

КР-спектральное исследование температурной неустойчивости водородных связей в молекулярных кристаллах

Борис Алексеевич Колесов

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, 630090, Россия (E-mail: kolesov@niic.nsc.ru)

В работе проводится исследование состояния водородных связей в молекулярных кристаллах соединений, относящихся к аминокислотам и/или лекарственным препаратам, в интервале температур 5-300 К. Излагаются причины температурной неустойчивости водородных связей и методические особенности применения спектроскопии КР для их регистрации. Приводятся примеры нормальных и аномальных зависимостей от температуры частот, полуширин и интегральных интенсивностей внутри- и межмолекулярных колебаний. Подробно анализируются причины сильных температурных особенностей в спектрах кристаллов аланина, парацетамола и в ряду соединений, содержащих ацетамидную группу (ацетонилд, ацетотолуидин, метацетин, фенацетин, парацетамол). Обсуждается возможность регистрации в спектрах явления самолокализации колебаний (self-trapping).