

7. *Frisch, M. J.* Gaussian 03, Revision B.03; Gaussian / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel [et al]. – Pittsburgh : Gaussian Inc., 2003.

8. *Inscore, F.* Characterization of chemical warfare G-agent hydrolysis products by surface-enhanced Raman spectroscopy / F. Inscore, A. Gift, P. Maksymiuk, S. Farquharson // SPIE-2004-5585. – 2004. – P. 46-52.

9. *Nielsen, H. H.* The vibration-rotation energies of molecules and their spectra in the infrared // Handbook der Physik. – 1957. – Vol. 37, № 1. – P. 173-313.

УДК 539.193/.194;535/33/34

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ. 2. ГЛИКОЛЕВАЯ КИСЛОТА

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

Проведены модельные расчеты колебательных состояний димера гликолевой кислоты. Апробирована методика учета ангармонических резонансов.

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

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

Подробное экспериментальное и теоретическое исследование колебательных состояний мономера гликолевой кислоты, проведенное в работе [8], основано на применении схемы решения обратных колебательных задач [5], недостатки которой подробно описаны в диссертации [1].

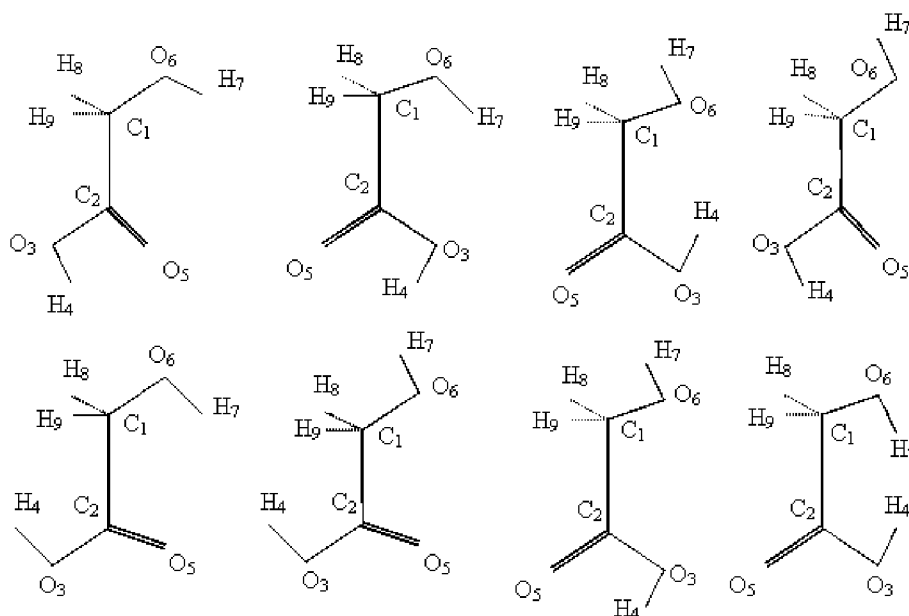


Рис. Ротамеры гликолевой кислоты

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Как видно из рис., мономер гликолевой кислоты теоретически допускает восемь возможных конформаций (ротамеров), связанных с вращением карбоксильной группы COOH относительно фрагмента CH_2OH вокруг связи C_1C_2 , и конформации связи OH в указанном фрагменте и карбоксильной группе. Поэтому для каждой исходной геометрии (ротамера) при решении обратной колебательной задачи будет определена своя система гармонических силовых постоянных. И это при условии, что экспериментально определенный набор фундаментальных состояний является достоверным. Как видно из работы [8], предлагаемые отнесения следует считать спорными. В такой ситуации могут возникнуть известные трудности с построением структурно-динамических моделей димеров соединения.

Однако имеется возможность построить структурно-динамические модели различных ротамеров гликолевой кислоты, основываясь на результатах расчета геометрии и параметров адиабатического потенциала неэмпирическими квантовыми методами. Такой подход в настоящее время доминирует в теоретических методах оптической физики.

Реальными предсказательными возможностями обладают гибридные методы функционала плотности, в частности, метод DFT/B3LYP, реализованный в компьютерной технологии Gaussian [7]. Открытым остается вопрос о выборе базиса. Им определяется алгоритм математического решения ангармонической задачи. Это или обычная теория возмущения, или известная процедура анализа резонансов Ферми [4]. Подробно методика анализа ангармонических резонансов применительно к мономерам и димерам карбоновых кислот рассмотрена в работах [3, 6].

Необходимо, однако, учитывать и известный недостаток упомянутой компьютерной технологии: ненадежность применяемых численных методов в анализе низкочастотных колебаний, особенно для так называемых крутильных колебаний, определяющих взаимное положение отдельных фрагментов соединения относительно друг друга (внутреннее вращение в молекуле). Нередко такие колебания не воспроизводятся технологией Gaussian (расчет выдает отрицательные значения частот колебаний).

Если по абсолютной величине значения указанных отрицательных частот колебаний превышает 50 см^{-1} , то этот факт дает основание считать исследуемую конформационную модель неприемлемой, если численный эксперимент приводит к искаженным значениям ангармонических постоянных, порядок величины которых выходит за границы, предусмотренной адиабатической теорией возмущения Борна-Оппенгеймера [2].

Анализ геометрии и параметров адиабатического потенциала для ротамеров гликолевой кислоты осуществлялся для двенадцати базисных наборов метода DFT-B3LYP: от 6-31 G(d) до 6-311++ G(d,p).

При таком подходе имеется возможность получить сравнительную оценку ангармонических силовых постоянных в различных базисах, сделать вывод о возможности предсказательных расчетов колебательного спектра в гармоническом приближении теории молекулярных колебаний [2], определиться с выбором величины энергетической щели для резонирующих колебательных состояний, а следовательно, и схемой анализа ангармонического смещения колебательных состояний [3, 6].

Моделирование структуры и колебательных состояний. Оптимизация геометрии всех восьми ротамеров гликоликовой кислоты дают следующие результаты: $R_{\text{CC}} = 1,51\text{--}1,53 \text{ \AA}$; $R_{\text{COK}} = 1,34\text{--}1,36 \text{ \AA}$; $R_{\text{C=O}} = 1,19\text{--}1,21 \text{ \AA}$; $R_{\text{OHK}} = 0,97\text{--}0,98 \text{ \AA}$; $R_{\text{OH}} = 0,96\text{--}0,97 \text{ \AA}$; $R_{\text{CH}} = 1,09\text{--}1,1 \text{ \AA}$; $A_{\text{CCO}} = 109,3\text{--}120,2^\circ$; $A_{\text{COC}} = 119,9\text{--}123,8^\circ$; $A_{\text{CCO}} = 119,8\text{--}126,8^\circ$; $A_{\text{COHK}} = 106,8\text{--}112,5^\circ$; $A_{\text{COH}} = 105,3\text{--}112,9^\circ$; $A_{\text{CCH}} = 105,3\text{--}108,3^\circ$; $D(8, 1, 2, 3) = 56,3\text{--}58,6$.

Выбор базиса практически не влияет на расчетные значения длин валентных связей. Расхождение в пределах $0,02 \text{ \AA}$ для валентных углов в зависимости от базиса формально достигает 6° , однако для подобных углов оно не превышает 3° . На кинематическую часть модельного гамильтониана указанные расхождения не оказывают заметного влияния.

Таблица 1

Интерпретация фундаментальных состояний Ротамера 7 гликолевой кислоты

Тип сим	Форма колеб	ν _{exp} * [1]	Минимум					Максимум				
			ν _h	ν _m	ν _{anh}	ИК	КР	ν _h	ν _m	ν _{anh}	ИК	КР
A'	q _{OHk}	3576	3710	3526	3512	32,3	63,5	3794	3603	3598	60,2	77,3
A'	q _{OH}	3575	3634	3456	3449	52,4	37,5	3722	3536	3535	88,0	42,5
A'	q _{CH2}	2928	2971	2842	2749	40,8	117	3005	2873	2875	45,8	137
A'	Q _{C=O}	1773 с	1841	1778	1806	204	10,7	1872	1807	1837	267	17,1
A'	β _{CH2}	1451 сл	1491	1445	1450	6,00	10,1	1534	1486	1489	7,72	13,4
A'	β _{CH2}	1439 сл	1444	1400	1407	7,80	3,40	1486	1439	1439	24,2	7,04
A'	β _{COHk}	1332 ср	1306	1267	1254	384	0,12	1342	1302	1299	443	1,19
A'	β _{COH}	1264 сл	1279	1242	1248	41,0	2,79	1311	1272	1280	100	3,64
A'	Q _{COk}	1143 ср	1160	1127	1134	3,72	7,27	1194	1160	1169	6,42	9,79
A'	Q _{CO}	1090 с	1113	1082	1080	145	0,67	1140	1108	1105	180	1,40
A'	Q _{CC}	853 сл	860	838	833	1,01	4,24	866	844	850	1,47	4,97
A'	β _{CCO}	661 сл	657	641	643	12,0	2,05	666	650	670	14,3	2,29
A'	γ _{OCO}	467 сл	467	457	461	0,58	3,59	474	463	470	0,78	4,37
A'	β _{CCO}	269 сл	283	278	275	30,6	0,19	294	288	285	32,0	0,24
A''	q _{CH2}	–	2990	2859	2833	21,1	75,4	3028	2895	2865	40,3	83,3
A''	β _{CH2}	1231 о.сл	1251	1215	1235	1,07	7,03	1270	1233	1255	2,42	13,3
A''	β _{CH2}	1018 о.сл	1029	1001	1007	0,32	0,17	1051	1022	1026	0,89	0,39
A''	ρ _{Ohk}	620 с.	567	554	557	0,00	0,51	576	563	569	0,74	0,87
A''	ρ _{CC}	495 сл	425	415	412	149	0,89	463	452	450	178	2,26
A''	ρ _{OH}	280 ср	320	313	238	46,6	0,00	359	351	383	82,8	1,56
A''	χ _{CC}	152	75	73	107	5,90	0,05	91	90	145	10,9	0,10

Таблица 2

Интерпретация фундаментальных состояний мономеров гликолевой кислоты (базисы 6-311G (d,p) 6-331+G(d,p), 6-311++G(d,p))

Тип сим	Форма колеб	ν_{exp}^* [1]	Ротамер_1								Ротамер_4							
			Минимум				Максимум				Минимум				Максимум			
			ν_h	ν_{anh}	ИК	КР	ν_h	ν_{anh}	ИК	КР	ν_h	ν_{anh}	ИК	КР	ν_h	ν_{anh}	ИК	КР
A'	ρ_{OHk}	3576	3756	3557	65,3	101	3756	3559	74,8	108	3767	3578	62,0	98,4	3767	3569	75,8	104
A'	ρ_{OH}	3575	3741	3558	74,0	40,4	3749	3562	84,7	45,9	3851	3655	40,6	86,0	3853	3690	50,4	90,7
A'	ρ_{CH_2}	2928	3004	2902	29,6	134	3016	2952	31,0	140	2981	2851	33,9	125	2995	3007	35,7	132
A'	$\rho_{\text{C=O}}$	1773 с	1807	1773	288	6,69	1821	1787	326	12,3	1850	1787	292	7,44	1865	1829	330	13,6
A'	β_{CH_2}	1451 сл	1486	1443	5,57	11,3	1495	1450	10,5	12,0	1491	1445	6,33	9,46	1500	1459	10,9	10,7
A'	β_{CH_2}	1439 сл	1456	1411	8,21	1,87	1469	1422	19,5	3,00	1453	1409	19,4	1,90	1461	1416	23,1	2,72
A'	β_{COHk}	1332 ср	1339	1319	112	3,48	1358	1347	119	4,72	1315	1276	9,03	1,66	1332	1350	11,9	2,51
A'	β_{COH}	1264 сл	1282	1242	29,6	3,16	1296	1248	37,6	3,94	1231	1195	18,3	4,79	1246	1222	23,8	6,46
A'	ρ_{Cok}	1143 ср	1174	1130	137	2,25	1181	1141	148	2,50	1147	1115	106	3,27	1153	1122	118	4,81
A'	ρ_{CO}	1090 с	1106	1071	222	1,85	1113	1083	245	1,94	1097	1066	345	1,24	1105	1065	375	1,47
A'	ρ_{CC}	853 сл	858	838	39,5	6,40	859	840	40,4	7,46	842	820	1,96	8,43	846	829	2,10	9,62
A'	β_{CCO}	661 сл	649	640	15,9	4,16	653	644	18,0	4,45	628	613	43,5	2,37	631	628	46,5	2,47
A'	γ_{OCO}	467 сл	471	463	25,1	2,04	473	464	25,3	2,21	472	461	7,81	1,73	474	469	7,88	1,90
A'	β_{CCO}	269 сл	278	261	8,87	0,07	283	265	8,91	0,11	266	261	2,06	0,17	266	265	2,66	0,19
A''	ρ_{CH_2}	–	3026	2833	13,0	76,3	3040	2861	22,7	80,7	3009	2877	20,6	71,0	3024	2880	30,7	72,5
A''	β_{CH_2}	1231 о.сл	1245	1216	0,23	6,86	1251	1227	0,31	8,86	1255	1218	0,13	7,10	1260	1229	0,23	9,05
A''	β_{CH_2}	1018 о.сл	1033	1007	1,85	0,10	1042	1016	2,09	0,24	1030	1002	0,03	0,01	1038	1008	0,13	0,12
A''	ρ_{OHk}	620 с.	644	619	128	0,15	660	636	131	1,40	638	623	109	0,12	656	619	115	1,12
A''	ρ_{CC}	495 сл	502	486	7,07	1,78	504	490	13,0	3,19	505	493	19,5	2,14	511	493	33,2	4,56
A''	ρ_{OH}	280 ср	295	235	76,5	0,01	299	283	93,2	1,20	156	153	101	1,19	213	35	118	3,01
A''	χ_{CC}	152*	59	114	17,9	0,09	66	160	19,9	0,17	55	54	15,4	0,50	72	67	38,8	0,68

Примечание. Колебание 152 см^{-1} следует интерпретировать как колебание ρ_{OH} в ротамере 4.

ПРИКАСПИЙСКИЙ ЖУРНАЛ:

управление и высокие технологии № 1 (9) 2010

Положение фундаментальных полос определяют параметры адиабатического потенциала. Для ротамеров 2, 3, 5, 6, 8 модельные расчеты приводят к большим отрицательным значениям частоты внутреннего вращения, что, как сказано выше, дает основание считать такую модель молекулы нереальной. Кроме того, расчетные значения фундаментальных колебаний для низкочастотного диапазона ($< 600 \text{ см}^{-1}$) не согласуются с экспериментальными данными по колебательным спектрам. Поэтому далее такие модели не рассматриваются.

Таблица 3

Интерпретация колебательных состояний димера гликоликовой кислоты

Форма колеб.	Минимум					Максимум				
	ν_h	ν_m	ν_{anh}	ИК	КР	ν_h	ν_m	ν_{anh}	ИК	КР
q_{OH}	3759	3571	3568	18,3	107	3852	3656	3599	42,9	162
q_{OH}	3675	3493	3485	20,9	40,1	3851	3655	3594	75,1	150
q_{OHk}	3162	3019	2872	2034	0,03	3301	3148	2961	337	101
q_{OHk}	3011	2879	2708	0,33	149	3160	3018	2802	745	493
q_{CH2}	3011	2879	2737	20,4	18,5	3043	2908	2879	48,9	89,6
q_{CH2}	3011	2879	2876	6,66	71,7	3032	2899	2878	32,5	135
q_{CH2}	2983	2853	2787	29,9	0,03	3020	2888	2850	66,2	141
q_{CH2}	2951	2823	2818	0,01	114	3006	2874	2854	845	304
$Q_{C=O}$	1765	1706	1750	652	0,00	1823	1761	1783	749	2,62
$Q_{C=O}$	1709	1653	1678	0,00	11,1	1776	1716	1710	71,6	21,6
β_{CH2}	1507	1460	1486	0,03	0,15	1544	1495	1494	18,1	31,6
β_{CH2}	1505	1458	1481	0,03	0,02	1535	1486	1492	52,9	31,3
β_{CH2}	1489	1442	1468	0,00	9,76	1524	1476	1473	13,3	26,2
β_{CH2}	1479	1433	1459	47,4	0,00	1509	1462	1463	96,9	14,1
β_{COHk}	1440	1396	1409	0,00	2,61	1461	1416	1417	53,5	22,5
β_{COHk}	1420	1377	1384	16,3	0,00	1447	1403	1405	119	6,92
β_{COH}	1309	1270	1291	108	0,00	1356	1315	1322	460	4,12
β_{COH}	1299	1260	1289	0,02	2,00	1346	1306	1312	215	4,71
β_{CCH2}	1257	1220	1240	0,00	8,20	1298	1259	1291	411	2,25
β_{CCH2}	1247	1211	1217	0,02	7,30	1275	1237	1253	0,25	15,1
Q_{Cok}	1227	1191	1183	8,34	0,02	1267	1230	1251	0,63	13,9
Q_{Cok}	1224	1188	1184	0,54	4,48	1237	1201	1200	205	13,5
Q_{CO}	1114	1083	1102	2,81	2,29	1139	1107	1108	154	5,80
Q_{CO}	1113	1082	1098	64,8	0,07	1138	1106	1107	221	3,33
β_{CCH2}	1040	1012	1023	0,00	0,00	1054	1025	1024	36	0,08
β_{CCH2}	1039	1010	1022	0,00	0,07	1051	1022	1022	10,9	0,40
ρ_{OHk}	963	937	959	179	0,00	1020	992	987	257	0,04
ρ_{OHk}	922	898	916	0,02	0,17	982	956	947	32,9	0,52
Q_{CC}	889	866	879	1,18	0,00	905	881	885	36,5	3,01
Q_{CC}	881	858	872	0,00	10,0	888	864	874	4,70	16,1
β_{CCO}	656	640	675	23,2	0,00	687	670	683	106	2,56
β_{CCO}	637	622	649	0,00	0,75	661	645	671	35,6	2,56
ρ_{CC}	580	567	577	0,00	1,17	593	579	585	0,48	2,63
ρ_{CC}	562	549	551	5,28	0,00	581	568	568	11,2	0,28
O_{CO}	516	505	517	14,4	0,00	545	532	534	45,0	5,35
O_{CO}	501	490	493	0,00	2,63	529	516	519	9,17	8,20
β_{CCO}	328	321	327	28,4	0,00	351	343	376	83,8	0,13
β_{CCO}	296	289	293	0,00	0,35	320	314	312	11,2	1,45
ρ_{OH}	193	190	90	66,3	0,91	302	295	262	211	3,17
ρ_{OH}	188	184	90	39,2	3,38	232	228	331	129	8,10
xx	69	68	72	0,02	0,00	81	79	91	20,8	0,17
xx	32	31	45	0,00	0,00	60	59	117	25,8	0,71

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Численный эксперимент по расчету колебательных состояний ротамеров гликоликовой кислоты представлен в табл. 1, 2. В табл. 1 приведены результаты операции масштабирования колебательных частот по соотношению $\nu_m = \nu_n(av_n + b)$, где $a = -8,4 \cdot 10^{-6}$; $b = 0,9813$. Из таблиц видно, что для ротамера 7 с экспериментом плохо согласуются расчетные значения частот для ряда колебаний карбоксильной группы. Это дает основание предположить, что эксперимент в работе [8] проводился только для ротамеров 1 и 4. Судя по частоте неплоского колебания ρ_{OH} (280 см^{-1}) и приведенной в качестве фундаментальной в работе [8] полосе 152 см^{-1} , такое предположение обосновано, если отнести полосу 152 см^{-1} к неплоскому деформационному колебанию ρ_{OH} в ротамере 4.

Интересным представляется поведение расчетных значений валентных колебаний связей ОН. В реальном спектре они воспринимаются как одна сильная по интенсивности в ИК- и КР-спектрах полоса. Если руководствоваться формами колебаний, для некоторых базисов в гармоническом приближении отнесения в первой и вторых строках табл. 2 могут меняться, а разность частот достигать 15 см^{-1} . В ангармоническом приближении расчетные значения во всех базисах отличаются не более, чем на 3 см^{-1} (табл. 3, ν_{anh}) для ротамеров 1 и 4. Для ротамера 7 эти колебания по частоте заметно отличаются ($\sim 60 \text{ см}^{-1}$). Поскольку спектры в работе [8] снимались для изолированных мономеров в аргоновых матрицах, то этой разницы достаточно для идентификации мономера.

Анализ результатов численного эксперимента, представленного в таблицах позволяет сделать следующие выводы.

1. Учет ангармонизма колебаний позволяет получить хорошее согласие экспериментальных данных по колебательным спектрам мономеров гликоликовой кислоты в аргоновых матрицах, дать надежную интерпретацию колебательных состояний.

2. Выбор базиса заметно сказывается лишь на смещении валентных колебаниях связей ОН. Интенсивность полос фундаментальных колебаний качественно не меняется. Предпочтение следует отдать базисам 6-311 G (d,p), 6-311G + (d,p), 6-311 G ++ (d,p).

3. Численные методы технологии Gaussian для анализа внутреннего вращения в мономерах гликоликовой кислоты неработоспособны.

Оптимизация геометрии проведена для 7-ми димеров: M1-M1, M1-M4, M1-M7, M4-M4, M4-M7, M7-M7. Изменения по сравнению с мономерами для значений валентных связей составляют максимум $0,04 \text{ \AA}$, для валентных углов достигает $1,6^\circ$, двухгранных – менее $0,8^\circ$. Длины водородных связей попадают в интервал $1,65\text{--}1,71 \text{ \AA}$. Валентные углы для водородных связей меняются в пределах: $A_{C=O\dots H} = 124,3\text{--}125,8^\circ$ и $A_{O\dots H-O} = 179,5\text{--}179,7^\circ$. Влияние базиса за указанные интервалы не выводит.

Как и следовало ожидать, межмолекулярное взаимодействие по типу водородной связи ведет к сильному понижению частоты валентного колебания связи ОН, примыкающей к водородной связи (ν_{OHK}), и резкому повышению частоты неплоского деформационного колебания этой связи (ρ_{OHK}), что является спектральным идентификационным признаком димера карбоновых кислот. На величину $\sim 100 \text{ см}^{-1}$ увеличивается и частота деформационного колебания карбоксильного фрагмента (β_{COHK}). Однако проводить по нему идентификацию димера затруднительно, поскольку близко расположены более интенсивные полосы деформационного колебания фрагмента CH_2 .

Влияние атомного базиса не меняет качественной картины интенсивностей полос спектра, хотя смещение полос для высокочастотной области может достигать $\sim 100 \text{ см}^{-1}$. Впрочем, на интерпретацию фундаментальных колебательных состояний в димерах гликоликовой кислоты этот факт принципиального значения не имеет.

Отсутствие надежных экспериментальных данных для димеров гликоликовой кислоты не позволяет оценить влияние ангармонизма на положение резонирующих состояний в вы-

сокочастотной области спектра, одно из которых есть фундаментальное колебание связи ОН. Однако сопоставление с такими же состояниями для димера уксусной и муравьиной кислот дает основание ориентироваться на полосу $\sim 2950 \text{ см}^{-1}$ и отдать предпочтение базисам 6-311 G(d,p) и 6-311+ G(d,p). Согласно проведенным расчетам, вторая полоса резонирующих состояний смещается в область $3100\text{--}3150 \text{ см}^{-1}$, как это и имело место для муравьиной и уксусной кислот. Это дает основание говорить о характеристичности колебаний карбоксильного фрагмента в димерах карбоновых кислот.

Модельные расчеты позволяют определиться с диапазоном частот колебаний водородной связи. Валентные колебания этой связи ($\nu_{\text{O}\cdots\text{H}}$) попадают в диапазон $130\text{--}165 \text{ см}^{-1}$, плоские деформационные ($\beta_{\text{O}\cdots\text{H}}$) в диапазон $110\text{--}120 \text{ см}^{-1}$, неплоские деформационные ниже 50 см^{-1} . Для последних следует учитывать сделанное выше замечание о возможности численных методов технологии Gaussian в этом частотном диапазоне.

Библиографический список

1. *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.
2. *Браун, П. А.* Введение в теорию молекулярных спектров / П. А. Браун, А. А. Киселев. – Л. : Наука, 1983. – 360 с.
3. *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.
4. *Лисица, М. П.* Резонанс Ферми / М. П. Лисица, А. М. Яремко. – Киев : Наукова думка, 1984. – 250 с.
5. *Свердлов, Л. М.* Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970. – 550 с.
6. *Эрман, Е. А.* Информационная технология Gaussian и структурно-динамические модели кислородосодержащих соединений / Е. А. Эрман, П. М. Элькин, О. Н. Гречухина // Вестник СГТУ. – 2009. – № 2 (39), вып. 2. – С. 108–114.
7. *Frisch, M. J.* Gaussian 03, Revision B.03; Gaussian / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel [et al.]. – Pittsburgh : Gaussian Inc., 2003.
8. *Hollenstein, H. A.* transferable valence force field for polyatomic molecules. A scheme for glycolic acid and methyl glycolate / H. Hollenstein, R. W. Schar, N. Schwizgebel // Spectrochimica Acta. – 1983. – Vol. 29A, № 3 – P. 193–213.
9. *Hollenstein, H.* IR induced conversion of rotamers, matrix spectra, ab initio calculation of conformers, assignment and valence force field of trans glycolic acid / H. Hollenstein, T. K. Na, H. H. Gunthard // J. Molecular structure. – 1986. – Vol. 146. – P. 289–307.