

УДК 539.194

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ
ПИКОЛИНОВОЙ, НИКОТИНОВОЙ И ИЗОНИКОТИНОВОЙ КИСЛОТ**

М.Д. Элькин, Д.М. Нуралиева, А.М. Лихтер, О.Н. Гречухина

В рамках гибридного метода функционала плотности DFT/B3LYP построены структурно-динамические модели пиколиновой, никотиновой и изоникотиновой кислот. Исследовано влияние ангармонизма колебаний, выяснен механизм межмолекулярного взаимодействия.

Ключевые слова: колебательные спектры, пиколиновая, никотиновая, изоникотиновая кислоты, резонансные эффекты, ангармонизм колебаний, межмолекулярное взаимодействие.

Key words: the vibrational spectrums, picolinic, nicotinic and isonicotinic acids, resonance effects, anharmonicity of vibration, intermolecular interaction.

Замещение атома водорода в молекуле пиридина (C_5H_5N) в α -, β -, γ -положениях относительно атома азота шестичленного цикла на карбоксильную группу ($COOH$) приводит к пиколиновой, никотиновой и изоникотиновым кислотам соответственно. Такие соединения принято относить к классу карбоновых кислот. Практическая значимость указанных кислот как биологически активных соединений стала основанием для экспериментального и теоретического анализа их колебательных (ИК- и КР-) спектров авторами работы [12]. Однако исследование ограничено рассмотрением спектрального диапазона $1350-1800\text{ см}^{-1}$, куда попадает лишь одна сильная по интенсивности полоса, интерпретируемая как валентное колебание связи $C=O$ карбоксильной группы. Поэтому использовать данные статьи для идентификации конформеров трех (α -, β -, γ -) изомеров пиридинкарбоксильной кислоты не представляется возможным. Это касается и приведенных в работе [16] экспериментальных данных по КР-спектрам для отдельных частотных диапазонов пиколиновой и никотиновой кислот в твердом состоянии.

Известно, что соединения, содержащие карбоксильный ($X-COOH$) фрагмент, за счет водородных связей легко образуют димеры. Вопрос об интерпретации колебательных спектров даже простейших представителей класса карбоновых кислот до настоящего времени составляет предмет дискуссии. Сошлемся на публикации [9, 10, 13, 15]. Основная тема – сдвиг частот валентного и деформационного колебаний связи OH при образовании димеров. Характер поведения ИК- и КР-полос, интерпретированных как колебания карбоксильной группы для ряда карбоновых кислот (ротамеров и конформеров малоновой, гликоликовой и бензойной кислот), рассмотрен в публикациях [4–5] и в диссертации [2]. Модельные расчеты спектров осуществлены в рамках метода функционала плотности DFT/B3LYP для 12-ти различных атомных базисов: от 6–31 G(d) до 6311++ G(d,p). Указанные расчеты позволили сделать вывод, что влиянием базиса на оптимизацию геометрических параметров можно пренебречь, качественная оценка интенсивностей полос в ИК- и КР-спектрах сохраняется, однако смещение полос валентных колебаний связи $O-H$ может достигать величины $\sim 120\text{ см}^{-1}$. Для интерпретации мономеров этот факт принципиального значения не имеет, в димерах для отдельных базисов может иметь место ангармонический резонанс с обертонами. Методическая сторона применения компьютерной технологии “Gaussian” в предсказательных расчетах кислородосодержащих соединений рассмотрена, к примеру, в публикациях [7–8].

На основании сказанного представляется естественным начать исследование изомеров пиридинкарбоксильной кислоты с построения структурно-динамических моделей мономеров возможных конформеров пиколиновой, никотиновой и изоникотиновой кислот, что и является целью данной публикации.

Модельные расчеты структуры и колебательных состояний. В модельных расчетах предполагалась плоская структура соединений. Только в этом случае имеет место воспроиз-

димось частот крутильных колебаний карбоксильного фрагмента относительно плоскости ароматического кольца.

Оптимизация геометрии мономеров пиколиновой, никотиновой и изоникотиновой кислот в рамках метода функционала плотности дают следующие результаты для длин валентных связей (Å) и валентных углов (°). Для пиридинового остова: $R_{CN} = 1,33-1,34$; $R_{CC} = 1,39-1,40$; $R_{C-C} = 1,48-1,50$; $R_{CH} = 1,08-1,09$; $A_{CNC} = 117,2-118,1$; $A_{NCC} = 123,3-126,6$; $A_{CCC} = 118,4-118,9$; $A_{CCH} = 117,7-123,1$; $A_{CC-C} = 118,6-122,9$. Для карбоксильного фрагмента: $R_{C=O} = 1,20-1,21$; $R_{CO} = 1,34-1,36$; $R_{OH} = 0,97-0,98$; $A_{OCO} = 123,3$; $A_{OCH} = 106,3-107,2$; $A_{CCO} = 123,1-125,8$. Длина водородной связи N...H в первом конформере пиколиновой кислоты ~ 2 Å.

Влияние базиса квантового расчета сказывается на третьем знаке мантииссы для длин связей и втором для валентных углов.

Модельное квантовое уравнение для колебательной подсистемы молекулы во втором порядке теории возмущения имеет вид [14]:

$$2H^{(v)} = v_s(P_s^2 + (Q^s)^2) + F_{srt}Q^sQ^rQ^t + F_{srtu}Q^sQ^rQ^tQ^u, \quad (1)$$

где v_s – частоты гармонических колебаний, cm^{-1} ; Q^a – безразмерные нормальные колебательные координаты, линейно связанные с декартовыми смещениями атомов; F_{srt} и F_{srtu} – кубические и квартичные силовые постоянные. Указанные параметры разложения адиабатического потенциала молекулы позволяет оценить информационная технология «Gaussian – 03» [11].

Решение уравнения (1) методами теории возмущения приводит к известному выражению для энергий колебательных состояний:

$$E^{(v)} = v_s(n_s + g_s/2) + \chi_{sr}(n_s + 1/2)(n_r + 1/2)(1 + 1/2\delta_{sr}) \quad (2)$$

Второе слагаемое выражения (2) позволяет оценить ангармоническое смещение фундаментальных частот колебаний при отсутствии ангармонических резонансов. Сдвиг фундаментальных полос колебаний определяется ангармоническими поправками $X_{ss} = 2\chi_{ss}$ и $X_s = 1/2\chi_{sr}$.

Если пренебречь кориолисовым взаимодействием нормальных колебаний, то выражения для ангармонических постоянных χ_{sr} , приведенные в работе [14], упростятся и примут вид [3]:

$$X_{ss} = 1/4\{6F_{ssss} - 15(F_{sss})^2/v_s - \Sigma(F_{sst})^2/v_r(8v_s^2 - 3v_r^2)/(4v_s^2 - v_r^2)\},$$

$$X_{sr} = 1/4\{F_{ssrr} - 6(F_{sss}F_{srr}/v_s) - 4F_{ssr}^2v_s/(4v_s^2 - v_r^2)\} - (F_{ssk} - (F_{rrk})^2/v_k) -$$

$$- F_{srk}v_k(v_k^2 - v_s^2 - v_r^2)/[(v_s + v_r + v_k)(v_s + v_r - v_k)(v_s - v_r + v_k)(v_s - v_r - v_k)] \quad (3)$$

Резонансные знаменатели в выражении (3) ограничивают область их применения. При наличии резонансного взаимодействия между фундаментальными и обертовыми колебательными состояниями применяется схема учета резонансов Ферми [1]:

$$2E = (v_s + v_r + v_k) \pm \{(F_{srk})^2(1 + \delta_{rk})/2 + \{(v_s - v_r - v_k)^2\}^{0.5}} \quad (4)$$

Подробно данный вопрос рассмотрен в публикациях [1], где предложена методика учета ангармонических резонансов в кислородосодержащих соединениях при использовании технологии «Gaussian – 03».

Результаты модельных расчетов колебательных состояний возможных конформеров изомеров пиридинкарбоксильной кислоты в ангармоническом приближении теории молекул представлены в табл. 1–3.

Во втором столбце табл. 1 звездочкой помечены экспериментальные данные из работы [12], остальные данные относятся к соответствующим метилзамещенным пиридина – α -, β -, γ -пиколинам [6]. Хорошее совпадение этих данных с результатами неэмпирических квантовых расчетов фундаментальных колебаний пиридинового остова пиридинкарбоксильной кислоты позволяют сделать вывод о применимости теории характеристических колебаний монозамещенных пиридина, предложенной в диссертации. Подтвержден факт низкой интенсивности полос диапазона $\sim 800-1000$ cm^{-1} в ИК- и КР-спектрах, интерпретированных как неплоские деформационные колебания связей СН пиридинового остова. Все неплоские колебания изомеров пиридинкарбоксильной кислоты имеют слабую интенсивность в КР-спектре.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Таблица 1

Интерпретация колебательного спектра изоникотиновой кислоты

Форма колебаний	$\nu_{\text{экс}} [2,16]$	ν_{Γ}	$\nu_{\text{м}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
Плоские колебания (Тип симметрии A')						
$\nu_{\text{ОН}}$	–	3740	3553		62,1	153
ρ	3090	3220	3073		2,96	94,3
ρ	3060	3212	3066		3,59	85,4
ρ	3054	3162	3020		12,1	135
ρ	3035	3158	3016		38,1	111
$\nu_{\text{C=O}}$	1712*	1814	1752		296	41,6
$\nu_{\text{C}\beta}$	1616*	1641	1588		4,01	34,8
$\nu_{\text{C}\beta}$	1597*	1607	1556		23,8	2,13
β	1478*	1530	1481		2,18	3,22
β	1412*	1447	1403		33,9	0,97
$\beta_{\text{O}}, \nu_{\text{C=C}}, \nu_{\text{C=O}}$	1370*	1385	1343		89,7	7,39
β	1365	1360	1319		6,17	1,42
$\nu_{\text{C=N}}, \nu_{\text{C=O}}$	1220	1281	1243		5,38	8,19
β	1212	1247	1210		18,6	5,84
$\beta_{\text{C=O}}$	–	1215	1180		243	26,5
$\nu_{\text{C=O}}, \beta$	1114	1128	1096		81,5	2,66
β	1068	1104	1073		13,2	0,82
β	–	1092	1061		23,7	1,23
γ	994	1012	985		5,19	27,1
γ	801	784	764		2,52	11,4
γ	669	684	667		1,22	7,31
$\gamma_{\text{C=O}}, \gamma$	–	640	625		71,6	0,68
$\beta_{\text{C=O}}, \beta_{\text{C=C}}$	514	498	486		8,06	0,86
γ	341	378	370		3,14	3,85
$\beta_{\text{C=C}}$	211	211	207		1,30	0,00
Неплоские колебания (Тип симметрии A'')						
ρ	972	1006	979		0,08	0,34
ρ	–	995	968		0,34	0,97
ρ	872	900	877		0,32	0,98
$\rho, \nu_{\text{C=O}}$	–	872	850		5,65	0,55
ρ, χ	799	779	759		49,1	0,02
$\chi, \nu_{\text{ОН}}$	728	738	719		75,9	0,13
$\nu_{\text{ОН}}$	–	631	616		56,3	8,53
$\chi, \nu_{\text{C=C}}$	485	451	441		25,5	0,03
χ	384	391	382		0,20	0,01
$\nu_{\text{C=C}}$	–	158	155		0,53	1,01
xx	–	69	67		0,90	1,10

Примечание. Частоты колебаний в см^{-1} , интенсивность в ИК-спектрах в Км/Моль, в КР-спектрах – $\text{\AA}^4/\text{a.e.m.}$

Интерпретация колебаний карбоксильного фрагмента также совпадает с интерпретацией, предложенной в работах [2, 4–5]. Исключение составляет частота валентного и неплоского колебаний связи ОН первого конформера пиколиновой кислоты. Это результат наличия внутренней водородной связи между атомом водорода карбоксильного фрагмента и атомом азота ароматического кольца. Соответствующие интенсивные полосы в ИК-спектрах надежно идентифицируют указанный конформер пиколиновой кислоты.

Для спектральной идентификации никотиновой кислоты можно использовать полосу $\sim 1600 \text{ см}^{-1}$, интерпретированную как симметричное колебание связей шестичленного цикла и имеющую заметную интенсивность в ИК- и КР-спектрах, а также полосу $\sim 730 \text{ см}^{-1}$, интерпретированную как неплоское деформационное колебание связей СН (ρ) и СС (χ) пиридинового остова молекул.

Интерпретация колебательного спектра конформеров никотиновой кислоты

Форма колебаний	$\nu_{\text{экс}}$ [2,16]	Конформер_1				Конформер_2			
		ν_{Γ}	ν_{M}	ИК	КР	ν_{Γ}	ν_{M}	ИК	КР
Плоские колебания (Тип симметрии A')									
ρ_{OH}	–	3740	3553	62,1	158	3741	3554	60,0	163
ρ	3090	3208	3062	6,15	118	3215	3069	3,85	97,3
ρ	3060	3191	3046	0,84	162	3190	3045	12,3	177
ρ	3054	3189	3044	18,8	20,3	3186	3042	8,87	26,2
ρ	3035	3155	3013	20,6	121	3156	3014	19,6	118
$\rho_{\text{C=O}}$	1708*	1807	1746	338	49,5	1810	1749	337	48,7
ρ, β	1595*	1639	1586	55,4	51,5	1638	1585	61,5	54,8
ρ, β	1583*	1616	1564	10,2	3,83	1616	1564	15,6	6,71
β	1488*	1517	1470	4,25	2,22	1514	1466	4,30	0,98
β	1449*	1456	1411	37,7	2,52	1462	1417	20,4	1,51
$\beta_{\text{O}}, \rho_{\text{CC}}, \rho_{\text{CO}}$		1390	1348	85,1	6,83	1383	1341	80,7	7,59
β	1370*	1367	1326	12,7	0,97	1365	1324	3,89	0,07
ρ, β	1262	1294	1256	1,57	4,75	1293	1255	5,80	3,39
$\beta_{\text{O}}, \rho_{\text{CC}}$	1227	1234	1198	100	13,6	1231	1195	10,5	13,5
$\beta, \beta_{\text{O}}, \rho_{\text{CC}}$	1188	1216	1181	130	18,2	1219	1184	218	19,3
β	1106	1137	1105	3,25	2,94	1152	1119	27,3	0,59
ρ_{CO}, β		1124	1093	162	0,89	1112	1081	132	1,30
ρ, β	1043	1059	1030	2,67	27,9	1061	1031	2,88	29,1
γ	1025	1043	1015	14,3	5,21	1042	1013	39,8	5,26
γ	810	793	773	12,3	14,5	794	773	13,7	13,2
$\gamma_{\text{OCO}}, \gamma$	–	663	647	43,9	0,81	660	644	47,1	4,31
$\gamma_{\text{N}}, \gamma$	628	629	614	11,1	5,57	632	617	5,59	2,57
$\beta_{\text{CCO}}, \beta_{\text{CCC}}$		495	483	9,62	0,83	498	487	6,75	1,33
γ	385	387	379	6,30	4,12	386	378	5,89	3,79
$\beta_{\text{CCC}}, \beta_{\text{CCO}}$	216	211	206	3,16	0,12	212	208	0,17	0,12
Неплоские колебания (Тип симметрии A'')									
ρ	984	1014	986	0,14	0,05	1010	983	0,07	0,25
ρ	942	997	970	0,93	1,18	995	969	0,92	1,14
ρ	919	963	937	0,21	0,61	966	941	0,15	0,45
ρ	819	853	831	1,21	0,54	849	827	0,77	0,35
$\rho_{\text{OH}}, \rho_{\text{C=O}}, \rho$	788	765	746	90,5	0,04	764	744	91,9	0,50
χ, ρ	710	725	707	13,2	0,47	724	706	13,3	0,47
ρ_{OH}		625	610	100	7,75	628	613	100	7,38
χ, ρ_{CC}	454	434	424	0,01	1,09	430	420	0,51	1,36
χ, ρ_{CC}	398	393	384	5,78	0,08	394	386	3,16	0,02
ρ_{CC}, χ	–	160	156	0,15	2,32	160	157	0,16	2,33
$\chi\chi$	–	71	70	3,05	0,66	71	69	0,01	0,57

В изоникотиновой кислоте и особенно в пиколиновой кислоте интегральная интенсивность этой полосы в ИК-спектре, как следует из расчетов, существенно выше. Идентификация изомеров по остальным полосам в колебательных спектрах изомеров, в том числе и полосам, интерпретированных как колебания карбоксильного фрагмента, затруднена. Сложность заключается в наложении контуров близких полос ($\Delta \sim 25 \text{ см}^{-1}$).

Исключение составляет интенсивная в ИК-спектре полоса $\sim 630 \text{ см}^{-1}$, которая интерпретируется как неплоское деформационное колебание связи ОН. В изоникотиновой кислоте интенсивность этого колебания вдвое ниже.

**СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Таблица 3

Интерпретация колебательного спектра конформеров пиколиновой кислоты

Форма колеб.	$\nu_{\text{жс}}$ [2,16]	Конформер_1			Конформер_2			Конформер_3		
		$\nu_{\text{м}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{м}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{м}}$	ИК	КР
Плоские колебания (Тип симметрии A')										
$\nu_{\text{ОН}}$	–	3396	111	41,2	3547	52,1	162	3557	55,9	160
q	3090	3072	1,57	99,1	3071	2,06	96,9	3075	1,73	96,7
q	3060	3055	16,3	170	3051	21,1	175	3050	21,8	180
q	3054	3038	11,6	85,5	3035	12,7	87,2	3034	11,9	86,6
q	3035	3025	12,3	95,5	3015	18,7	106	3011	19,9	109
$Q_{\text{C=O}}$	1717*	1784	288	51,2	1738	286	42,4	1775	305	57,9
Q, β	1608*	1587	8,57	34,2	1577	9,66	53,4	1574	5,67	54,1
Q, β	1595*	1568	10,8	15,9	1568	14,7	9,64	1569	25,7	5,19
β ,Q	1455*	1460	13,1	2,11	1461	5,77	2,04	1460	0,77	2,46
β ,Q	1439*	1436	75,7	6,50	1428	16,9	9,13	1424	15,5	2,61
$\beta_{\text{O}}, Q_{\text{CO}}$	1370*	1375	508	7,85	1362	94,9	8,71	1335	55,6	8,14
β ,Q	1291	1288	12,6	1,31	1288	1,40	1,92	1293	6,17	1,60
β ,Q		1277	1,32	4,76	1266	1,04	1,45	1266	6,96	0,74
Q_{CC}, β	1233	1214	101	30,4	1199	202	32,8	1178	139	31,9
β	1149	1144	2,13	3,65	1143	1,17	4,40	1147	2,83	4,08
Q_{CO}	1099	1109	35,5	0,84	1106	140	0,22	1112	149	2,26
β		1086	3,76	2,09	1084	30,7	1,24	1074	91,1	1,26
β ,Q	1050	1034	11,5	10,7	1036	13,7	12,6	1038	5,78	13,1
γ	998	994	8,08	21,7	987	8,16	23,5	986	7,04	22,6
γ	800	786	6,58	8,81	775	10,9	11,1	769	5,83	11,7
γ_{OCO}	–	662	7,44	1,72	646	54,8	2,94	643	54,3	0,60
γ	629	622	7,39	2,87	617	21,2	3,42	617	10,0	5,68
β_{CCO}	–	513	5,38	2,40	492	2,61	1,17	483	3,55	0,71
γ	408	381	0,72	3,88	378	4,56	3,26	382	4,13	3,77
β_{CCC}	207	218	15,4	0,31	211	4,87	0,22	217	1,40	0,22
Неплоские колебания (Тип симметрии A'')										
ρ	972	995	0,16	0,15	991	0,11	0,20	988	0,00	0,22
ρ	940	962	0,33	0,16	962	0,63	0,22	960	0,35	0,35
ρ	919	906	0,67	0,74	905	0,61	0,82	900	0,18	0,66
ρ , χ	788	816	8,67	0,42	829	0,58	0,26	826	0,88	0,33
ρ , χ	751	749	8,80	1,47	742	46,7	0,69	741	31,6	0,82
ρ , χ		721	92,4	0,81	621	47,6	7,59	605	63,8	7,87
$\rho_{\text{ОН}}$	–	688	77,2	0,75	725	106	0,61	714	106	0,25
ρ , χ	729	688	77,2	0,75	725	106	0,61	714	106	0,25
χ , ρ_{CC}	470	437	1,12	0,36	429	2,41	0,57	430	1,64	0,70
χ	403	412	1,66	0,17	406	5,20	0,32	403	9,91	0,43
ρ_{CC}	–	157	0,30	3,45	152	2,24	2,62	151	2,17	2,70
xx	–	99	4,03	0,46	63	3,31	0,60	51	0,02	0,63

Имеющееся смещение полос и изменение их интенсивностей не предоставляет возможность надежной практической идентификации 2-го и 3-го конформеров пиколиновой кислоты и обоих конформеров никотиновой кислоты.

Как и в исследованных ранее мономерах карбоновых кислот [2, 4–5, 8], влиянием ангармонических резонансов можно пренебречь. Учет ангармонического смещения полос в рамках адиабатической теории возмущения второго порядка хорошо согласуется с результатами процедуры масштабирования частот нормальных колебаний, предложенной в диссертации [2]. Ангармонизму в большей степени подвержены валентные колебания связей ОН и СН, где смещение достигает $\sim 150 \text{ см}^{-1}$, а также плоские деформационные колебания этих связей (ангармоническое смещение полос достигает $\sim 60 \text{ см}^{-1}$).

Представляет интерес оценка ангармонических параметров адиабатического потенциала, связанных с валентным колебанием связи ОН, поскольку при образовании димера частота указанного колебания понижается на величину $\sim 600 \text{ см}^{-1}$ и попадает в диапазон валентных колебаний связей СН. В качестве примера остановимся на никотиновой кислоте.

Значения кубических и квартичных силовых постоянных достигают величины порядка самих частот фундаментальных колебаний. Это касается $F_{qqq} = -2561 \text{ см}^{-1}$, $F_{qpp} = 2027 \text{ см}^{-1}$, $F_{qqqq} = 1486 \text{ см}^{-1}$, $F_{qqpp} = -1828 \text{ см}^{-1}$. Выбор конформера на указанные значения не влияет. Символ ρ интерпретирует неплоское валентное колебание связи ОН. Однако в формулах для ангармонических силовых постоянных χ_{sr} соответствующие слагаемые нивелируют друг друга, что и отражается на суммарной величине ангармонического смещения полос.

Проведенные модельные расчеты параметров адиабатического потенциала изомеров пиридинкарбоксильной кислоты позволяют сделать вывод о возможности использования методов функционала плотности DFT/B3LYP в предсказательных расчетах колебательных состояний соединений, содержащих карбоксильные фрагменты.

Библиографический список

1. *Герцберг, Г. Х.* Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг. – М. : ИЛ, 1949. – 647 с.
2. *Гречухина, О. Н.* Моделирование молекулярной динамики в димерах карбоновых кислот : дис. ... канд. физ.-мат. наук / О. Н. Гречухина. – Астрахань, 2009. – 156 с.
3. *Пулин, В. Ф.* Исследование динамики молекулярных соединений различных классов / В. Ф. Пулин, М. Д. Элькин, В. И. Березин. – Саратов : Изд-во СГТУ, 2002. – 564 с.
4. *Элькин, Л. М.* Моделирование межмолекулярного взаимодействия в димерах карбоновых кислот / Л. М. Элькин, А. М. Лихтер, О. Н. Гречухина // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2009. – № 1 (5). – С. 52–58.
5. *Элькин, М. Д.* Моделирование адиабатических потенциалов карбоновых кислот / М. Д. Элькин, Т. А. Шальнова, О. В. Колесникова // Вестник СГТУ. – 2009. – № 1 (37), вып. 1. – С. 76–81.
6. *Элькин, М. Д.* Теория характеристических колебаний замещенных пиридина : дис. ... канд. физ.-мат. наук / М. Д. Элькин. – Саратов, 1973. – 161 с.
7. *Элькин, П. М.* Моделирование структуры и колебательных спектров кислородосодержащих соединений / П. М. Элькин, Т. А. Шальнова, О. Н. Гречухина // Известия СГТУ. – 2009. – Т. 9, № 1. – С. 24–30. – (Новая серия: Физика).
8. *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.
9. *Durlak, P.* Cal-Parinello molecular dynamics and density functional Theory simulation of infrared spectra for acetic acid monomers and cyclic dimers / P. Z. Durlak Latajka // Chemical Physics Letters. – 2009. – Vol. 477. – P. 249–264.
10. *Flakus, H. T.* Polarized IR spectra of hydrogen bond in acetic acid crystals / H. T. Flakus, A. Tyl // Chemical Physics. 2007. – Vol. 336. – P. 36–50.
11. *Frisch, M. J.* Gaussian 03. Revision B.03 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburg PA : Gaussian Inc., 2003.
12. *Koczon, P.* Experimental and theoretical IR and Raman spectra of picolinic, nicotinic and isonicotinic acids / P. Koczon, J. Cz. Domrowolski, W. Lewandowski Mazurek A.P. // J. Mol. Struct. – 2003. – Vol. 655. – P. 89–95.
13. *Matanovic, L.* Theoretical modeling of formic acid dimer infrared spectrum. Shaping the O-H stretch bond / L. Matanovic, N. Doslic // Chemical Physics. – 2007. – Vol. 338. – P. 121–126.
14. *Nielsen, H. H.* The vibration-rotation energies of molecules and their spectra in the infrared // Handbook der Physik. – 1953. – Vol. 37. – P. 173–313.
15. *Olbert-Majrat, A.* Raman spectroscopy of formic acid and its dimers isolated in low temperature argon matrices / A. Olbert-Majrat, J. Ahokas, J. Lundell, M. Pettersson // Chemical Physics Letters. – 2009. – Vol. 468. – P. 176–183.
16. *Park, S. M.* Absorption of picolinic and nicotinic acids on a silver sol surface investigated by Raman spectroscopy / S. M. Park, K. Kim, M. S. Kim // J. Mol. Struct. – 1995. – Vol. 144. – P. 195–203.