

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

9. Элькин, П. М. Квантовохимический расчет нормальных колебаний молекул пятичленных налькоген-гетероциклических соединений с учетом ангармонизма / П. М. Элькин, Е. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2009. – Т. 76, № 2. – С. 170–175.

10. Элькин, М. Д. Компьютерное моделирование геометрической структуры и колебательных состояний спиназарина / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, И. И. Гордеев // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2009. – № 3 (7).

11. Якубовская, А. Я. Спиназарин и этилспиназарин – пигменты морского ежа *Scaphechinus mirabilis* / А. Я. Якубовская, Н. Д. Похилло, Н. П. Мищенко, В. Ф. Ануфриев // Известия АН РФ. – 2007. – № 4. – С. 788–791. – (Сер. хим.).

12. Frisch, M. J. GAUSSIAN 03. Revision A.7 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. // Pittsburgh (PA) : Gaussian Inc., 2003.

13. Girlando, A. Normal coordinate analysis of fused-ring p-quinones: in plane vibrations of 1,4-naphthoquinone and 9,10-anthraquinone / A. Girlando, D. Ragazzon, C. Pecule // Spectrochim. Acta. – Vol. 36A. – P. 1053–1058.

14. Nonella M. Structures and harmonic force field of 1,4-naphthoquinone and naphthalene: a density functional study // Journal of Molecular structure. – 1996. – Vol. 132. – P. 7–21.

15. Paul, S. O. The Fourier Transform Raman and infrared spectra naphthazarine / S. O. Paul, C. J. H. Schutte, P. J. Hendra // Spectrochimica Acta. – Vol. 46A. – P. 323–329.

16. Stenman, F. On vibrational spectrum 1,4-naphthoquinone / F. Stenman, J. Rasanen // Spectrochimica Acta. – Vol. 29A. – P. 405–410.

УДК 539.193/.194;535/.33/34

### МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ. 1. МУРАВЬИНАЯ КИСЛОТА

**П.М. Элькин, Т.А. Шальнова, Е.Ю. Степанович**

*Проведены модельные расчеты колебательных состояний димера муравьиной кислоты. Показано, что при интерпретации колебательных состояний карбоксильного фрагмента следует учитывать ангармонические резонансы. Предложена методика такого учета для карбоновых кислот.*

**Ключевые слова:** димеры, муравьиная кислота, колебательные спектры, ангармонические резонансы, межмолекулярное взаимодействие.

**Key words:** dimer, formic acid, vibrational spectra, anharmonic resonances, intermolecular interaction.

Несмотря на многочисленные теоретические и экспериментальные исследования геометрической и электронной структуры муравьиной кислоты (*Formic acid*), вопрос об интерпретации колебательных состояний вещества в различных конденсированных состояниях до сих пор остается открытым [2, 3, 5, 6].

Отметим, что такие же проблемы возникают при построении структурно-динамических моделей более сложных представителей данного ряда соединений – карбоновых кислот (X-COOH). В основном это касается интерпретации колебаний карбоксильной группы (COOH). Именно этот фрагмент отвечает за образование димеров с водородной связью. Часть фундаментальных колебаний этого фрагмента меняется при переходе от мономера к димеру, что и фиксирует спектральный эксперимент, осуществленный для газового (ИК-спектры) и жидкого (КР-спектры) состояний вещества [6].

Для димера муравьиной кислоты, принадлежащего к группе симметрии  $C_{2h}$ , в колебательных спектрах имеет место проявление альтернативного правила отбора для интенсивностей колебательных полос: симметричные колебания проявляются в КР-спектрах, антисимметричные – в ИК-спектрах. При этом в диапазон свыше  $2900\text{ см}^{-1}$  попадают полосы сильной интенсивности в обоих спектрах, интерпретируемые различными авторами как проявление колебаний связей ОН, участвующих в межмолекулярном взаимодействии, так и колебания связи НС муравьиной кислоты.

К примеру, в монографии [6] к колебаниям  $3160\text{ см}^{-1}$  и  $3110\text{ см}^{-1}$  отнесены, соответственно, симметричные и антисимметричные валентные колебания связей ОН в димерах муравьиной кислоты (Н-СООН), что существенно отличается от подобных колебаний в других карбоновых кислотах [2, 3]. Ведь, как правило, валентные колебания связей Y-H (Y=C, O, N) проявляют свойства характеристичности по частоте, по которым их идентифицируют в исследуемых соединениях, как мономерах, так и димерах [1, 8–10]. Выяснить причину можно на основании неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний с учетом ангармонических резонансов, что и является предметом данной публикации. Судя по периодической печати, такие исследования для муравьиной кислоты осуществляются достаточно интенсивно [11, 12, 14, 15].

**Модельные расчеты колебательных состояний.** Моделирование геометрической структуры и параметров адиабатического потенциала мономера и димера муравьиной кислоты выполнено для 12-ти атомных базисов в рамках метода функционала плотности DFT/B3LYP: от 6–31 G(d) до 6–311++ G(d,p) [10].

Оптимизация геометрии дала следующие результаты для длин валентных связей и валентных углов:  $R_{OH} = 0,97\text{--}1,01(0,97)\text{ \AA}$ ,  $R_{OC} = 1,31\text{--}1,35(1,34)\text{ \AA}$ ,  $R_{C=O} = 1,20\text{--}1,23(1,20)\text{ \AA}$ ,  $A_{COH} = 106,6\text{--}110,9(106,3)^\circ$ ,  $A_{OCO} = 124,9\text{--}126,8^\circ(124,9)$ ,  $A_{OCH} = 109,2\text{--}112,0(110,9)^\circ$ . В скобках приведены экспериментальные данные, определенные микроволновым методом для мономера муравьиной кислоты.

Для димера электронографический метод дает оценку:  $R_{OC} = 1,36\text{ \AA}$ ,  $R_{C=O} = 1,25\text{ \AA}$ ,  $A_{OCO} = 121^\circ$ . Эти данные приведены в монографии [6]. Отсюда вывод: для оценки геометрии карбоксильных фрагментов можно использовать любой базис, а их влиянием на кинематическую часть модельного квантового уравнения для колебательной подсистемы [5] можно пренебречь.

Длина связи межмолекулярного взаимодействия О---Н в димере меняется в диапазоне  $1,64\text{--}1,75\text{ \AA}$  (экспериментальная оценка  $1,69\text{ \AA}$ ).

Таблица 1

**Интерпретация колебательных спектров мономера муравьиной кислоты**

Тип сим.	Форма колеб.	$\nu_{\text{exp}}$ [1]	Минимум				Максимум			
			$\nu_h$	$\nu_{\text{anh}}$	ИК	КР	$\nu_h$	$\nu_{\text{anh}}$	ИК	КР
A'	$\nu_{OH}$	3570 с.	3659	3453	30,3	73,2	3736	3536	62,3	82,3
A'	$\nu_{CH}$	2943 с.	3039	2878	39,3	104	3101	2918	59,3	127
A'	$\nu_{CO}$	1770 с.	1817	1783	311	5,58	1856	1821	409	11,3
A'	$\beta_{OCH}$	1387	1403	1353	2,29	6,69	1423	1414	4,44	10,1
A'	$\nu_{CO}$	1229 с.	1294	1227	3,98	0,38	1327	1272	15,8	1,69
A'	$\beta_{COH}$	1105 с.	1127	1094	236	1,71	1148	1118	281	2,57
A'	$\gamma_{OCO}$	625 с.	623	617	44,2	3,66	633	627	49,8	4,67
A''	$\rho_{CH}$	1033 с.	1045	1025	0,93	1,46	1059	1037	2,96	2,40
A''	$\rho_{OH}$	638 с.	679	636	150	0,47	721	677	175	2,31

*Примечание.* Частоты колебаний в  $\text{см}^{-1}$ , интенсивности в ИК-спектрах в км/моль, в КР-спектрах  $\text{\AA}^4/\text{а. е. м.}$

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Таблица 2

**Влияние атомного базиса на вычисленные значения частот и интенсивностей  
карбоксильной группы в мономере муравьиной кислоты**

$\nu_h$	$\nu_{anh}$	ИК	КР	$\nu_h$	$\nu_{anh}$	ИК	КР	$\nu_h$	$\nu_{anh}$	ИК	КР
6_31 G(d)				6_31+ G(d)				6_31++ G(d)			
3664	3456	40,4	77,2	3660	3453	55,1	73,2	3659	3453	53,3	78,0
1148	1118	237	2,10	1138	1105	264	2,57	1138	1105	264	2,45
710	673	153	2,30	691	658	163	0,47	692	658	162	0,54
6_31 G(d,p)				6_31+ G(d,p)				6_31++ G(d,p)			
3732	3527	43,4	77,1	3733	3530	61,0	74,1	3732	3529	59,6	78,5
1144	1114	236	1,99	1135	1101	263	2,45	1135	1101	262	2,33
705	666	151	2,30	685	650	161	0,47	685	650	160	0,54
6_311 G(d,p)				6_311+ G(d,p)				6_311++ G(d)			
3702	3482	30,3	82,3	3698	3480	39,5	79,4	3698	3479	39,4	79,2
1141	1108	259	1,71	1134	1100	281	2,32	1134	1100	280	2,26
721	677	167	2,31	697	655	175	0,78	696	655	175	0,76
6311 G(d,p)				6_311+ G(d,p)				6_311++ G(d,p)			
3735	3533	49,9	77,6	3736	3535	62,3	76,4	3736	3536	62,2	76,3
1134	1102	251	1,71	1127	1094	277	2,40	1127	1094	277	2,35
703	658	150	2,10	680	637	159	0,70	679	636	160	0,69

Таблица 3

**Рассчитанные значения ангармонических постоянных  $\chi_{ij}$   
для мономера муравьиной кислоты**

$i,j$	$\chi_{мин}$	$\chi_{макс}$	$i,j$	$\chi_{мин}$	$\chi_{макс}$	$i,j$	$\chi_{мин}$	$\chi_{макс}$	$i,j$	$\chi_{мин}$	$\chi_{макс}$
1;1	-99,8	-91,3	5;1	-20,7	-19,4	6;4	-6,32	-5,70	9;1	-7,34	-1,51
2;2	-68,3	-66,4	5;2	-19,8	-2,60	6;5	-15,5	-11,9	9;2	-3,14	-2,77
3;2	-28,5	-8,43	5;3	-1,81	15,2	6;6	-6,46	-5,28	9;4	-65,8	72,3
3;3	-9,90	-9,40	5;4	-7,71	-5,60	7;3	-6,86	-6,16	9;5	-58,2	-33,6
4;2	-27,8	-17,8	5;5	-6,86	-5,29	8;2	-17,8	-16,1	9;6	-6,92	-5,10
4;4	-7,86	-6,25	6;3	-5,52	-4,29	8;3	-6,19	-5,65	9;9	-23,7	6,70

*Примечание.* Приведены постоянные, превышающие по модулю  $5 \text{ см}^{-1}$ .

Результаты теоретического анализа колебательных состояний мономера муравьиной представлены в таблицах 1–3. Они позволяют сделать следующие выводы.

1. Учет ангармонизма колебаний приводит к существенно лучшему согласию эксперимента с расчетными данными для всех фундаментальных полос. Предлагаемое нами на основании квантовых расчетов отнесение фундаментальных частот колебаний полностью согласуется с выводами из монографии [6] для мономера муравьиной кислоты.

2. Для деформационных колебаний  $\beta_{\text{СОH}}$ ,  $\gamma_{\text{СОO}}$ ,  $\rho_{\text{СH}}$  выбор базиса принципиального значения не имеет. Для полос, интерпретированных как колебания связей  $q_{\text{OH}}$ ,  $Q_{\text{C=O}}$ ,  $Q_{\text{CO}}$ , углов  $\beta_{\text{СОH}}$ ,  $\rho_{\text{OH}}$  наилучшее совпадение по частотам фундаментальных колебаний имеет место для базиса 6–311 G(d\_p), 6–311+ G(d\_p), 6–311++ G(d\_p), для полосы  $q_{\text{СH}}$  – базис 6–31 G(d), 6–31+ G(d), 6–31++ G(d). При этом учет диффузных добавок к базису (+, ++) приводит к сдвигу колебательных состояний не более  $30 \text{ см}^{-1}$ . Такого же порядка сдвиг может дать учет поляризационных эффектов в базисе (p). При переходе от базисов 6–31 к 6–311 сдвиг может достигать  $\sim 80 \text{ см}^{-1}$ .

3. Выбор базиса не отражается и на качественной оценке интенсивностей линий в спектрах ИК и КР. Количественная оценка определяется учетом в базисном наборе поляризационных эффектов и сказывается на расчетных значениях интенсивностей ИК полос.

Общая закономерность поведения колебательных спектров в димерах с водородной связью – уменьшение частоты валентного колебания связи ОН, участвующей в образовании димера, на величину  $\sim 500 \text{ см}^{-1}$  и ее попадание в частотный диапазон валентных колебаний связей СН. Возникают трудности с интерпретацией экспериментального спектра, что и имеет место для димера муравьиной кислоты [6]. Следует учитывать и наличие ангармонических резонансов между фундаментальными колебаниями и обертонами деформационных колебаний молекулы.

В таблице 4 дана интерпретация фундаментальных колебаний димера муравьиной кислоты.

Таблица 4

**Влияние базиса на расчет фундаментальных состояний димера муравьиной кислоты**

Тип Сим.	Форма колеб	вэкс [1]	Минимум			Максимум		
			$\nu_h$	$\nu_{anh}$	ИК/КР	$\nu_h$	$\nu_{anh}$	ИК/КР
AG	$\rho_{OH}$	3110	3091	2776	6,80	3238	2936	267
AG	$\rho_{CH}$	2957	3013	2589	277	3118	2934	563
AG	$Q_{C=O}$	1672	1704	1654	10,7	1744	1694	22,6
AG	$\beta_{OCH}$	1395	1448	1408	10,9	1501	1455	19,7
AG	$\beta_{COH}$	1350	1394	1359	6,71	1424	1390	10,8
AG	$Q_{CO}$	1204	1242	1213	5,96	1283	1261	9,44
AG	$\gamma_{OCO}$	676	677	672	6,10	690	686	7,52
AU	$\rho_{CH}$	1057	1078	1054	51,5	1110	1077	96,4
AU	$\rho_{OH}$	917 с.	944	930	149	1005	973	271
BG	$\rho_{CH}$	1050	1063	1046	2,88	1081	1059	6,30
BG	$\rho_{OH}$	919	905	894	0,25	990	952	1,10
BU	$\rho_{OH}$	3110 о.с.	3156	2853	1705	3313	3015	2156
BU	$\rho_{CH}$	2957 о.с.	3056	2870	229	3113	2925	986
BU	$Q_{C=O}$	1754 о.с.	1774	1735	726	1814	1774	891
BU	$\beta_{OCH}$	1450 о.с.	1435	1394	0,05	1461	1416	4,25
BU	$\beta_{COH}$	1365 ср.	1388	1351	44,2	1418	1386	60,1
BU	$Q_{CO}$	1218 о.с.	1245	1217	3121	1284	1261	393
BU	$\gamma_{OCO}$	697 ср.	701	697	41,3	728	725	49,2

В диапазоне ниже  $1800 \text{ см}^{-1}$  квантовые расчеты подтверждают расхождение дублетов до  $80 \text{ см}^{-1}$ , имеет место согласие с экспериментом, которое заметно улучшается при учете ангармонизма колебаний. Резонансных взаимодействий с обертонами в этой области не наблюдается, а ангармоническое смещение колебательных полос хорошо описывается адиабатической теорией возмущения [4]. В этом случае качественную оценку ангармонизма колебаний можно выполнить операцией масштабирования [13] или использованием метода спектроскопических масс [6].

Существенное увеличение частоты неплоского деформационного колебания связи ОН ( $\sim 300 \text{ см}^{-1}$ ) может служить идентификационным признаком димера муравьиной кислоты. Выбор атомного базиса на интерпретацию колебательного спектра в указанном частотном диапазоне существенного значения не оказывает. Качественная оценка интенсивности колебательных полос сохраняется. Тем не менее предпочтение следует отдать базисам 6–311 G(d,p), 6–311+ G(d,p), 6–311++ G(d,p).

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Для диапазона, где располагаются интенсивные в ИК- и КР-спектрах полосы, соответствующие валентным колебаниям связей ОН и СН димера муравьиной кислоты, выбор базиса определяет номера колебаний обертона (составного тона), участвующего в резонансном взаимодействии (Ферми резонанс [4]) с фундаментальным состоянием, исходные (гармонические) частоты. В таблице 5 для указанных валентных колебаний сопоставлены результаты модельных расчетов в различных базисов технологии Gaussian – 03.

Таблица 5

**Интерпретация колебаний связей ОН и СН в димере муравьиной кислоты  
на основании модельных расчетов**

Тип сим.	Форма колеб.	V <sub>эксп</sub> [1]	6_31_d			6_31+_d		
			V <sub>r</sub>	V <sub>анг</sub>	КР/ИК	V <sub>r</sub>	V <sub>анг</sub>	КР/ИК
AG	q <sub>ОН</sub>	3162	3101	2849	563	3155	2832	176
AG	q <sub>СН</sub>	2957	3113	2863	6,80	3118	2934	424
BU	q <sub>ОН</sub>	3110 о.с.	3218	2942	1899	3246	2960	1949
BU	q <sub>СН</sub>	2957 о.с.	3098	2915	522	3113	2925	349
			6_31_d p			6_31+_d p		
AG	q <sub>ОН</sub>	3162	3013	2589	277	3054	2666	322
AG	q <sub>СН</sub>	2957	3091	2912	267	3106	2924	258
BU	q <sub>ОН</sub>	3110 о.с.	3156	2853	1830	3176	2855	2028
BU	q <sub>СН</sub>	2957 о.с.	3075	2876	986	3094	2895	707
			6_311_d			6_311+_d		
AG	q <sub>ОН</sub>	3162	3212	2890	236	3238	2936	252
AG	q <sub>СН</sub>	2957	3080	2906	350	3088	2897	334
BU	q <sub>ОН</sub>	3110 о.с.	3300	3010	1726	3313	3015	1705
BU	q <sub>СН</sub>	2957 о.с.	3075	2900	295	3084	2897	229
			6_311_d p			6_311+_d p		
AG	q <sub>ОН</sub>	3162	3128	2776	189	3165	2834	221
AG	q <sub>СН</sub>	2957	3063	2890	378	3073	2885	353
BU	q <sub>ОН</sub>	3110 о.с.	3239	2930	2142	3261	2967	2156
BU	q <sub>СН</sub>	2957 о.с.	3056	2884	365	3068	2885	275

Величина расхождения резонирующих состояний зависит от значения кубической силовой постоянной  $F_{ijk}$ . При этом, как следует из таблицы 6, смена базиса не вносит существенного изменения в значениях соответствующих кубических силовых постоянных. Согласно таблице 4, расхождение в значениях вычисленных фундаментальных частот в гармоническом приближении, вызванное сменой базиса расчета, достигает  $150 \text{ см}^{-1}$  для валентных колебаний связей ОН, для связей СН  $\sim 100 \text{ см}^{-1}$ .

Таблица 6

**Кубические силовые постоянные в ( $\text{см}^{-1}$ ) димера муравьиной кислоты**

Индексы нормальных мод			Атомные базисы					
i	j	k	6_311G (d,p)	6_311+ G(d,p)	6_311+ G(d)	6_31+ G(d,p)	6_31+ G(d)	6_311++ G(d,p)
4	3	1	-96,79	-89,01	-69,34	-99,00	-75,19	-89,33
5	3	1	-60,64	-64,38	-71,44	-86,43	-69,27	-64,10
18	17	8	-29,41	-22,27	-15,55	-59,15	-27,00	-22,28
18	17	9	-28,25	-24,44	-14,80	-71,22	-25,57	-24,38
19	17	5	-21,90	-24,74	-29,81	-34,57	-27,62	-24,63
19	18	6	-1,28	-1,03	-2,04	2,37	-2,52	-0,82
21	19	1	-36,57	-37,73	-40,13	-79,66	-44,43	-37,78
22	19	2	11,11	-10,90	-10,61	-22,32	-11,14	-10,75

**ПРИКАСПИЙСКИЙ ЖУРНАЛ:**  
**управление и высокие технологии № 4 (8) 2009**

Следовательно, результаты модельных расчетов зависят от вычисленных значений частот гармонического приближения и схемы, по которой вычисляется ангармоническое смещение полос, каковыми являются расчетные формулы адиабатической теории возмущения второго порядка или метод учета резонанса Ферми.

По умолчанию, в компьютерной технологии Gaussian – 03 ангармонический резонанс между фундаментальным колебанием и обертоном рассматривается при энергетической щели менее  $10 \text{ см}^{-1}$ . Этим и объясняется существенный разброс расчетных данных для частот фундаментальных колебаний, интерпретированных как валентные колебания связей ОН и СН в таблице 4 при учете ангармонизма колебаний ( $\nu_{\text{anh}}$ ).

В таблице 7 на основании модельных расчетов в различных атомных базисах дана оценка ангармонического сдвига резонирующих колебательных состояний, для которых энергетическая щель не превышает  $10 \text{ см}^{-1}$ .

Таблица 7

**Сдвиг колебательных состояний при учете резонансов Ферми для димера муравьиной кислоты в различных базисах**

i	j	k	$F_{ijk}$	$\nu_1$	$\nu_2$	i	j	k	$F_{ijk}$	$\nu_1$	$\nu_2$
6–31+ G(d)						6–31 G(d,p)					
2	5	3	–70,1	2941	3024	2	6	3	–50,7	2599	2938
17	4	19	–33,3	2960	3157	1	22	19	–20,6	2913	3025
18	3	21	–53,7	2928	3031	2	4	4	–218	2599	2901
6–31++ G(d)						6–31+ G(d,p)					
2	5	3	–68,8	2939	3019	1	5	3	–86,4	2933	3028
17	4	19	–33,8	2957	3158	17	5	19	–35,0	2857	3115
18	3	21	–53,2	2928	3030	2	22	19	–22,4	2666	2975
6–31+ G(d,p)						6–311 G(d,p)					
1	5	3	–86,4	2933	3028	1	5	3	–60,6	2778	3055
17	5	19	–34,6	2855	3115	17	9	18	–28,2	2931	3049
18	3	21	–48,3	2898	3012	18	6	19	–1,3	2884	2983
2	22	19	–22,3	2666	2975	2	22	19	11,1	2890	2984
6–311++ G(d,p)						6–311+ G(d,p)					
1	4	3	–89,3	2839	3076	1	4	3	–89,0	2839	3077
17	8	18	–22,3	2968	3074	17	8	18	–22,3	2968	3073
1	21	19	–37,8	2839	3096	1	21	19	–37,7	2839	3096
6–311+G(d)						6–311G(d)					
1	21	19	–37,2	2895	3133	1	4	3	–84,6	2895	3118

*Примечание.* Индексы i, j, k – нумеруют нормальные координаты (i – основной тон, j+k – составной);  $F_{ijk}$  – кубическая силовая постоянная;  $\nu_1, \nu_2$  – положения взаимодействующих уровней после снятия квазивырождения.

Для базисов 6–311 G(d) и 6–311+ G(d) такое смещение имеет место для симметричного (Ag) валентного колебания связей ОН, что хорошо согласуется с предложенным теоретическим отнесением ( $3162 \text{ см}^{-1}$ ) в монографии [6]. Антисимметричное (Bu) колебание связи ОН хорошо воспроизводится базисами 6–311 G(d) и 6–311+ G(d). Если выбирать общий базис, то предпочтение следует отдать базисам 6–311+ G(d,p) или 6–311++ G(d,p).

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

Отметим, что в технологии Gaussian – 03 состояние  $\nu_1$  трактуется как фундаментальное состояние, а  $\nu_2$  как обертоное. Этот факт надо учитывать при обработке результатов модельных расчетов и их сопоставлении с экспериментом.

### Библиографический список

1. *Бабков, Л. М.* Спектроскопия молекулярных кристаллов с водородными / Л. М. Бабков, Г. А. Пучковская, С. П. Макаренко, Т. А. Гаврилко. – Киев : Наукова думка, 1989. – 159 с.
2. *Гречухина, О. Н.* Использование информационной технологии Gaussian в моделировании адиабатических потенциалов кислородосодержащих соединений / О. Н. Гречухина, А. М. Лихтер, П. М. Элькин // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2009. – № 2 (6). – С. 37–45.
3. *Джалмухамбетова, Е. А.* Моделирование геометрической структуры и спектров димеров с водородной связью / Е. А. Джалмухамбетова, В. И. Коломин, М. Д. Элькин // Южно-российский вестник геологии, географии и глобальной энергии. – 2006. – № 5 (18). – С. 107–117.
4. *Минкин, В. И.* Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. И. Симкин, Р. М. Мендяев. – Ростов н/Д : Феникс, 1997. – 386 с.
5. *Пулин, В. Ф.* Исследование динамики молекулярных соединений различных классов / В. Ф. Пулин, М. Д. Элькин, В. И. Березин. – Саратов : СГТУ, 2002. – 546 с.
6. *Свердлов, Л. М.* Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970. – 550 с.
7. *Элькин, М. Д.* Информационные модели модели галоидозамещенных бензальдегида / М. Д. Элькин, О. В. Колесникова, О. Н. Гречухина // Вестник СГТУ. – 2008. – № 3 (35), вып. 2. – С. 74–80.
8. *Элькин, М. Д.* Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия СГТУ. – 2008. – Т. 8, № 2 – С. 24–30.
9. *Элькин, П. М.* Квантовомеханический анализ эффектов ангармоничности в многоатомных молекулах / П. М. Элькин. – Саратов, 2005. – 176 с.
10. *Элькин, П. М.* Теоретический анализ таутомерных форм пурина / П. М. Элькин, О. В. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // Журнал прикладной спектроскопии. – 2008. – Т. 75, № 1. – С. 23–27.
11. *Fernandez, L. E.* The vibrational properties of formic acid as monomer and dimer: a DFT study / L. E. Fernandez, A. C. G. Marigliano, E. L. Varetti // Vibrational Spectroscopy. – 2005. – № 37 (2). – P. 179–187.
12. *Flakus, H. T.* A systematic study of polarized IR spectra of the hydrogen bond in formic acid crystals / H. T. Flakus, B. Stachowska // Chemical Physics. – 2006. – Vol. 330 (1). – P. 231–244.
13. *Frisch, M. J.* Gaussian 03, Revision B.03; Gaussian / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburgh : Gaussian Inc., 2003.
14. *Matanovic, I.* Theoretical modeling of the formic acid dimer infrared spectrum: Shaping the O-H stretch band / I. Matanovic, N. Doslic // Chemical Physics. – 2007. – Vol. 338 (2). – P. 121–126.
15. *Olbert-Majkut, A.* Raman spectroscopy of formic acid and its dimers isolated in low temperature argon matrices / A. Olbert-Majkut, J. Ahokas, J. Lundell, M. Pettersson // Chemical Physics Letters. – 2009. – Vol. 468 (4). – P. 176–183.