

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ  
ФЕНИЛЗАМЕЩЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ  
КЛАССА  $C_6H_5X$  ( $X = C\equiv P, N\equiv C, C\equiv CH, C\equiv N$ )**

*М.Д. Элькин, Е.Ю. Степанович, А.С. Кладиева*

*На основании модельных неэмпирических расчетов геометрической и электронной структуры дана интерпретация колебательных состояний ИК- и КР-спектров фенилметилидинфосфина, фенилизоцианида, этинилбензола, бензонитрила.*

**Ключевые слова:** колебательные спектры фенилметилидинфосфина, фенилизоцианида, этинилбензола, бензонитрила, DFT-методы, адиабатический потенциал, ангармоничность.

**Key words:** vibrational spectra of phenylmethyldynophosphine, phenylisocyanide, ethynylbenzene, benzonitrile, DFT-methods, adiabatic potential, anharmonicity.

Особенностью монозамещенных фенола – фенилметилидинфосфина ( $C_6H_5C\equiv P$ ), фенилизоцианида ( $C_6H_5N\equiv C$ ), этинилбензола  $C_6H_5C\equiv CH$ , бензонитрила ( $C_6H_5C\equiv N$ ) – является наличие в линейной геометрической структуре замещенного фрагмента тройной связи (см. рис.). Принято считать, что колебательные состояния монозамещенных бензола (фенола) обладают общей закономерностью. Их можно разделить на две части. Первая касается колебаний шестичленного цикла, вторая связана с особенностями заместителя.

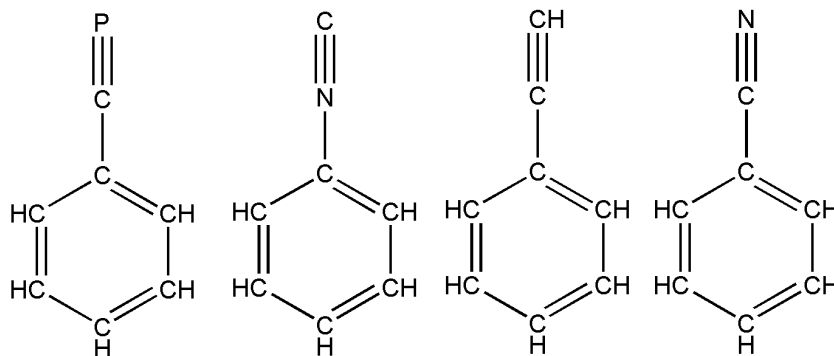


Рис. Структура молекул фенилметилидинфосфина ( $C_6H_5C\equiv P$ ), фенилизоцианида ( $C_6H_5N\equiv C$ ), этинилбензола  $C_6H_5C\equiv CH$ , бензонитрила ( $C_6H_5C\equiv N$ )

В известной монографии [8] указанную закономерность можно проследить на моногалогензамещенных бензола, в том числе толуоле. В работе [14] эта закономерность получила количественную оценку на основании статистического анализа экспериментальных данных по колебательным спектрам большого числа монозамещенных бензола. Были указаны диапазоны изменения частот тех колебаний базовой молекулы – бензола, которые подвергнуты изменению при монозамещении и могут служить признаком спектральной идентификации соединений. В работе [3] на основании анализа гармонических силовых постоянных различных монозамещенных бензола сделан вывод о локальном изменении значений силовых постоянных и предложена схема учета влияния заместителя на силовое поле ароматического кольца. Обоснованность высказанного

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

предположения подтверждена массовыми расчетами колебательных состояний монозамещенных шестичленных ароматических соединений, результаты которых представлены в диссертациях [2, 11]. Использовалась классическая схема анализа квадратичных параметров адиабатического потенциала, связанная с переносом силового поля бензола в шестичленные ароматические азациклические соединения и его последующего уточнения по методу самосогласования [1] с набором экспериментальных данных для всего изотопического ряда исследуемых молекул.

С появлением неэмпирических квантовых методов анализа параметров адиабатического потенциала появилась возможность устранить имеющиеся разногласия в интерпретации колебательных состояний ряда монозамещенных шестичленных циклических соединений, дать количественную оценку гармоническим силовым постоянным. В качестве примера сошлемся на монографию [7]. Однако ограничение гармоническим приближением теории молекулярных колебаний стало обременительным фактором, поскольку расхождение с экспериментом может многократно превосходить критерии достоверности предсказательных расчетов колебательных состояний, предложенных, к примеру, авторами работы [9].

Использование метода спектроскопических масс [8] или процедуры масштабирования [4] для учета влияния ангармонизма колебаний имеет свои ограничения, рассмотренные нами в работах [6, 12]. К тому же получаемые на этом пути гармонические параметры адиабатического потенциала являются усредненными. Их сравнение с аналогичными данными, полученными для родственных соединений, может носить только качественный характер. Эти аргументы указывают на необходимость проведения численного эксперимента по анализу колебательных состояний многоатомных молекул в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний, используя для оценки параметров адиабатического потенциала неэмпирические квантовые методы расчета электронной структуры соединений. Такие возможности на сегодня реальны. Достаточно сослаться на технологию Gaussian – 3 [13]. Именно с помощью указанной технологии были построены структурно-динамические модели бензофенона и его галоидозамещенных [10], для которых имеются подробные экспериментальные данные по спектрам инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния.

Для фенилметилидинфосфина, фенилизоцианида, бензонитрила, этинилбензола в нашем распоряжении имеется эксперимент по ИК-спектрам соединений в конденсированном состоянии [15]. Теоретическая интерпретация спектра фундаментальных колебаний указанных соединений и их дейтерозамещенных аналогов, предложенная в работе [15] на основе классического подхода [8], использует оценки частотных диапазонов монозамещенных бензола из работы [14].

Цель данной работы состоит в анализе достоверности предлагаемой для исследуемых соединений интерпретации колебательных состояний на основании расчета геометрии и параметров адиабатического потенциала в рамках квантового метода функционала плотности, в выяснении возможностей этого метода при проведении предсказательных расчетов для построения структурно-динамических моделей замещенных фенола, имеющих линейную структуру.

**Модельные расчеты геометрии и колебательных состояний.** Модельные расчеты осуществлены с учетом поляризационных и диффузионных эффектов атомных базисов (от 6–31 G(d, p) до 6–311+ G(d, p)).

Оптимизация геометрии молекул фенилметилидинфосфина, фенилизоцианида, бензонитрила, этинилбензола позволяет сделать следующие выводы. Расчетные значения длин валентных связей СС фенильного кольца укладываются в диапазон 1,39–1,4 Å, длины связей СН попадают в диапазон 1,08–1,09 Å. Значения валентных углов изменяются в интервале 118,7–120,8°. Влияние базиса сказывается в третьем знаке мантиссы для расчетных значений длин валентных связей и во втором знаке мантиссы для расчетных значений валентных углов. Таким образом, оценку геометрических параметров замещенных фенола можно осуществлять в любом атомном базисе.

Длина связи  $C\equiv P$  фрагмента  $C-C\equiv P$  фенилметилидинфосфина согласно проведенным расчетам лежит в интервале 1,55–1,56 Å (1,54 Å). Длины связей  $C\equiv N$  в бензонитриле и фенилизотианиде, соответственно, 1,16 Å (1,16 Å) и 1,17–1,18 Å. Для этинилбензола расчетное значение длины связи  $C\equiv C$  попадает в интервал 1,2–1,21 Å (1,20 Å). В скобках приведены экспериментальные оценки из работ [8, 15]. Длина связи  $C-Y$  ( $Y = C, N$ ), согласно модельным расчетам укладывается в интервал 1,39–1,43 Å.

Проведенные модельные расчеты предполагали принадлежность всех исследуемых соединений к группе симметрии  $C_{2v}$ . Следовательно, можно проследить характер влияния электродонорных свойств заместителя на гармоническое силовое поле ароматического кольца, выбрав общую систему естественных колебательных координат и координат симметрии для описания молекулярной динамики. Сравнение показало достоверность предположения о локальном характере влияния заместителя на силовое поле ароматического кольца, высказанное в работе [3]. При этом относительное изменение соответствующих силовых постоянных не превышает долей процента для удаленных от места замещения фрагментов. Этим подтверждается правомочность схемы переноса системы гармонических силовых постоянных для фенольного кольца в различные замещенные бензола. Такой подход, получивший название классической схемы предсказательных расчетов колебательных спектров многоатомных молекул, использован в диссертации [11] применительно к шестичленным циклическим соединениям.

Однако выполнение следующего этапа этой схемы – операции уточнения силовых постоянных по экспериментальным данным в ИК- и КР-спектрах дейтерозамещенных аналогов корректно лишь при отсутствии резонансных взаимодействий типа Ферми [5] между фундаментальными и обертовыми состояниями. Поэтому и возникает необходимость квантовых расчетов колебательных состояний многоатомных молекул в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний. Для исследуемых соединений результаты таких модельных расчетов приведены в табл. 1–3. Они позволяют сделать следующие выводы.

1. Весь набор фундаментальных колебаний можно разделить на две части. Первая характерна для монозамещенных фенола и интерпретируется как колебания фенольного фрагмента  $C_6H_5X$  ( $X = C, N$ ). При этом имеет место зависимость частоты трех фундаментальных колебаний связи  $C-X$  (валентного, деформационных – плоского и неплоского) от типа заместителя, а также перепутывание по форме с колебаниями фрагментов  $C\equiv C$ ,  $C\equiv N$ ,  $N\equiv C$ .

2. Предложенная в работе [15] интерпретация частот валентных колебаний связей  $CN$  фенольного кольца отличается более чем на  $100\text{ см}^{-1}$  от таковых в монографиях [7, 8] и диссертации [2, 11]. Это касается и частоты валентного колебания связи  $CN$  фрагмента  $C\equiv C-N$ . Квантовые расчеты дают значение  $\sim 3480\text{ см}^{-1}$  при решении задачи в гармоническом приближении и  $\sim 3350\text{ см}^{-1}$  при учете ангармонизма. В работе [15] авторы на основании классического подхода в теоретической интерпретации молекулярных колебаний предлагают экспериментальную полосу  $\sim 3465\text{ см}^{-1}$ . Неплоское деформационное колебание этой связи оценивается по эксперименту  $\sim 613\text{ см}^{-1}$ , квантовые расчеты дают оценку  $623-638\text{ см}^{-1}$ . Плоское деформационное колебание экспериментально интерпретируется полосой  $649\text{ см}^{-1}$ . Квантовые расчеты дают интервал  $661-670\text{ см}^{-1}$ . Все три полосы имеют заметную интенсивность в ИК-спектре и могут быть использованы для идентификации этинилбензола. Для остальных колебаний фенольного фрагмента квантовые расчеты подтверждают предложенное в работе [8] отнесение фундаментальных частот колебаний.

3. Учет ангармонического смещения фундаментальных частот колебаний, выполненный в рамках адиабатической теории возмущения второго порядка, приводит к лучшему согласию с экспериментом. Влияние ангармонических резонансов между фундаментальными и обертовыми состояниями существенно меньше критерия, предложенного в работе [9] для оценки точности предсказательных расчетов.

Таблица 1

## Интерпретация колебательных спектров фенилметилидинфосфина и этинилбензола

Тип сим	Форма колебаний	Фенилметилидинфосфин										Этинилбензол							
		$\nu_{эксп}$ [3]	Минимум				Максимум				$\nu_{эксп}$ [3]	Минимум				Максимум			
			$\nu_z$	$\nu_{анг}$	ИК	КР	$\nu_z$	$\nu_{анг}$	ИК	КР		$\nu_z$	$\nu_{анг}$	ИК	КР	$\nu_z$	$\nu_{анг}$	ИК	КР
A1	$Q, \beta$	1597	1639	1602	19,8	841	1655	1613	37,4	1458	1601	1639	1599	1,65	138	1657	1616	2,12	165
	$Q_{сх}, x=p,c$	1565	1618	1587	29,1	240	1625	1595	49,5	546	2120	2202	2170	1,67	677	2225	2186	10,4	871
	$\beta$	1462	1497	1468	21,6	19,6	1515	1477	25,6	31,5	1488	1520	1489	14,7	7,00	1533	1498	16,4	7,10
	$\beta$	1176	1202	1183	1,54	17,3	1213	1189	2,17	26,0	1192	1222	1198	0,94	52,9	1230	1205	1,58	60,2
	$Q, \beta$	1069	1119	1096	0,40	25,5	1124	1100	0,63	27,4	1175	1200	1181	0,01	17,4	1204	1187	0,01	22,7
	$Q$	1020	1044	1025	3,40	12,8	1052	1030	5,86	16,0	1028	1048	1029	2,76	9,03	1054	1035	4,78	11,5
	$Q, \gamma$	995	1011	997	0,29	60,5	1013	998	1,13	93,50	998	1014	1001	0,00	46,7	1015	1001	0,06	60,7
	$\gamma, \beta$	708	723	718	5,25	9,93	725	720	5,85	13,9	760	775	767	2,83	9,40	777	770	2,86	11,8
	$\gamma$	386	394	390	0,91	8,80	394	390	0,99	9,81	465	472	468	0,27	5,49	473	469	0,29	5,83
B1	$\rho_{сн}$	987	1001	988	0,04	0,41	1008	989	0,07	1,09	985	1001	986	0,07	0,32	1005	990	0,11	0,39
	$\rho_{сн}$	919	935	921	3,14	0,10	939	922	4,74	3,10	915	932	920	3,25	0,00	936	921	4,55	1,06
	$\rho_{сн}$	757	776	762	39,1	0,00	778	766	57,9	1,89	756	774	765	39,5	0,41	776	765	57,3	2,67
	$\rho_{сн}, \chi$	687	699	691	21,3	0,10	703	693	36,5	1,65	689	703	696	18,6	0,05	706	698	33,1	0,16
	$\chi, \rho_{сс}$	524	543	536	0,89	1,21	548	540	1,68	3,83	530	550	550	4,20	5,03	557	554	20,4	6,88
	$\chi, \rho_{ср}$	339	347	343	1,79	3,45	356	349	4,85	6,47	349	365	363	1,29	5,69	378	365	4,35	9,27
	$\rho_{ср}, \rho_{сс}$	125	116	115	0,34	0,00	120	118	1,18	0,22	162	140	140	0,90	0,10	146	142	1,79	0,16
B2	$Q, \gamma, \beta$	1565	1601	1565	1,31	0,11	1621	1578	1,78	0,69	1573	1609	1574	1,15	1,46	1626	1587	1,64	2,51
	$\beta$	1437	1468	1440	4,52	7,03	1485	1450	5,76	8,68	1447	1472	1445	4,46	3,01	1484	1456	5,56	3,14
	$Q, \beta$	1322	1351	1310	0,61	6,58	1365	1340	1,01	8,75	1330	1352	1313	0,24	3,41	1360	1341	0,30	3,48
	$\beta, \beta_{ссс}$	1279	1308	1278	0,37	0,49	1326	1293	1,18	2,50	1282	1312	1281	0,03	0,38	1327	1299	0,49	0,65
	$\beta$	1157	1184	1169	0,04	9,68	1195	1177	0,10	11,9	1157	1183	1170	0,00	6,10	1188	1177	0,04	6,57
	$\beta, \beta_{ссс}$	1061	1100	1074	4,24	0,04	1110	1080	7,53	0,20	1070	1100	1074	3,52	0,08	1107	1076	5,82	0,24
	$\gamma$	620	633	627	0,09	4,58	634	628	0,13	5,14	613	635	632	0,56	4,03	637	636	11,2	4,42
	$\beta_{ссс}$	501	522	512	5,21	2,50	523	513	8,57	3,33	513	533	530	1,16	4,37	539	533	4,87	4,86
	$\beta_{сср}$	133	129	129	0,21	6,75	130	129	0,87	7,23	162	159	159	0,61	9,29	161	160	1,39	9,79

Таблица 2

## Интерпретация колебательных спектров бензонитрила и фенилцианида

Тип сим	Форма колебаний	Бензонитрил									Фенилцианид								
		$\nu_{эксп}$ [3]	Минимум				Максимум				$\nu_{эксп}$ [3]	Минимум				Максимум			
			$\nu_c$	$\nu_{анг}$	ИК	КР	$\nu_c$	$\nu_{анг}$	ИК	КР		$\nu_c$	$\nu_{анг}$	ИК	КР	$\nu_c$	$\nu_{анг}$	ИК	КР
A1	$Q_{C\equiv N}$	2242	2333	2305	26,4	327	2349	2315	37,5	437	2125	2192	2159	170	430	2207	2170	208	502
	$Q, \gamma$	1602	1641	1602	0,77	76,9	1660	1618	1,04	91,7	1595	1637	1599	5,26	93,3	1658	1613	6,64	109
	$\beta$	1496	1522	1489	8,29	2,27	1541	1508	10,2	2,56	1485	1520	1487	23,5	5,05	1539	1497	27,1	6,38
	$Q_{cc}$	1193	1219	1198	0,21	30,8	1227	1201	0,40	36,4	1185	1217	1194	6,81	40,8	1231	1203	8,03	46,9
	$\beta$	1179	1201	1183	1,01	12,1	1212	1194	1,23	16,0	1163	1190	1172	1,24	15,6	1202	1178	2,01	26,8
	$Q, \beta$	1029	1048	1030	2,42	8,18	1056	1037	4,39	10,2	1026	1046	1031	2,73	7,42	1054	1036	4,79	10,3
	$Q, \gamma$	1002	1016	1003	0,15	29,1	1018	1005	0,40	47,4	998	1017	1003	0,05	27,6	1019	1004	0,27	45,8
	$\gamma, Q$	756	772	758	2,17	7,93	775	759	2,26	11,1	762	783	774	6,13	8,14	787	776	6,69	10,1
$\gamma$	462	466	461	0,00	5,48	467	462	0,00	5,67	469	481	474	0,09	4,85	482	479	0,15	5,24	
B1	$\rho$	990	1008	992	0,03	0,10	1015	995	0,05	0,32	989	995	987	0,09	0,14	1008	991	0,21	0,51
	$\rho$	922	941	928	2,46	0,01	946	929	3,16	3,16	914	927	917	4,79	0,00	934	919	6,39	4,28
	$\rho, \chi$	756	776	765	34,2	0,03	780	766	46,4	1,38	753	773	763	46,6	0,01	778	764	62,7	1,61
	$\rho, \chi$	688	702	695	23,3	0,00	706	695	37,8	0,53	680	699	693	15,9	0,01	703	694	30,4	0,69
	$\rho_{cc}$	542	570	560	13,7	2,15	575	565	18,5	4,02	512	527	521	4,46	1,06	533	523	8,95	2,47
	$\chi$	372	390	385	0,37	1,53	392	385	1,21	3,33	325	336	328	0,08	2,82	341	333	0,20	5,84
	$\rho_{CN}$	141	146	144	1,65	0,27	147	144	2,21	0,96	149	146	143	1,31	0,00	150	146	1,49	0,22
B2	$Q, \gamma$	1588	1614	1576	0,98	2,60	1634	1596	1,23	3,89	1587	1622	1585	3,98	2,52	1641	1596	4,71	3,94
	$\beta$	1451	1475	1449	6,62	1,49	1492	1464	7,90	1,96	1454	1483	1456	2,69	1,76	1500	1466	3,53	2,40
	$\beta$	1333	1355	1318	0,86	1,89	1368	1347	1,29	2,33	1328	1351	1314	0,06	2,11	1365	1340	0,40	2,87
	$Q, \beta$	1287	1321	1290	0,86	0,00	1339	1306	1,78	0,27	1288	1323	1292	0,81	0,01	1340	1310	2,12	0,46
	$\beta$	1162	1187	1173	0,09	4,62	1197	1185	0,22	6,40	1157	1185	1168	0,00	4,78	1195	1178	0,02	6,73
	$\beta$	1070	1104	1078	2,84	0,19	1113	1085	4,67	0,51	1070	1101	1075	5,00	0,32	1110	1077	7,23	0,77
	$\gamma$	615	638	633	0,10	3,47	640	635	0,17	3,58	613	634	627	0,01	4,48	636	628	0,03	4,96
	$\beta_{CC}, \beta_{CN}$	544	559	555	0,14	2,73	570	565	0,21	2,90	478	486	481	1,45	0,88	488	481	1,53	1,06
	$\beta_{CC}, \beta_{CN}$	163	165	163	4,29	3,36	169	169	4,50	3,77	162	158	156	2,42	5,07	160	156	2,61	5,47

# СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Таблица 3

**Интерпретация фундаментальных частот колебаний  
дейтерозамещенных этилбензола, фенилцианида, бензонитрила**

Тип сим	$C_6D_5-C\equiv CH$			$C_6D_5-N\equiv C$			$C_6D_5-C\equiv N$		
	Форма колеб.	$\nu_{эксп}$ [3]	$\nu_{м}$	Форма колеб.	$\nu_{эксп}$ [3]	$\nu_{м}$	Форма колеб.	$\nu_{эксп}$ [3]	$\nu_{м}$
A1	$Q_{C=C}, Q_{CC}$	2122	2146	$Q_{NC}, Q_{CN}$	2123	2129	$q_{CN}$	2220	2271
	$Q, \beta, \gamma$	1568	1569	$Q_{CC}, \gamma, \beta$	1565	1572	$Q, \gamma$	1565	1566
	$\beta, Q$	1379	1367	$\beta, Q$	1368	1388	$\beta$	1370	1369
	$Q_{CC}$	1136	1138	$Q_{CN}, \beta$	1123	1141	$Q_{CC}$	1122	1126
	$\gamma, Q$	956	945	$\gamma, Q$	959	938	$\beta$	957	946
	$\beta, Q$	868	862	$Q, \beta$	863	865	$Q, \beta$	707	703
	$\beta, Q$	839	832	$Q, \beta$	842	824	$Q, \gamma$	871	846
	$\beta, \gamma$	716	709	$\gamma, Q, \beta$	720	717	$\gamma, Q$	837	820
	$\gamma$	454	451	$\gamma$	456	459	$\gamma$	449	445
A2	$\rho$	768	781	$\rho, \chi$	787	778	$\rho$	789	766
	$\rho$	661	647	$\rho$	634	641	$\rho$	656	635
	$\chi$	348	353	$\chi$	–	359	$\chi$	351	343
B1	$\rho, \chi$	825	801	$\rho, \chi, \rho_{NC}$	826	809	$\rho$	822	802
	$\rho, \chi, \rho_{CC}$	768	757	$\rho, \chi, \rho_{NC}$	763	766	$\rho$	768	751
	$\rho, \chi, \rho_{CC}$	639	639	$\rho, \chi, \rho_{NC}$	628	629	$\rho, \chi$	640	627
	$\chi, \rho$	553	484	$\rho, \chi$	550	550	$\rho, \chi$	550	544
	$\rho, \rho_{CC}$	470	445	$\rho_{CN}, \rho$	452	455	$\rho_{CC}$	491	487
	$\rho_{CC}, \rho_{CH}, \chi$	330	335	$\chi, \rho_{NC}$	311	319	$\chi$	351	352
	$\rho_{CC}$	161	131	$\rho_{NC}, \rho_{CN}$	–	141	$\rho_{CN}$	150	136
B2	$Q, \gamma, \gamma$	1554	1525	$Q, \gamma, \beta$	1554	1544	$Q, \gamma$	1557	1534
	$\beta, \gamma$	1323	1313	$\beta, \gamma$	1319	1335	$\beta$	1326	1315
	$Q, \beta$	1274	1279	$Q, \beta$	1283	1295	$\beta$	1284	1281
	$\beta$	1034	1021	$\beta$	1036	1018	$Q, \beta$	1037	1020
	$\beta$	842	837	$\beta$	842	840	$\beta$	837	819
	$\beta$	822	822	$\beta$	817	813	$\beta$	822	796
	$\gamma, \beta_{CCN}$	600	598	$\gamma$	595	594	$\gamma$	599	599
	$\beta_{CCC}, \gamma$	502	507	$\beta_{CCN}$	471	459	$\beta_{CCC}$	531	530
	$\beta_{CC}, \beta_{CCN}$	161	151	$\beta_{CNC}$	160	150	$\gamma_{CCN}$	162	154

*Примечание.* Частоты колебаний в  $см^{-1}$ , Интенсивность в ИК-спектрах в  $км/Моль$ , интенсивность в КР-спектрах в  $\text{Å}^4/а.е.м.$

4. Неактивные в ИК- и КР-спектрах неплоские деформационные колебания типа симметрии A2 при монозамещении являются характеристичными по частоте. Для спектральной идентификации эти колебания интереса не представляют, поэтому в таблицах 1, 2 мы их не приводим.

5. Сопоставление колебательных спектров дейтерозамещенных фенилизоцианида, этилбензола, бензонитрила между собой и с имеющимся экспериментом из работы свидетельствует о достоверности квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала исследуемых соединений.

Результаты модельных расчетов геометрической структуры и параметров адиабатического потенциала различных монозамещенных фенола, их сопоставление с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам соединений дают основание утверждать, что применение квантовых методов функционала плотности позволяет осуществ-

лять предсказательные расчеты колебательных состояний указанного класса соединений и построение их структурно-динамических моделей.

#### Библиографический список

1. *Березин, В. И.* О методе решения обратной колебательной задачи для многоатомных молекул / В. И. Березин, М. Д. Элькин // Журнал прикладной спектроскопии. – 1975. – Т. 22, № 3. – С. 358–359.
2. *Березин, В. И.* Прямые и обратные задачи спектроскопии циклических и комплексных соединений : дис. ... д-ра физ.-мат. наук / В. И. Березин. – Саратов, 1983. – 336 с.
3. *Березин, В. И.* Учет влияния замещения на силовое поле ароматического кольца / В. И. Березин, М. Д. Элькин // Оптика и спектроскопия. – 1974. – Т. 37, вып.2. – С. 237–240.
4. *Краснощеков, С. В.* Масштабирующие множители как эффективные параметры для коррекции неэмпирического силового поля / С. В. Краснощеков, Н. Ф. Степанов // Журнал физической химии. – 2007. – Т. 81, № 4. – С. 680–689.
5. *Лисица, М. П.* Резонанс Ферми / М. П. Лисица, А. М. Яремко. – Киев : Наукова думка. – 1984. – 250 с.
6. *Моделирование* адиабатических потенциалов карбоновых / М. Д. Элькин // Вестник СГТУ. – 2009. – № 1 (37). – С. 109–114.
7. *Пулин, В. Ф.* Исследование динамики молекулярных соединений различных классов / В. Ф. Пулин, М. Д. Элькин, В. И. Березин. – Саратов : Изд-во СГТУ. – 2002. – 512 с.
8. *Свердлов, Л. М.* Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970. – 560 с.
9. *Фрагментарные* методы расчета ИК спектров фосфорорганических соединений / Б. Ф. Мясоедов [и др.] // Журнал структурной химии. – 2006. – Т. 47, № 1. – С. 449–456.
10. *Элькин, М. Д.* Колебательные спектры конформеров бензофенона / М. Д. Элькин, Е. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 3. – С. 565–568.
11. *Элькин, М. Д.* Характеристические колебания замещенных пиридина : дис. ... канд. физ.-мат. наук / М. Д. Элькин. – Саратов, 1973. – 156 с.
12. *Элькин, П. М.* Информационная технология «Gaussian» и структурно-динамические модели серосодержащих соединений / П. М. Элькин, Е. А. Эрман, А. Б. Осин // Вестник СГТУ. – 2009. – № 2 (39), вып. 2. – С. 114–120.
13. *Gaussian 03*, Revision B.03 / M. J. Frisch [et al.]. – Pittsburg PA: Gaussian Inc., 2003.
14. *Green, J. H. S.* Vibrational spectra of monosubstituted benzenes / J. H. S. Green, D. J. Harrison // Spectrochimica Acta. – 1970. – Vol. 26 A, № 8. – P. 1925–1948.
15. *Ohno, K.* Normal coordinate of phenylmethylidynephosphine C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>C≡P and its related compounds / K. Ohno, H. Matsuura // J. Mol. Struct. – 1991. – Vol. 242. – P. 303–314.