

izmeritelnaya tekhnika [Information and Measuring Equipment]. Penza, Penza State University Publ., 2000, vol. 25, pp. 48–54.

7. Mizin I. A., Matveev A. A. Tsifrovye filtry [Digital filters]. Moscow, Radio i svyaz, 1979. 386 p.

8. Tadeusevich Ryshard, Borovik Barbara, Gonchazh Tomash Lepper, Bartosh. *Elementarnoe vvedenie v tekhnologiyu neyronnykh setey s primerami programm* [Elementary introduction to the technology of neural networks with the examples of programs], transl. from Polish I. D. Rudinsky. Moscow, Goryachaya liniya – Telekom, 2011. 408 p.

9. Savochkin A. Ye. Primenenie neyrosetevogo podkhoda pri proektirovani informatsionno-izmeritelnykh sistem dlya opredeleniya stepeni povrezhdeniya tekhnicheskikh slozhnykh obektov [The use of neural network approach in the design of information and measurement systems for the determination of the extent of damage of technically complex objects]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2013, no. 2 (22), pp. 151–159.

10. Allinson N. M., Kolcz A.R. *Mathematics of Neural Networks: Models, Algorithms and Applications*. Softcover reprint of the original. 1st ed., 1997. 403 p.

11. Brian J. Taylor. *Methods and Procedures for the Verification and Validation of Artificial Neural Networks*. Springer, 2005. 280 p.

12. Battiti R. First and second order methods for learning: Between steepest descent and Newton's method. *Neural Computation*, 1992, vol. 4, no. 2, pp. 141–166.

13. Melanie Mitchell. *An Introduction to Genetic Algorithms*. Massachusetts, Institute of Technology, 1998. 280 p.

14. Riedmiller M., Braun H. A direct adaptive method for faster backpropagation learning: The PROP algorithm. *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks*. 1993.

УДК 539.193/.194;535/33.34

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ 6-МЕТИЛУРАЦИЛА В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

Статья поступила в редакцию 07.10.2013, в окончательном варианте 12.10.2013.

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

Лихтер Анатолий Михайлович, доктор технических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru

Кочергина Динара Даутовна, аспирант, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: d_kochergina@mail.ru

Шагаутдинова Ильмира Тауфиковна, аспирант, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: shagautdinova@list.ru

Равчеева Наталья Александровна, магистрант, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: Smolensk_natali@mail.ru

В работе представлены результаты модельных расчетов колебательных состояний димеров 6-метилурацила. Геометрические параметры и частоты колебаний определены с помощью метода функционала плотности DFT/b3LYP.

На основании полученных результатов предложены структурно-динамические модели исследуемых соединений. Показано, что для спектральной идентификации димеров следует использовать значения интенсивностей полос, отнесенных к деформационным колебаниям связей NH (β_{NH}), а также валентных (ρ_{NH}) и неплоских деформационных (ρ_{NH}) связей NH.

По поведению интенсивностей и характеру смещения полос указанных колебаний по сравнению с мономером доказано наличие сильной водородной связи в димерах.

Ключевые слова: адиабатический потенциал, 6-метилурацил, урацил, деформационные колебания, димер, спектральная идентификация, ИК-спектр, КР-спектр

STRUCTURAL AND DYNAMIC MODELS OF 6-METHYL URACIL IN CONDENSED STATE

Elkin Mikhail D., D.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru

Likhter Anatoly M., D.Sc. (Engineering), Associate Professor, Astrakhan State University, 20a Tatischev st., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

Kochergina Dinara D., post-graduate student, Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: d_kochergina@mail.ru

Shagautdinova Ilmira T., post-graduate student, Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: shagautdinova@list.ru

Ravcheeva Natalya A., undergraduate student, Astrakhan State University, 20a Tatischev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: Smolensk_natali@mail.ru

There are the results of model calculations of dimers 6-methyluracil vibrational states in article. The geometrical parameters and oscillation frequency determined by the density functional method DFT/b3LYP.

Based on these results are suggested structural and dynamic models of research compounds. It is shown that the spectral identification of dimers should use the intensities of bands assigned to the deformation vibrations of NH (β_{NH}), and valence (q_{NH}) and non-planar deformation (ρ_{NH}) bonds NH.

On the behavior of the intensity and nature of the fringe shift of these vibrations as compared with the monomer proved the presence of strong hydrogen bonds in the dimers.

Keywords: adiabatic potential, 6-methyluracil, uracil, deformation vibrations, dimer, spectral identification, IR, Raman spectrum

Введение. В реальных условиях метилзамещенные урацила, как и все представители урациловых оснований ДНК, находятся в конденсированном (поликристаллическом) состоянии, образуя димеры с сильной водородной связью (NH---O=C).

В отличие от тимина (5-метилурацила), в доступной нам периодической литературе построению структурно-динамических моделей 6-метилурацилов уделено значительно меньше внимания. Можем сослаться на публикации [1, 4, 5, 8], но и они касаются интерпретации колебательного спектра мономера соединения.

Между тем, возможности современных неэмпирических и гибридных методов квантовой механики молекул, реализованные в виде сервисных компьютерных технологий, позволяют осуществить предсказательные расчеты геометрической и электронной структуры соединений урацилового ряда, получить достоверные данные о параметрах адиабатического потенциала молекул. Основанием для такого утверждения являются результаты построения структурно-динамических моделей ряда замещенных урацила, представленные, например, в публикациях [2, 6].

В данной работе на основании модельных квантовых расчетов геометрии и колебательных состояний всех возможных типов NH---O димеров 6-метилурацила в рамках метода функционала плотности DFT/b3LYP [7] предложены их структурно-динамические модели и выявлены признаки спектральной идентификации соединений.

Результаты модельных расчетов и их обсуждение. Представленные в табл. 1 оценки модельных расчетов геометрических параметров димеров 6-метилурацила позволя-

ют констатировать, что различие в соответствующих длинах валентных связей по сравнению с мономером составляет величину порядка 0,01 Å.

Таблица 1

Оптимизированные значения геометрических параметров димеров 6-метилурацила

| | | | | | |
|---------|-----------|----------|-------------|-----------|-------------|
| R(1,2) | 1,37–1,40 | R(5,11) | 1,08–1,08 | A(4,3,9) | 116,4–117,7 |
| R(1,6) | 1,37–1,38 | R(6,12) | 1,50–1,50 | A(3,4,5) | 113,1–115,5 |
| R(1,7) | 1,01–1,03 | A(2,1,6) | 123,6–124,8 | A(3,4,10) | 120,0–121,0 |
| R(2,3) | 1,37–1,38 | A(2,1,7) | 114,3–115,9 | A(5,4,10) | 123,6–126,9 |
| R(2,8) | 1,21–1,23 | A(6,1,7) | 120,5–121,0 | A(4,5,6) | 120,6–121,2 |
| R(3,4) | 1,39–1,42 | A(1,2,3) | 113,3–114,6 | A(4,5,11) | 117,3–117,7 |
| R(3,9) | 1,01–1,03 | A(1,2,8) | 120,7–123,0 | A(6,5,11) | 121,6–121,9 |
| R(4,5) | 1,45–1,46 | A(3,2,8) | 122,5–124,9 | A(1,6,5) | 119,5–120,5 |
| R(4,10) | 1,21–1,23 | A(2,3,4) | 126,3–127,3 | A(1,6,12) | 115,2–116,1 |
| R(5,6) | 1,35–1,35 | A(2,3,9) | 115,7–116,9 | A(5,6,12) | 124,2–124,7 |

Примечание. Длины валентных связей R(i,j) в Å, значения валентных углов A(i,j,k) в град.

Для валентных углов такое различие составляет величину порядка 1,5°. Конформационная модель, при которой воспроизводятся крутильные колебания метильных групп, определяется двугранными углами $D(5,6,12,H) = 0$, $D(5,6,12,H) = 120$, $D(5,6,12,H) = -120$ (рис. 1).

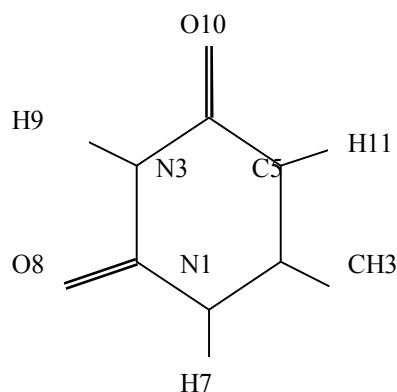


Рис. 1. Молекулярная диаграмма 6-метилурацила

Для оценки колебательных состояний авторами использовано известное соотношение квантовой теории молекулярных колебаний:

$$E^n = \nu_s \left(n_s + \frac{1}{2} \right) + \chi_{sr} \left(n_s + \frac{1}{2} \right) \left(n_r + \frac{1}{2} \right), \quad (1)$$

где ν_s – частоты гармонических колебаний; n_s, n_r – квантовые числа рассматриваемого колебательного состояния.

Оценки ангармонических констант χ_{sr} осуществлялись по соотношениям, предложенным в работе [3].

Весь набор фундаментальных колебаний димеров 6-метилурацила условно можно разделить на две группы. Первая группа (табл. 2, 3) касается колебаний урациловых фрагментов $C_4N_2O_2H_3X$ ($X=CH_3$) в диапазоне ниже 1800 см^{-1} , которые следует считать характеристическими по частоте и форме колебаний.

Таблица 2

**Интерпретация фундаментальных колебаний
в симметричных димерах 6-метилурацила**

| Форма колебаний | V _{эксп} [1] | Мономер | | | 7---8 | | | V _{анг} | 8---9 | | | 9---10 | |
|--------------------------------------|-----------------------|------------------|-----|-----|------------------|------|-----|------------------|-------|-----|------|--------|--|
| | | v _{анг} | ИК | КР | v _{анг} | ИК | КР | | ИК | КР | ИК | КР | |
| q _{C=O} | 1752 | 1731 | 632 | 10 | 1791 | 655 | 120 | 1748 | 984 | 85 | 1153 | 22 | |
| q _{C=O} | 1738 | 1706 | 654 | 50 | 1765 | 2839 | 24 | 1730 | 1906 | 58 | 1945 | 194 | |
| Q, β, γ | 1663 | 1632 | 97 | 22 | 1687 | 230 | 18 | 1658 | 177 | 40 | 123 | 42 | |
| β _{NH} , Q | 1488 | 1515 | 69 | 16 | 1564 | 79 | 89 | 1497 | 118 | 36 | 160 | 46 | |
| β _{NH} , Q | 1409 | 1399 | 94 | 1,8 | 1443 | 425 | 6,3 | 1447 | 42 | 38 | 113 | 102 | |
| β _{NH} , Q | 1363 | 1356 | 93 | 9,2 | 1399 | 15 | 19 | 1395 | 513 | 5,8 | 208 | 27 | |
| β, β _{NH} | 1329 | 1344 | 24 | 1,2 | 1385 | 123 | 1,2 | 1326 | 50 | 1,6 | 85 | 2,2 | |
| Q, β | 1218 | 1185 | 21 | 19 | 1221 | 49 | 51 | 1209 | 52 | 31 | 20 | 46 | |
| Q, β, β _{CH3} | 1045 | 1046 | 22 | 3,2 | 1075 | 29 | 7,3 | 1051 | 34 | 6,4 | 39 | 17 | |
| γ | 1028 | 1014 | 11 | 1,4 | 1043 | 32 | 11 | 1029 | 29 | 3,4 | 39 | 3,7 | |
| Q, Q _{CC} , γ | 943 | 924 | 7,0 | 1,0 | 949 | 9,1 | 2,8 | 935 | 52 | 9,6 | 76 | 14 | |
| γ | 625 | 625 | 3,6 | 19 | 640 | 26 | 48 | 630 | 26 | 44 | 12 | 41 | |
| β _{C=O} | 570 | 584 | 5,0 | 1,4 | 598 | 44 | 5,2 | 589 | 16 | 2,0 | 11 | 2,2 | |
| γ | 526 | 523 | 16 | 3,6 | 535 | 107 | 8,6 | 532 | 55 | 7,6 | 40 | 11 | |
| γ | 496 | 496 | 6,6 | 2,7 | 507 | 17 | 8,9 | 498 | 51 | 8,5 | 78 | 9,6 | |
| β _{C=O} | 386 | 394 | 19 | 2,2 | 403 | 55 | 5,0 | 399 | 73 | 3,7 | 89 | 3,2 | |
| ρ | 828 | 821 | 46 | 1,0 | 843 | 46 | 1,2 | 826 | 47 | 2,3 | 47 | 2,5 | |
| ρ _{C=O} , ρ _{CN} | 731 | 758 | 46 | 0,0 | 778 | 51 | 0,2 | 758 | 20 | 0,6 | 30 | 0,5 | |
| ρ _{C=O} , χ | 700 | 715 | 5,1 | 0,9 | 733 | 7,7 | 2,0 | 733 | 17 | 1,8 | 22 | 1,1 | |
| ρ _{NH} , χ, ρ _{CC} | 520 | 547 | 32 | 2,3 | 560 | 2,8 | 2,1 | 520 | 53 | 4,6 | 54 | 5,3 | |

Примечание. Частоты колебаний ν в см⁻¹, интенсивности в спектрах ИК в км/моль, в спектрах КР в Å⁴/а.е.м.

Таблица 3

**Интерпретация фундаментальных колебаний
в несимметричных димерах 6-метилурацила**

| Форма колебаний | V _{эксп} [1] | 7---8'; 8--9' | | | 9---8'; 10---9' | | | 9---8'; 10---7' | | |
|------------------------|-----------------------|------------------|------|-----|------------------|------|-----|------------------|------|-----|
| | | v _{анг} | ИК | КР | v _{анг} | ИК | КР | v _{анг} | ИК | КР |
| Q _{C=O} | 1752 | - | - | - | 1763 | 511 | 11 | 1769 | 554 | 13 |
| Q _{C=O} | 1738 | 1733 | 1069 | 111 | 1728 | 381 | 50 | 1728 | 413 | 50 |
| Q _{C=O} | - | 1710 | 2087 | 33 | 1718 | 1358 | 4,4 | 1714 | 1401 | 6,9 |
| Q _{C=O} | - | - | - | - | 1687 | 725 | 119 | 1673 | 973 | 124 |
| Q, β, γ | 1663 | 1634 | 191 | 32 | 1631 | 160 | 39 | 1625 | 120 | 25 |
| β _{NH} , Q | 1488 | 1511 | 64 | 38 | - | - | - | 1515 | 77 | 56 |
| β _{NH} , Q | - | 1465 | 35 | 20 | 1473 | 135 | 39 | 1482 | 83 | 20 |
| β _{NH} , Q | 1409 | 1427 | 30 | 16 | 1425 | 79 | 69 | 1428 | 70 | 49 |
| β, β _{NH} | - | 1390 | 494 | 6,1 | - | - | - | 1397 | 202 | 2,8 |
| β _{NH} , Q | 1363 | - | - | - | 1374 | 364 | 16 | 1378 | 56 | 8,9 |
| β _{NH} , Q | - | 1357 | 31 | 9,0 | - | - | - | 1356 | 24 | 8,4 |
| β _{NH} , Q | 1329 | 1340 | 28 | 2,1 | - | - | - | 1342 | 33 | 1,9 |
| β _{NH} , Q | - | 1308 | 32 | 0,7 | 1306 | 69 | 2,1 | 1305 | 46 | 0,8 |
| Q, β | 1218 | 1188 | 54 | 41 | 1192 | 37 | 39 | 1188 | 28 | 58 |
| Q, β, Q _{CC} | 1142 | 1144 | 1,1 | 2,5 | 1144 | 3,1 | 3,3 | 1150 | 2,8 | 2,5 |
| Q, β, β _{CH3} | 1045 | 1043 | 31 | 6,1 | 1037 | 36 | 10 | 1040 | 19 | 3,5 |

ПРИКАСПИЙСКИЙ ЖУРНАЛ:
управление и высокие технологии № 4 (24) 2013
СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

| | | | | | | | | | | |
|------------------------------|------|------|-----|-----|------|----|-----|------|----|-----|
| γ | 1028 | 1015 | 31 | 7,6 | 1015 | 33 | 3,6 | 1016 | 39 | 10 |
| Q, Q_{CC}, γ | 943 | 922 | 33 | 5,9 | 922 | 63 | 11 | 924 | 45 | 6,9 |
| γ | 625 | 623 | 30 | 45 | 623 | 19 | 43 | 624 | 18 | 44 |
| $\beta_{C=O}$ | 570 | 583 | 23 | 4,3 | 582 | 14 | 1,7 | 584 | 21 | 3,5 |
| γ | 526 | 524 | 84 | 8,1 | 525 | 50 | 9,5 | 526 | 76 | 8,5 |
| γ | 496 | 493 | 33 | 8,6 | 492 | 63 | 9,1 | 495 | 37 | 9,5 |
| $\beta_{C=O}$ | 386 | 393 | 63 | 4,1 | 395 | 80 | 3,5 | 395 | 72 | 3,8 |
| ρ | 828 | 814 | 101 | 1,5 | 816 | 48 | 2,4 | 812 | 44 | 2,4 |
| $\rho_{C=O}, \rho_{CN}$ | 731 | 753 | 36 | 0,5 | 749 | 24 | 0,5 | 754 | 42 | 0,3 |
| $\rho_{C=O}, \chi$ | 700 | 717 | 11 | 1,9 | 723 | 20 | 1,5 | 719 | 17 | 1,4 |
| $\rho_{NH}, \chi, \rho_{CC}$ | 520 | 546 | 1,5 | 1,0 | - | - | - | 534 | 37 | 5,7 |
| $\rho_{NH}, \chi, \rho_{CC}$ | | 510 | 27 | 2,3 | 513 | 54 | 4,9 | - | - | - |

Поэтому для спектральной идентификации димеров в указанном частотном диапазоне следует использовать значения интенсивностей полос, отнесенных к деформационным колебаниям связей NH (β_{NH}). Для симметричных димеров (тип симметрии C2h) имеет место правило альтернативного запрета на интенсивности в спектрах ИК и КР.

Вторая группа фундаментальных колебаний димеров 6-метилурацила связана с валентными (q_{NH}) и неплоскими деформационными (ρ_{NH}) колебаниями связей NH, участвующими в образовании водородных связей между мономерами (табл. 4, 5). Согласно модельным расчетам длины этих связей оцениваются величиной $\sim 1,78 \text{ \AA}$ в димерах N1H7---O8 и вплоть до величин $\sim 1,84 \text{ \AA}$ и $1,88 \text{ \AA}$ в димерах N3H9---O8 и N3H9---O10 соответственно.

Таблица 4

**Интерпретация колебаний связей NH
в симметричных димерах 6-метилурацила**

| $\nu_{\text{эксп}}$ [1] | Мономер | | | $\nu_{\text{эксп}}$ [4] | Димер 7---8 | | | Димер 8---9 | | | Димер 9---10 | | |
|-------------------------|--------------------|----|-----|-------------------------|--------------------|------|-----|--------------------|------|-----|--------------------|------|-----|
| | $\nu_{\text{анг}}$ | ИК | КР | | $\nu_{\text{анг}}$ | ИК | КР | $\nu_{\text{анг}}$ | ИК | КР | $\nu_{\text{анг}}$ | ИК | КР |
| q_{NH} | | | | | | | | | | | | | |
| 3484 | 3462 | 75 | 73 | 3124 3107 | 3428 | 121 | 159 | 3450 | 150 | - | 3449 | 196 | - |
| 3435 | 3446 | 64 | 87 | | 3122 | 2712 | - | 3199 | 1944 | - | 3143 | 2106 | - |
| | | | | | 3085 | - | 307 | 3172 | - | 132 | 3106 | - | 777 |
| ρ_{NH} | | | | | | | | | | | | | |
| 662 | 673 | 86 | 2,4 | 894 | 681 | 95 | 4,9 | 885 | 192 | - | 911 | 178 | - |
| 551 | 565 | 14 | 0,1 | 861 | 856 | 192 | - | 575 | 77 | - | 580 | 74 | - |

Таблица 5

**Интерпретация колебаний связей NH
в несимметричных димерах 6-метилурацила**

| $\nu_{\text{эксп}}$ [4] | 7--8 9-8 | | | $\nu_{\text{эксп}}$ [4] | 9---8 10---9 | | | $\nu_{\text{эксп}}$ [4] | 10---7 9---8 | | |
|-------------------------|--------------------|------|-----|-------------------------|--------------------|------|-----|-------------------------|--------------------|------|-----|
| | $\nu_{\text{анг}}$ | ИК | КР | | $\nu_{\text{анг}}$ | ИК | КР | | $\nu_{\text{анг}}$ | ИК | КР |
| q_{NH} | | | | | | | | | | | |
| 3448 | 3452 | 72 | 66 | 3461 | 3451 | 76 | 70 | 3442 | 3446 | 82 | 97 |
| | 3427 | 62 | 80 | | 3449 | 74 | 91 | | 3428 | 61 | 81 |
| 3148 | 3164 | 2269 | 35 | 3159 | 3173 | 2112 | 21 | 3115 | 3127 | 2582 | 5,4 |
| | 3128 | 56 | 640 | | 3138 | 151 | 687 | | 3089 | 3,5 | 73 |
| ρ_{NH} | | | | | | | | | | | |
| 890 | 890 | 136 | - | 901 | 899 | 176 | - | 894 | 896 | 146 | 0,1 |
| 818 | 825 | 3,4 | 0,7 | 872 | 869 | 8,2 | 0,1 | 839 | 838 | 38 | 0,2 |
| 669 | 665 | 46 | 2,5 | 565 | 580 | 35 | - | 669 | 666 | 48 | 2,6 |
| 557 | 573 | 38 | - | | 575 | 40 | - | 581 | 585 | 40 | 0,1 |

Как и следовало ожидать, характер смещения полос указанных колебаний по сравнению с мономером и поведение интенсивностей полос полностью соответствуют наличию сильной водородной связи в рассматриваемом соединении. Полосы могут быть использованы для спектральной идентификации всех типов димеров исследуемого соединения.

Заключение. Представленные результаты модельных квантовых расчетов структуры и спектров 6-метилурацила дают основание утверждать, что метод функционала плотности DFT/b3LYP позволяет осуществлять достоверные предсказательные расчеты параметров структурно-динамических моделей данного класса замещенных урацила, выявлять признаки их спектральной идентификации, устанавливать общие закономерности в характере поведения полос соединения при его димеризации.

Список литературы

1. Элькин М. Д. Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Изв. Саратов. гос. ун-та. Нов. сер. Физика. – 2008. – Т. 8, вып. 2. – С. 25–29.
2. Элькин М. Д. Моделирование адиабатических потенциалов моногидроксиазаурацилов в конденсированном состоянии / М. Д. Элькин, В. В. Смирнов, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина, О. М. Алыкова, А. Р. Гайсина, Н. А. Равчеева // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2013. – № 2 (23). – С. 66–72.
3. Элькин М. Д. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью / М. Д. Элькин, Л. М. Бабков // Изв. Саратов. гос. ун-та. Нов. сер. Физика. – 2011. – Т. 11, вып. 1. – С. 20–25.
4. Элькин П. М. Анализ колебательных спектров метилзамещенных урацила в ангармоническом приближении / П. М. Элькин, М. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2006. – Т. 73, № 4. – С. 431–436.
5. Элькин П. М. Математическое моделирование структуры и динамики димеров урацила и азаурацилов / П. М. Элькин, М. А. Эрман, В. М. Карташов // Изв. Волг. гос. тех. ун-та. – 2012. – № 10 (97). – С. 55–62.
6. Эрман Е. А. Структурно-динамические модели и колебательные состояния димеров хлорурацила / Е. А. Эрман, М. Д. Элькин, А. М. Лихтер, Е. А. Джалмухамбетова, О. М. Алыкова, Н. А. Равчеева // Естественные науки. – 2012. – № 2. – С. 220–227.
7. Frisch M. J. Gaussian / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel. – Pittsburgh PA, 2003.
8. Tabish R. Computational studies of vibrational spectra and molecular properties of 6-methyluracil using HF, DFT and MP2 methods / R. Tabish, S. Ahmad // Indian J. Phys. – 2011. – Vol. 85 (2). – P. 239–260.

References

1. Elkin M. D., Dzhalukhambetova Ye. A., Grechukhina O. N. Proyavlenie mezhmolekulyarnogo vzaimodeystviya v dimerakh uratsila [The manifestation of intermolecular interaction in uracil dimers]. *Izvestiya Saratovskogo gosudarstvennogo universiteta. Novaya seriya. Fizika* [Proceedings of Saratov State University. New Series. Physics], 2008, vol. 8, no. 2, pp. 25–29.
2. Elkin M. D., Smirnov V. V., Dzhalukhambetova Ye. A., Grechukhina O. N., Alykova O. M., Gaysina A. R., Ravcheeva N. A. Modelirovanie adiabaticheskikh potentsialov monogidroksiazauratsilov v kondensirovannom sostoyanii [Modeling of the adiabatic potentials monohydroxyazauracil in the condensed state]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2013, no. 2 (23), pp. 66–72.
3. Elkin M. D., Babkov L. M. Uchet angarmonicheskogo smeshcheniya polos v modelnykh raschetakh kolebatelnykh spektrov dimerov s vodorodnoy svyazyu [Account of anharmonic bond shift in model calculations of the vibrational spectra of hydrogen-bonded dimers]. *Izvestiya Saratovskogo gosudarstvennogo universiteta. Novaya seriya. Fizika* [Proceedings of Saratov State University. New Series. Physics], 2011, vol. 11, no. 1, pp. 20–25.
4. Elkin P. M., Erman M. A., Pulin O. V. Analiz kolebatelnykh spektrov metilzameshchennykh uratsila v angarmonicheskom priblizhenii [Analysis of the vibrational spectra of substituted uracil in inharmonic

approximation]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2006, vol. 73, no. 4, pp. 431–436.

5. Elkin P. M., Erman M. A., Kartashov V. M. Matematicheskoe modelirovanie struktury i dinamiki dimerov uratsila i azauratsilov [Mathematical modeling of the structure and dynamics of dimers of uracil and azauracil]. *Izvestiya Volgogradskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Proceedings of Volgograd State Technical University], 2012, no. 10 (97), pp. 55–62.

6. Erman Ye. A., Elkin M. D., Likhter A. M., Dzhalmukhambetova Ye. A., Alykova O. M., Ravcheeva N. A. Strukturno-dinamicheskie modeli i kolebatelnye sostoyaniya dimerov khloruratsila [Structural-dynamic models and vibrational states of clorinuracil dimers]. *Yestestvennye nauki* [Natural Sciences], 2012, № 2 (39), pp. 220–227.

7. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. *Gaussian*. – Pittsburgh PA, 2003.

8. Tabish R., Ahmad S. Computational studies of vibrational spectra and molecular properties of 6-methyluracil using HF, DFT and MP2 methods. *Indian J. Phys.*, 2011, vol. 85 (2), pp. 239–260.