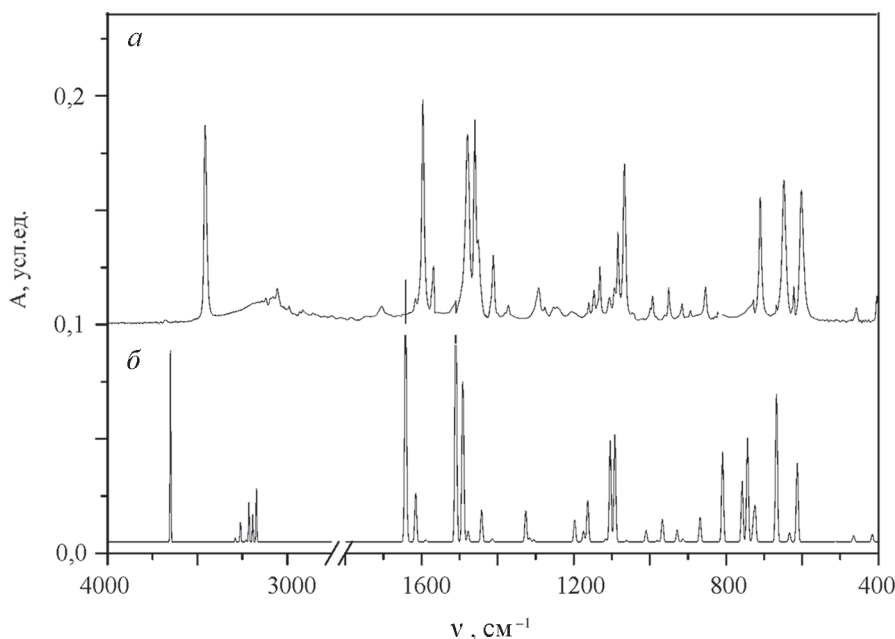


Рис. 3. ИК-спектры 0,07 М раствора 2ПИ в  $\text{CCl}_4$  (а) в сравнении с результатами расчетов на уровне B3LYP/6-31+G\*\* (б)

Условное отнесение ИК-спектра раствора 2ПИ на основании расчетов частот колебаний ( $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ ) и интенсивностей полос ( $I$ ,  $\text{км/моль}$ ) на уровне ВЗЛУР/6-31+С\*\* и анализа форм нормальных колебаний (р.п.э., %) молекулы 2ПИ

Эксперимент, $\text{см}^{-1}$	Расчет $\nu$ ( $I$ )	р.п.э.	Условное отнесение	Эксперимент, $\text{см}^{-1}$	Расчет $\nu$ ( $I$ )	р.п.э.	Условное отнесение
3456 с.	3649 (75,5)	100q(NH)	$\nu(\text{NH})$	1045 пл.	1061 (0,5)	57q(CC <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CC}_{\text{pyr}})$
3186 пл.	3290 (1,6)	99q(CH <sub>im</sub> )	$\nu(\text{CH}_{\text{im}})$	999 пл.	1014 (0,1)	67χ(CH <sub>pyr</sub> )	доор(CH <sub>pyr</sub> )
3164 пл.	3260 (7,8)	99q(CH <sub>im</sub> )	$\nu(\text{CH}_{\text{im}})$	993 сл.	1010 (4,5)	33q(CN <sub>pyr</sub> ), 10γ(CCN <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CN}_{\text{pyr}})$
3142 о.сл.	3228 (1,0)	98q(CH <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CH}_{\text{pyr}})$	961 пл.	981 (0,5)	71χ(CH <sub>pyr</sub> )	доор(CH <sub>pyr</sub> )
3121 о.сл.	3213 (15,7)	96q(CH <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CH}_{\text{pyr}})$	951 сл.	967 (8,9)	36γ(NCN <sub>im</sub> ), 14γ(CCN <sub>im</sub> )	γ(im)
3082 пл.	3192 (10,8)	96q(CH <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CH}_{\text{pyr}})$	915 сл.	929 (4,7)	53γ(CNC <sub>im</sub> ), 16γ(CCN <sub>im</sub> )	γ(im)
3055 сл.	3171 (21,1)	99q(CH <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CH}_{\text{pyr}})$	894 о.сл.	913 (1,2)	61χ(CH <sub>pyr</sub> )	доор(CH <sub>pyr</sub> )
1596 о.с.	1642 (103,8)	52q(CC <sub>pyr</sub> ), 11q(CN <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CC}_{\text{pyr}})$	854 сл.	868 (9,6)	73χ(CH <sub>im</sub> )	доор(CH <sub>im</sub> )
1569 ср.	1615 (19,1)	47q(CC <sub>pyr</sub> ), 14q(CN <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CC}_{\text{pyr}})$	**	809 (35,4)	67χ(CH <sub>pyr</sub> )	доор(CH <sub>pyr</sub> )
**	1589 (0,8)	24q(CN <sub>im</sub> ), 29q(CC <sub>im</sub> )	$\nu(\text{C}_{\text{im}}\text{C}_{\text{pyr}})$	**	758 (24,2)	46χ(CH <sub>pyr</sub> ), 33τ(CC <sub>pyr</sub> )	γ(pyr)
1479 с.	1510 (95,3)	19q(CC <sub>im</sub> ), 11β(CCH <sub>im</sub> )	$\nu(\text{CC}_{\text{im}})$	710 с.	743 (41,0)	93χ(CH <sub>im</sub> )	доор(CH <sub>im</sub> )
1460 о.с.	1492 (63,1)	25q(CN <sub>im</sub> ), 16β(CCH <sub>im</sub> )	$\nu(\text{CN}_{\text{im}})$		728 (7,5)	35γ(CCC <sub>pyr</sub> )	γ(pyr)
1453 пл.	1478 (4,2)	23q(CC <sub>im</sub> ), 18β(CCH <sub>im</sub> )	δip(CH <sub>im</sub> )		723 (13,0)	37χ(C <sub>pyr</sub> C <sub>im</sub> )	доор(C <sub>pyr</sub> C <sub>im</sub> )
1411 ср.	1442 (12,6)	19q(CN <sub>im</sub> ), 16β(CCH <sub>im</sub> )	$\nu(\text{CN}_{\text{im}})$		668 (58,4)	71τ(CN <sub>im</sub> )	τ(im)
1372 сл.	1414 (1,3)	52q(CN <sub>im</sub> )	$\nu(\text{CN}_{\text{im}})$		633 (3,7)	55β(CCH <sub>pyr</sub> ), 17β(NCH <sub>pyr</sub> )	γ(pyr)
1292 ср.	1326 (12,3)	29q(CN <sub>pyr</sub> ), 10q(CC <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CN}_{\text{pyr}})$		613 (31,0)	82χ(NH)	доор(NH)
1276 сл.	1316 (1,6)	36q(CN <sub>im</sub> ), 36β(CCH <sub>im</sub> )	δip(CH <sub>im</sub> )		513 (0,1)	32χ(C <sub>im</sub> C <sub>pyr</sub> ), 31τ(CC <sub>pyr</sub> )	доор(C <sub>im</sub> C <sub>pyr</sub> )
	1305 (0,9)	33q(CN <sub>pyr</sub> ), 10β(CCH <sub>pyr</sub> )	δip(CH <sub>pyr</sub> )		465 (2,5)	43γ(CCN <sub>pyr</sub> ), 37γ(CCN <sub>im</sub> )	τ(pyr)
1161 сл.	1198 (8,7)	37q(CN <sub>pyr</sub> ), 21β(CCH <sub>pyr</sub> )	δip(CH <sub>pyr</sub> )		416 (3,1)	28τ(CN <sub>pyr</sub> ), 26 τ(CC <sub>pyr</sub> )	τ(pyr)
1147 сл.	1174 (4,4)	60β(CCH <sub>pyr</sub> ), 10q(CC <sub>pyr</sub> )	δip(CH <sub>pyr</sub> )		359 (0,1)	35q(CC <sub>pyr</sub> ), 25γ(CCC <sub>pyr</sub> )	τ(pyr)
1131 ср.	1163 (16,6)	44q(CN <sub>im</sub> ), 15q(CC <sub>im</sub> )	$\nu(\text{CN}_{\text{im}})$		270 (1,1)	34τ(CC <sub>pyr</sub> ), 13τ(CN <sub>im</sub> )	τ(im)
	1116 (1,2)	33q(CC <sub>pyr</sub> ), 14β(CCH <sub>pyr</sub> )	$\nu(\text{CC}_{\text{pyr}})$		150 (10,4)	27γ(NCC <sub>pyr</sub> ), 37γ(CCN <sub>im</sub> )	δip(C <sub>pyr</sub> C <sub>im</sub> )
1084 ср.	1104 (39,9)	28β(CCH <sub>pyr</sub> ), 21q(CN <sub>pyr</sub> )	δip(CH <sub>pyr</sub> )		110 (2,6)	46χ(C <sub>im</sub> C <sub>pyr</sub> ), 33τ(CC <sub>pyr</sub> )	доор(C <sub>pyr</sub> C <sub>im</sub> )
1068 с.	1092 (42,3)	24β(CNH <sub>im</sub> ), 18q(CN <sub>im</sub> )	δip(NH)		85 (10,5)	99τ(C <sub>im</sub> C <sub>pyr</sub> )	τ(CiCr)

Обозначения: с. – сильная, ср. – средняя, сл. – слабая, о. – очень, пл. – плечо, \*\* – область поглощения растворителя;  $\nu$  – валентные,  $\delta$  ip/or – плоские / неплоские деформационные,  $\gamma$  – деформационные скелетные,  $\tau$  – торсионные колебания; im – имидазольный, pyr – пиридинный циклы.

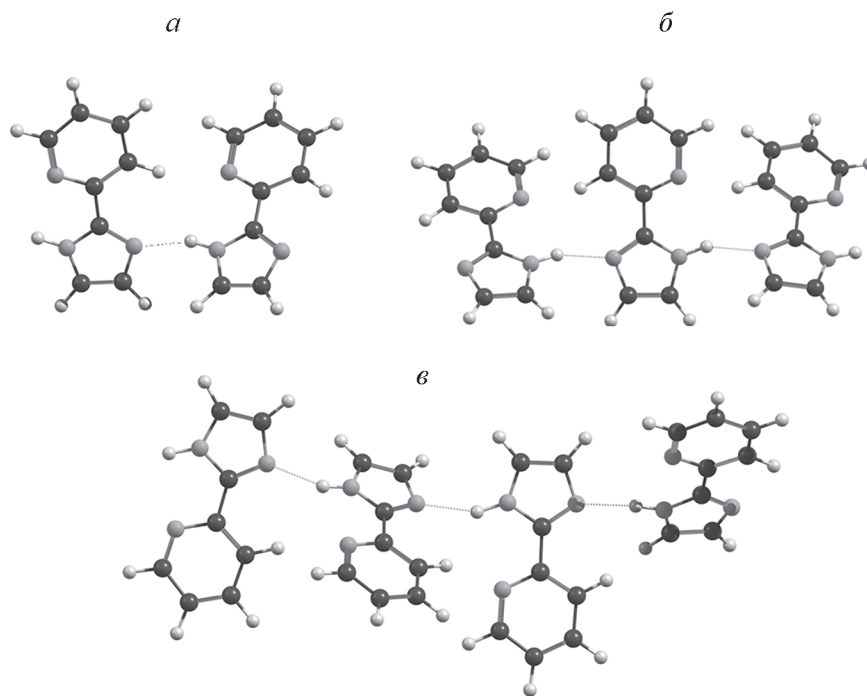


Рис. 4. Оптимизированные на уровне B3LYP/6-31+G\*\* структуры кластеров 2ПИ: *a* – димера, *б* – тримера и *в* – тетрамера

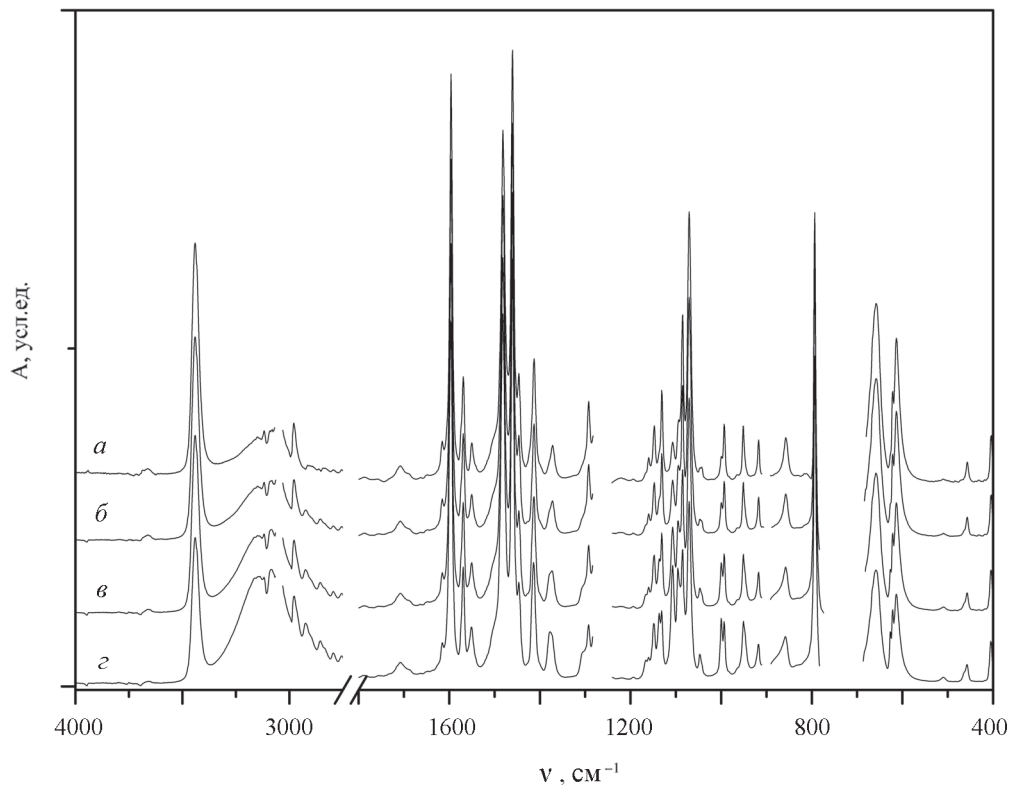


Рис. 5. ИК-спектры растворов 2ПИ в  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ : 0,05 М (*a*), 0,1 М (*б*), 0,2 М (*в*) и 0,4 М (*г*)  
Интенсивности приведены по концентрации растворов и толщине поглощающего слоя

интегральная интенсивность полосы возрастает в 15–30 раз. Чувствительными к образованию водородных связей оказываются также симме-

тричные и антисимметричные колебания имидазольного цикла, антисимметричные валентные колебания пиридинового кольца, а также плоские

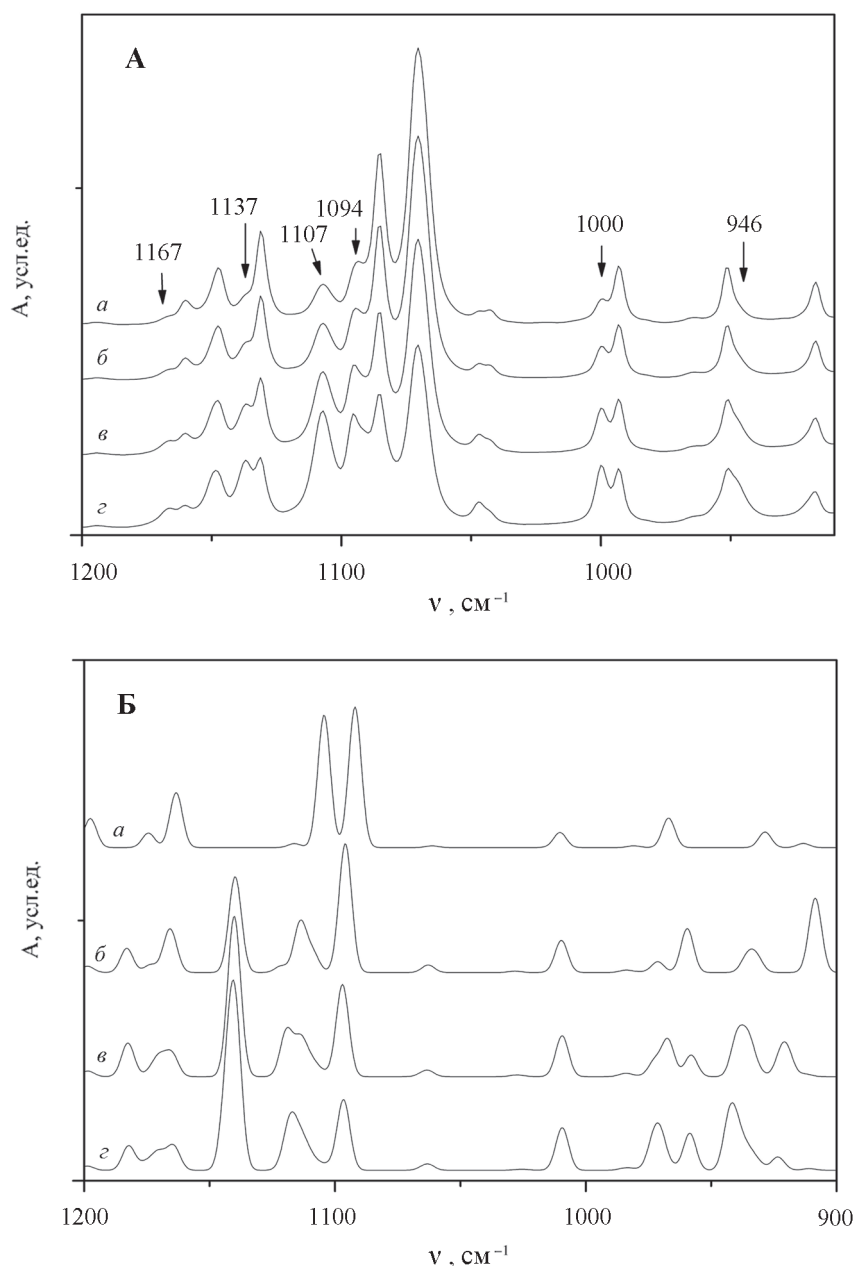


Рис. 6. А: фрагменты экспериментальных ИК-спектров растворов 2ПИ в CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (*a* – 0,05 М, *б* – 0,1 М, *в* – 0,2 М, *з* – 0,4 М. Б: результаты расчетов для мономера (*a*), димера (*б*), тримера (*в*) и тетрамера (*з*) 2ПИ

деформации углов C(N)CH и CNH. Отвечающие им полосы указаны стрелками на рис. 6, А.

Сопоставление спектров концентрированных растворов с ИК-спектрами кристаллического соединения демонстрирует их существенные различия, которые не могут быть прямо интерпретированы на основании рассчитанных для кластеров данных. В качестве примера на рис. 7 приведен ИК-спектр кристалла 2ПИ в сравнении со спектром 0,4 М раствора соединения в хлористом метиле и результатами расчета для тримера 2ПИ в области 1800–400 см<sup>-1</sup>. Аналогичная ситуация на-

блюдается также для спектров КР (рис. 8). По данным [5], в кристалле 2ПИ NH-группы всех молекул участвуют в образовании Н-связей (N–H···N), причем четыре такие связи находятся внутри одной ячейки. С точки зрения межмолекулярной ассоциации молекулы 2ПИ образуют две симметрично-независимые цепочки с водородными связями между имидазольными циклами, направленными в противоположные стороны. Они имеют различные геометрические параметры и могут быть смоделированы в объеме одной ячейки двумя разными тримерами. В первом из них длины Н-связей состав-

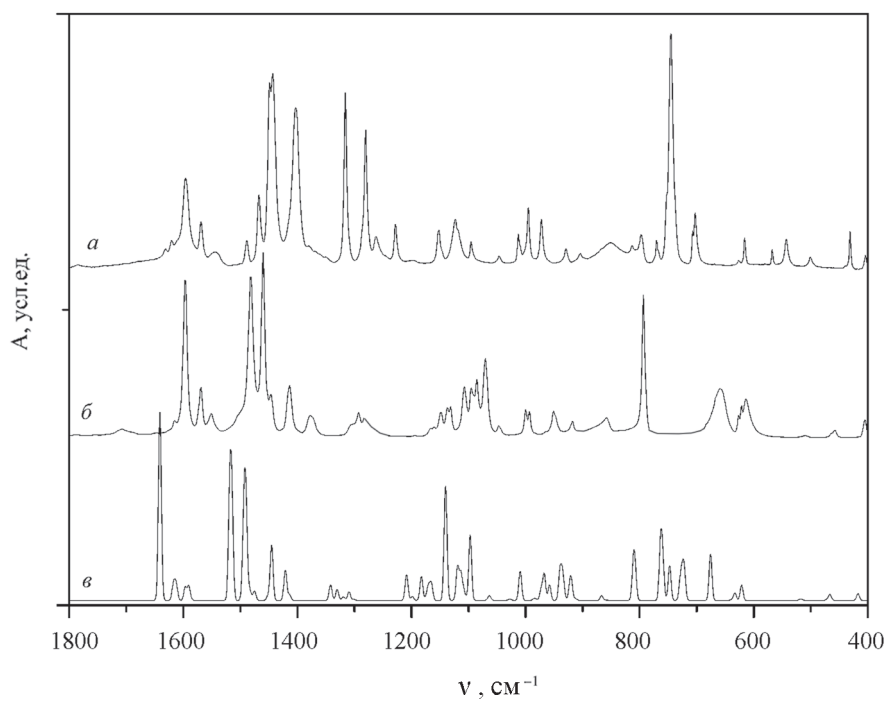


Рис. 7. ИК-спектр кристалла 2ПИ (*a*) в сравнении со спектром 0,4 М раствора (*б*) и результатами расчета (*в*)

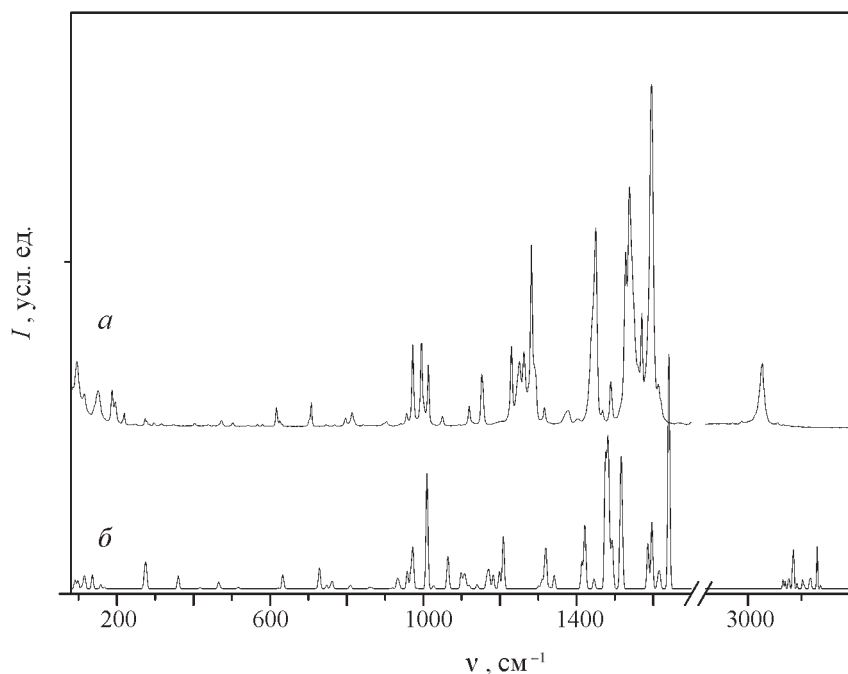


Рис. 8. Спектр КР кристалла 2ПИ (*a*) в сравнении с результатом расчета для тримера молекулы 2ПИ (*б*)

ляют 1,984 и 2,059 Å, а углы NH...N составляют около 172 град. Центральный фрагмент тримера имеет почти плоскую конформацию (угол ВВ равен 5,4 град.), в то время как два соседних сильно искажены до углов ВВ 12,2 и 16,8 град. Двугранные углы между имидазольными циклами

соседствующих молекул 2ПИ равны –145,4 и –152,8 град. В другой цепочке длины Н-связей равны 2,023 и 2,057 Å, углы при них заметно различаются (154,2 и 172,2 град.), центральный фрагмент также плоский (1,3 град.), а два соседних искажены в меньшей степени, чем в первом



случае (углы ВВ равны 6,4 и 11,4 град.). Имидазольные циклы соседних молекул повернуты друг относительно друга на  $-155,5$  и  $64,5$  град. В то же время рассчитанные геометрические параметры кластеров близки к таковым для изолированной молекулы, хотя углы ВВ и изменяются до значений 6,1–6,2 град. в димере 2ПИ и до интервалов  $(-5,3)$ – $(6,3)$  и  $(-3,7)$ – $(6,8)$  град. в молекулах тримера и тетрамера соответственно. Длина Н-связей слегка уменьшается в ряду кластеров от 2,014 Å в димере, до 1,998–2,002 и 1,970–1,994 Å в тримере и тетрамере соответственно и, действительно, имеет разные значения в пределах кластеров. Углы взаимной ориентации имидазольных циклов в димере и тримере близки между собой и лежат в пределах  $83 \pm 2$  град. Угол поворота 4-го

фрагмента 2ПИ относительно соседнего (в кластере тетрамера) равен, по результатам расчета, 148,3 град., одновременно с этим угол  $\text{NH}\cdots\text{N}$  при этой водородной связи также увеличивается примерно на 10 град. и составляет 165 град. Эти расчетные эффекты не описывают в полной мере экспериментально наблюдаемые искажения молекулярной структуры 2ПИ в кристалле, определенную роль в которые вносят, вероятно, дополнительные  $\pi$ - $\pi$  и  $\text{C}-\text{H}\cdots\pi$  взаимодействия [5]. В этом и состоит, на наш взгляд, причина несоответствия экспериментальных ИК- и КР-спектров кристалла 2ПИ расчетным спектрам изолированных кластеров, в то время как такие расчеты позволяют адекватно интерпретировать процессы ассоциации 2ПИ в растворах соединения.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chiswell B., Lions F., Morris B. // *Inorg. Chem.* 1964. Vol. 3. P. 110.
2. Carranza J., Julve M., Sletten J. // *Inorg. Chim. Acta.* 2008. Vol. 361. P. 2499.
3. Carranza J., Sletten J., Lloret F., Julve M. // *Polyhedron.* 2009. Vol. 28. P. 2249.
4. Yue S.-M., Xu H.-B., Ma J.-F., Su Z.-M., Kan Y.H., Zhang H.J. // *Polyhedron.* 2006. Vol. 25. P. 635.
5. Tinant B., Decamp C., Robert F., Garcia M. // *Z. Kristallogr. NCS.* 2010. Vol. 225. P. 729.
6. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. // *Gaussian 09, Revision D.01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.
7. Foresman J.B., Frisch A.E. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, 3rd ed., Gaussian, Inc. Wallingford, CT, 2015.
8. Chemcraft - graphical software for visualization of quantum chemistry computations. <https://www.chemcraft-prog.com>.
9. Кочиков И.В., Курамшина Г.М., Пентин Ю.А., Ягола А.Г. // Доклады Академии наук. 1985. Т. 283 (4). С. 850.
10. Kuramshina G.M., Weinhold F.A., Kochikov I.V., Pentin Yu A., Yagola A.G. // *J. Chem. Phys.* 1994. Vol. 100. P. 1414.
11. Кочиков И.В., Курамшина Г.М., Пентин Ю.А., Ягола А.Г. *Обратные задачи колебательной спектроскопии*. Курс. М., 2017.

#### Информация об авторах

Владимир Маркович Сенявин – доцент кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, канд. хим. наук ([senyavin@phys.chem.msu.ru](mailto:senyavin@phys.chem.msu.ru));

Гульнара Маратовна Курамшина – вед. науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, докт. хим. наук ([kuramshi@phys.chem.msu.ru](mailto:kuramshi@phys.chem.msu.ru)).

#### Вклад авторов

Авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

#### Соблюдение этических стандартов

В данной работе отсутствуют исследования человека и животных.

Статья поступила в редакцию 23.01.2024;  
одобрена после рецензирования 21.02.2024;  
принята к публикации 12.09.2024