

Рис. 4. Имитационные оценки тренда и дисперсии X

В целях использования имитационных моделей в ходе параметрической оптимизации предлагается создавать имитационную модель, совмещающую процесс поисковой оптимизации и имитации. Такая модель в дальнейшем называется *управляемой имитационной моделью*, а ее выходной процесс – *управляемым имитационным процессом*. Выполнено формализованное описание управляемой имитационной модели, выделены *основной процесс* в пространстве выходных состояний и *процесс управления* в пространстве управляемых параметров, а также описан алгоритм их взаимодействия. Предложен алгоритм управления градиентного типа, относящийся к классу алгоритмов стохастической аппроксимации, определены схемы его реализации и основные параметры. Показано, что все предпосылки реализации предложенного алгоритма выполняются.

УДК 539.193/.194; 535/.33/34

**МОДЕЛИРОВАНИЕ АДИАБАТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ
ПОЛИХЛОРИРОВАННЫХ ДИБЕНЗОЦИКЛОВ.
ОКТОХЛОРДИБЕНЗОФУРАН, ОКТОХЛОРДИБЕНЗОТИОФЕН**

Элькин Михаил Давыдович, доктор физико-математических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru.

Смирнов Александр Петрович, старший преподаватель, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20 а, e-mail: apsmir@yandex.ru.

Джалмухамбетова Елена Азатуллаевна, кандидат физико-математических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: alenna@list.ru.

Гайсина Альфия Рафаиловна, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: gaisinaalfiya@mail.ru.

Алыкова Ольга Михайловна, кандидат педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Статья посвящена построению структурно-динамических моделей полихлорзамещенных дибензогетероциклических соединений. Для октохлордифензофурана и октохлордифензотиофена определены геометрические параметры молекул, такие как длины валентных связей и величины углов между ними. Описана методика оценки ангармонического смещения полос в колебательных спектрах полициклических соединений на основании результатов неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала – кубических и квартичных силовых постоянных. Получены частоты колебательных состояний и величины их интегральных интенсивностей. Моделирование геометрии молекул и ангармонических колебательных состояний осуществлялось в предположении плоской конфигурации соединений. Расчет проводился квантовым методом функционала плотности DFT/B3LYP/6-311G**. Проведена полная интерпретация фундаментальных колебательных состояний исследуемых соединений. Учет поляризационных и диффузионных эффектов атомного базиса не сказывается и на интерпретации колебательных состояний. Анализ параметров адиабатического потенциала позволяет сделать вывод, что ангармоническое смещение можно оценить с помощью процедуры масштабирования. Сопоставление результатов моделирования исследуемых дибензоциклов с имеющимся экспериментальными данными по колебательным спектрам исследуемых соединений позволяет сделать вывод о достоверности предсказательных квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала для полихлорированных дибензоциклов и о возможности их спектральной идентификации.

Ключевые слова: колебательные спектры, молекулярные спектры, ИК-спектры, адиабатический потенциал, силовые постоянные, полихлорзамещенные дибензоциклы, октохлордифензофуран, октохлордифензотиофен, дибензофуран, дибензотиофен.

MODELLING OF ADIABATIC POTENTIAL OF POLYCHLORINATED DIBENZOCYCLES. OCTOCHLORDIBENZOFURAN, OCTOCHLORDIBENZOTHIOPHENE

Elkin Mihail D., Professor, D.Sc. in Physics, Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: elkinmd@mail.ru.

Smirnov Alexander P., Senior Lecturer, Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: apsmir@yandex.ru.

Dzhalmukhambetova Elena A., Ph.D., Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: alenna@list.ru.

Gaisina Alfiya R., Lecturer, Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: gaisinaalfiya@mail.ru.

Alykova Olga M., Ph.D., Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: kof@aspu.ru.

This work is devoted to the construction of structural-dynamic models of polychlorosubstituted dibenzoheterocycled compounds. The geometric parameters of molecules are defined for octochlordibenzofuran and octochlordibenzothiophene, such as a valence bond lengths and angles between them. A method is described for evaluation of the anharmonic shift of bands in vibrational spectra of polycyclic compounds based on the results of *ab initio* quantum calculations for the adiabatic potential – cubic and quartic force constants. The frequencies of the vibrational spectra and their integrated intensities are obtained. Modeling of molecular geometry and anharmonic vibrational spectra was carried out under the suggestion of planar configuration of the compounds. The calculation was performed by density functional quantum method DFT/B3LYP/6-311G **. A complete interpretation of the fundamental vibrational states of the compounds is carried out. Accounting for polarization and diffusion effects of the atomic basis does not impact

the interpretation of vibrational spectra. Analysis of the adiabatic potential parameters suggests that the anharmonic shift can be measured by scale-up procedures. A modeling results of the studied dibenzocycles were compared with the available experimental data on vibrational spectra of the investigated compounds. It can be concluded that predictive quantum calculations for the adiabatic potential of polychlorinated dibenzocycles is reliable and gives the possibility of their spectral identification.

Keywords: *vibrational spectra, molecular spectra, IR spectra, adiabatic potential, force constants, polychlorinated dibenzocycles, octochlordibenzofuran, octochlordibenzothiophene, dibenzofuran, dibenzothiophene.*

Полихлорированные дибензоциклы (дибензо-*n*-диоксины, дибензофуран, дибензотиофен) являются промышленными отходами хлорорганического синтеза и известными экотоксикантами, действующими на генетическом уровне. Интерпретация колебательных состояний дибензо-*n*-диоксина, дибензофурана, дибензотиофена (рис.) на основании неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала была предметом публикаций [1, 4]. Модельные расчеты геометрической структуры и фундаментальных частот колебаний, их сопоставление с имеющимися экспериментальными данными в ИК- и КР-спектрах позволили сделать вывод, что в задачах спектральной идентификации указанных соединений надежной предсказательной способностью обладает метод функционала плотности DFT/B3LYP [6]. При этом выбор базиса расчета не имеет принципиального значения, влиянием ангармонических резонансов можно пренебречь, ангармоническое смещение фундаментальных состояний, полученное в рамках теории возмущения второго порядка, хорошо согласуется с результатами операции масштабирования.

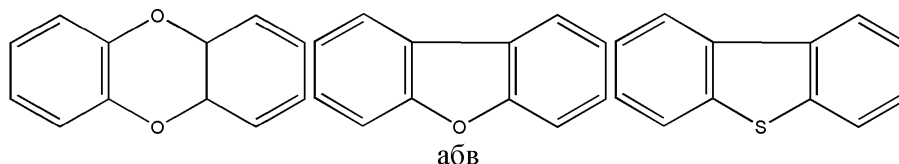


Рис. Структурные формулы: а) дибензо-*n*-диоксин; б) дибензофуран; в) дибензотиофен

Представленные в периодической литературе экспериментальные данные по колебательным состояниям полихлорированных дибензоциклов ограничены и касаются отдельных спектральных диапазонов. Модельные расчеты структуры и спектров для указанных молекул имеют предсказательный характер. Для полихлорзамещенных дибензо-*n*-диоксина такие расчеты, связанные с построением структурно-динамических моделей соединений, предложены в публикации [5]. Хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных дает основание распространить апробированную методику на полихлорированные дибензофуран и дибензотиофен.

Цель данной работы – построение структурно-динамических моделей октохлорзамещенных дибензофурана и дибензотиофена, выявление полос спектральной идентификации соединений.

Модельные расчеты геометрической структуры и колебательных состояний. Ограничимся следующим модельным квантовым уравнением для описания молекулярных колебаний:

$$2H^{(v)} = v_s (P_s^2 + (Q^s)^2) + F_{srt} Q^s Q^r Q^t / 3 + F_{srtu} Q^s Q^r Q^t Q^u / 12, \quad (1)$$

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Решение уравнения (1) методами теории возмущения позволяет получить выражение для энергий колебательных состояний:

$$E^V = \nu_s (V_s + 1/2) + \chi_{sr} (V_s + 1/2)(V_r + 1/2), \quad (2)$$

где ν_s – частоты гармонических колебаний, см^{-1} ; Q^s – безразмерные нормальные колебательные координаты, линейно связанные с декартовыми смещениями атомов; F_{srt} и F_{srtu} – кубические и квартичные силовые постоянные, V_s – квантовые числа рассматриваемого колебательного состояния. Алгоритмы вычисления ангармонических силовых постоянных в произвольной системе колебательных координат представлены в работах [2, 4].

Сдвиг фундаментальных полос колебаний определяется ангармоническими поправками: $X_{ss} = 2\chi_{ss}$ и $X_s = \chi_{sr} / 2$.

Интерпретация ангармонических колебательных состояний осуществлялась в предположении плоской конфигурации соединений (симметрии D_{2h} для дибензо-*p*-диоксина, C_{2v} для дибензофурана и дибензотиофена).

При построении структурно-динамических моделей предпочтение было отдано квантовому методу DFT/B3LYP/6-311G**. Для качественной оценки ангармонического смещения состояний использовалось масштабирующее соотношение $\nu_{\text{анг}} = (0,9813 - 8,35 \cdot 10^{-6} \cdot \nu_r) \cdot \nu_r$, апробированное в работах [1, 5]. Результаты оптимизации геометрии октохлордибензо-*p*-диоксина приведены в работе [5]. Для октохлорзамещенных дибензофурана и дибензотиофена соответственно получены следующие оценки длин валентных связей и валентных углов.

Для октохлордибензофурана: $R_{\text{CO}} = 1,36 \text{ \AA}$, $R_{\text{CC}} = 1,39\text{--}1,41 \text{ \AA}$, $R_{\text{CCl}} = 1,73 \text{ \AA}$, $A_{(2,1,8)} = 106,3^\circ$, $A_{(1,2,3)} = 112,6^\circ$, $A_{(3,2,7)} = 125,6^\circ$, $A_{(2,3,9)} = 104,2^\circ$, $A_{(4,3,9)} = 139,7^\circ$, $A_{(2,3,4)} = 116,1^\circ$.
Для октохлордибензотиофена: $R_{\text{CS}} = 1,74 \text{ \AA}$, $R_{\text{CC}} = 1,38\text{--}1,42 \text{ \AA}$, $R_{\text{CCl}} = 1,73\text{--}1,74 \text{ \AA}$, $A_{(2,1,8)} = 89,9^\circ$, $A_{(1,2,3)} = 115,5^\circ$, $A_{(3,2,7)} = 124,8^\circ$, $A_{(2,3,9)} = 109,6^\circ$, $A_{(4,3,9)} = 136,3^\circ$, $A_{(2,3,4)} = 114,1^\circ$, $A_{(5,4,17)} = 114,3^\circ$.

Остальные валентные углы шестичленных фрагментов отличаются от соответствующих углов в бензоле не более чем $3,8^\circ$. Отметим, что выбор базиса расчета на оценку геометрических параметров фенильных колец в дибензоциклах и их полихлорированных аналогах принципиального значения не имеет. Учет поляризационных и диффузионных эффектов атомного базиса не сказывается и на интерпретации колебательных состояний. Для этого достаточно сравнить результаты, приведенные в работе [1] с аналогичными данными из таблицы 1.

Анализ параметров адиабатического потенциала позволяет сделать вывод, что ангармоническое смещение можно оценить с помощью процедуры масштабирования. Для диапазона $1650\text{--}1000 \text{ см}^{-1}$ указанная операция может занижать расчетные значения на величину порядка $\sim 20 \text{ см}^{-1}$. Такой сдвиг не существенен для решения задач спектральной идентификации дибензоциклов и их полихлорированных соединений.

Результаты моделирования колебательных состояний исследуемых октохлорзамещенных дибензоциклов представлены в таблице 2. Поскольку практическая направленность данной публикации связана с спектральной идентификацией полихлорированных диоксинов, то в таблицах исключены полосы в ИК- и КР-спектрах, интенсивность которых оценивается как очень слабая.

Для октохлордибензо-*p*-диоксина полная интерпретация фундаментальных колебаний представлена в публикации [5]. Принадлежность соединения к группе симметрии D_{2h} , проявляется в выполнении правила альтернативного запрета для колебательных спектров. Принадлежность октохлорзамещенных дибензофурана и дибензотиофена к группе симметрии C_{2v} нарушает данное правило. Тем не менее сильные по интенсивности полосы в КР-спектрах соответствуют симметричным плоским колебаниям бензольных циклов, в ИК-спектрах – антисимметричным колебаниям.

Таблица 1

Интерпретация колебательных состояний дибензофурана

Форма	$\nu_{\text{эсп}}$	$\nu_{\text{Г}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	Форма	$\nu_{\text{эсп}}$	$\nu_{\text{Г}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
Тип симметрии A1						Тип симметрии B1					
Q, β	1634	1671	1630	0,13	441	ρ	747	767	748	105	0,03
Q	1599	1631	1610	0,39	7,59	ρ	722	738	720	39,4	0,00
B	1489	1521	1493	0,06	44,7	Тип симметрии B2					
B	1447	1471	1447	37,0	27,7	Q, β	1599	1640	1587	8,86	3,37
Q _{со} ,Q	1350	1384	1362	3,95	34,8	β	1471	1503	1456	29,3	9,04
β ,Q	1310	1334	1324	1,97	111	β	1451	1484	1438	37,3	0,04
B	1245	1265	1248	10,9	169	Q _{со} ,Q	1324	1357	1316	12,9	4,05
B	1204	1218	1204	0,48	9,04	β	1285	1308	1269	8,50	2,85
β ,Q _{со} ,Q	1139	1171	1148	3,52	23,4	β	1193	1215	1180	150	5,78
Г	1102	1123	1091	8,09	12,6	Q _{со} ,Q	1116	1133	1101	14,5	3,81
Q, β	1009	1033	1005	0,28	52,7	Q, β	1022	1042	1013	10,8	0,07
γ _о ,Q _{со}	840	865	842	7,80	23,3	Q _{со} , γ	849	862	839	24,27	1,01
Г	738	759	740	0,01	29,9	γ	616	630	615	6,00	0,00
β _{со} , γ	422	431	422	1,70	8,76	γ ,Q	554	569	556	3,09	9,02

Примечание: в таблицах интенсивности полос в ИК-спектрах приведены в км/моль, в КР-спектрах – в Å⁴/а.е.м.

Таблица 2

Интерпретация колебательных состояний октохлордибензофурана

Форма	$\nu_{\text{Г}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	Форма	$\nu_{\text{Г}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
Тип симметрии A1					Тип симметрии B2				
Q, γ	1633	1580	0,78	1123	Q, γ	1593	1542	60,1	2,97
Q, γ	1558	1509	5,60	52,1	Q, γ	1549	1500	5,17	5,72
Q, γ	1424	1380	120	66,4	Q, γ	1419	1375	20,4	7,64
Q _{со} ,Q, γ	1377	1335	108	464	Q, γ	1351	1311	313	0,01
Q	1300	1261	12,9	77,4	Q	1290	1252	64,4	10,5
Q	1261	1224	20,4	403	γ	1108	1077	111	0,24
γ ,Q	1189	1155	84,1	202	γ ,Q _{со} Cl	1008	980	90,1	0,46
Q _{со} Cl, γ	985	959	3,80	14,8	γ ,Q _{со} Cl	844	823	40,1	0,00
γ ,Q _{со} Cl	948	923	0,00	48,2	γ ,Q _{со} Cl	783	763	10,3	0,05
γ _о ,Q _{со} Cl	821	800	109	5,54	γ	720	702	3,13	0,25
Q _{со} Cl	734	716	2,69	11,4	γ ,Q _{со} Cl	581	567	25,5	0,16
β Cl	659	643	45,2	1,55	Q _{со} Cl	474	463	21,1	0,32
Q _{со} Cl	350	343	0,14	29,6	Q _{со} Cl	351	343	0,31	6,54
β Cl	273	267	0,03	2,25	β Cl	176	173	0,04	6,27
β Cl	261	255	0,30	2,73					
β Cl	176	172	0,03	2,57					

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Таблица 3

Интерпретация колебательных состояний дибензотиофена											
Форма	$\nu_{\text{эксп}}$	$\nu_{\text{Г}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	Форма	$\nu_{\text{эксп}}$	$\nu_{\text{Г}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
Тип симметрии A1						Тип симметрии B2					
Q, β	1601	1635	1601	2,26	307	Q, β	1619	1627	1594	4,20	19,1
Q	1558	1594	1563	0,18	88,7	Q,Q', β	1568	1602	1571	2,22	13,9
B	1480	1504	1457	0,09	86,8	β	1480	1490	1463	19,1	2,53
B	1421	1453	1429	26,5	5,47	β	1433	1474	1429	9,79	0,65
Q',Q	1337	1344	1304	5,10	0,71	Q',Q	1314	1343	1303	8,95	10,3
β ,Q	1320	1337	1317	0,34	212	β	1270	1292	1254	0,71	6,37
B	1202	1248	1212	18,1	68,6	β	1155	1186	1152	2,70	7,10
β ,Q',Q	1134	1147	1115	0,80	69,6	Q',Q	1074	1085	1055	11,4	1,78
Г	1063	1082	1052	10,4	18,1	Q, β	1028	1046	1017	22,4	0,61
Q, β		1047	1018	3,40	93,9	β	1433	1474	1429	9,79	0,65
Г	711	715	697	1,21	25,5	β	1270	1292	1254	0,71	6,37
Г'	494	498	486	0,23	5,46	β	1155	1186	1152	2,70	7,10
β' , γ	410	410	401	2,82	14,1	Q', γ	704	711	693	6,63	5,91
Тип симметрии B1						γ ,Q	499	505	494	1,27	5,01
P	744	753	734	144	0,20						
χ	425	427	417	6,82	0,01						

Следует отметить, что плоские деформационные колебания β_{Cl} связей C–Cl располагаются в диапазоне ниже 300 см^{-1} . Их интенсивность в ИК-спектрах оценивается как слабая, однако данная область идентифицирует наличие указанных молекулярных фрагментов. В спектрах КР полосы данных колебаний практической ценности не имеют, ввиду очень слабой интенсивности. Неплоские колебания молекулярных фрагментов октохлорзамещенных дибензоциклов практически не проявляются.

Таблица 4

Интерпретация колебательных состояний октохлордобензотиофена									
Форма	$\nu_{\text{Г}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	Форма	$\nu_{\text{Г}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
Тип симметрии A1					Тип симметрии B2				
Q, γ	1562	1512	1,59	866	Q, γ	1561	1512	43,1	18,9
Q, β_{Cl}	1516	1468	14,5	125	Q, γ	1519	1471	0,08	20,1
Q, β_{Cl} , γ	1386	1344	99,9	127	γ ,Q	1372	1330	31,7	0,26
Q, β_{Cl}	1297	1258	184	31,1	Q, γ	1333	1293	226	0,65
Q	1264	1227	1,56	24,4	Q	1268	1231	29,3	16,9
Q	1211	1176	6,92	856	Q,Q _{CCl}	1167	1134	32,3	3,05
γ	1139	1107	64,9	1,52	γ , β_{Cl}	1071	1042	12,1	0,04
Q _{CCl} , γ	928	904	4,38	23,1	Q _{CS}	876	853	3,71	1,65
Q _{SO} , γ	890	867	21,7	4,68	QCCL, γ	827	806	42,5	0,37
Q _{CCl}	704	687	7,06	16,9	QCCL, γ	743	724	12,3	1,84
Q _{CCl} , γ	684	667	85,5	4,49	QCL, γ	549	536	46,6	0,01
Q _{CCl}	404	395	2,69	8,24	QCCI	398	389	9,65	0,04
β_{Cl}	295	289	0,01	4,19	QCCI	344	337	0,45	4,36
β_{Cl} , γ	262	256	0,45	3,82	QCCI	329	322	0,03	3,59
β_{Cl}	184	181	0,01	3,59	β_{Cl}	169	165	0,31	4,38

Замена атома кислорода в молекуле дибензофурана на атом серы приводит к молекуле дибензотиофурана. Это проявляется в смещении полос фундаментальных колебаний в низкочастотную область спектра (табл. 3), что можно использовать в задачах спектральной идентификации соединений. Данный факт имеет место для полос, интерпретированных как валентные колебания связей шестичленных циклов и валентных колебаний связей C–S. Имеет место и существенное изменение интенсивностей полос в соответствующих ИК и КР спектральных диапазонах.

Сопоставление результатов моделирования исследуемых дибензоциклов с имеющимся экспериментальными данными по колебательным спектрам соединений позволяют сделать вывод о достоверности предсказательных квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала для полихлорированных дибензоциклов и о возможности их спектральной идентификации.

Список литературы

1. Джалмухамбетова Е. А. Структурно-динамические модели и колебательные спектры дибензогетероциклов / Е. А. Джалмухамбетова, Л. М. Элькин // Вестник СГТУ. – 2007. – № 2 (2). – С. 7–12.
2. Элькин М. Д. Кинематическая и электрооптическая ангармоничность в теории интенсивностей ИК- и КР-спектров многоатомных молекул / М. Д. Элькин, В. И. Березин // Журнал прикладной спектроскопии. – 1995. – Т. 62. – С. 49–57.
3. Элькин П. М. Метрические соотношения для естественных колебательных координат в задачах обертоновой спектроскопии / П. М. Элькин, В. Ф. Пулин, В. И. Березин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2005. – Т. 72, № 5. – С. 694–696.
4. Элькин М. Д. О методе вычисления коэффициентов связи между точными и приближенными естественными колебательными координатами / М. Д. Элькин, А. Ф. Попов, Л. М. Свердлов // Оптика и спектроскопия. – 1981. – Т. 51, № 2. – С. 358–361.
5. Элькин П. М. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний полихлорзамещенных дибензо-*n*-диоксинов / П. М. Элькин, М. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 1. – С. 21–24.
6. Gaussian 03. Revision B.03 / M. J. Frisch [et al.]. – Pittsburgh : Gaussian Inc., 2003.

References

1. Dzhalmukhambetova E. A. Stukturno-dinamicheskie modeli i kolebatelnie spectri dibenzogeterotsiklov / E. A. Dzhalmukhambetova, L. M. Elkin // Vestnik SSTU. – 2007. – № 2 (2). – P. 7–12.
2. Elkin M. D. Kinematicheskaya i electroopticheskaya anharmonichnost v teorii intensitey IR and Raman spectra mnogoatomnih molecul / M. D. Elkin, V. I. Berezin // Journal Prikladnoi Spectroscopii. – 1995. – T. 62. – P. 49–57.
3. Elkin P. M. Metricheskie sootnosheniya dlya estestvennih kolebatelnih koordinat v zadachah obertonnoi spectroscopii / P. M. Elkin, V. F. Pulin, V. I. Berezin // Journal Prikladnoi Spectroscopii. – 2005. – T. 72, № 5. – P. 694–696.
4. Elkin M. D. O metode vichisleniya coefficientov svyazi mezhdou tochnimi i priblizhennimi estestvennimi kolebatelnimi koordinatami / M. D. Elkin, A. F. Popov, L. M. Sverdlov // Optica i Spectroscopiya. – 1981. – T. 51, № 2. – P. 358–361.
5. Elkin P. M. Sturno-dinamicheskie modeli i anharmonicheski analys kolebatelnih sostoyanei polihlorzameschennyh dibenzo-*n*-dioxinov / P. M. Elkin, M. A. Erman, O. V. Pulin // Journal Prikladnoi Spectroscopii. – 2007. – T. 74, № 1. – P. 21–24.
6. Gaussian 03. Revision B.03. / M. J. Frisch [et al.]. – Pittsburgh : Gaussian Inc., 2003.