

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

3. Jel'kin M. D., Smirnov V. V., Dgalmuhambetova E. A. Alykova O. M., Amantaeva L. S. Model'nye raschety kolebatel'nyh sostojanij izomerov trinitrotoluola [Modeling calculations of oscillatory conditions of trinitrotoluene isomers]. *Prikaspijskij zhurnal: upravlenie i vysokie tehnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2012, no. 1 (17), pp. 118–125.
4. Balachandran V., Lakshmi A., Janaki A. Vibrational spectroscopic study and NBD analysis of 2-chloro-4, 6-diamino-1, 3, 5 triazine using DFT methods. *Recent Research in Science and Technology*, 2011, no. 3 (1), pp. 114–123.
5. Berezin K. V. Theoretical interpretation of the vibrational spectra methylsubstituted S-triazine. *Applied Spectroscopy*, 1998, vol. 65, no. 3, pp. 331–335.
6. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. Gaussian, Pittsburgh PA, 2003.
7. Navarro A., Lopez Gonzalez J. J., Fernandez Gomez M., Marquez F., Otero J. C. Spectra of s-triazine and its halogenated derivatives. Harmonic scaled ab initio force fields for s-triazine, trifluoro-s-triazine and trichloro-s-triazine. *Molecular structure*, 1996, vol. 376, pp. 353–362.
8. Rice B. M. Ab initio and Nonlocal density functional Study of 1,3,5-trinitrotriazine (RDX) conformers. *J. Phys. Chem. A* 1997, vol. 101, no. 13, pp. 8721–8726.
9. Vladimiroff T. A density functional study of s-trinitrobenzene. *Molecular structure*, 1998, vol. 453, pp. 119–122.
10. Vorotyneva V. D., Kuz'mina E. A., Roginskay T. A., Finkel'shtein A. I., Dergunov Yu. I. IR and Raman spectra of sym-triazine derivatives with substituted NH<sub>2</sub>, -OR, NHR. *Applied Spectroscopy*, 1972, vol. 27, no. 2, pp. 285–289.

УДК 539.193

### СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДИМЕРОВ АЗАУРАЦИЛОВ В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

*Эрман Евгений Анатольевич*, кандидат технических наук  
*Стефанова Галина Павловна*, доктор педагогических наук, профессор, первый проректор  
*Джалмухамбетова Елена Азатуллаевна*, кандидат физико-математических наук  
*Гречухина Оксана Николаевна*, старший преподаватель  
*Алыкova Ольга Михайловна*, кандидат педагогических наук  
*Равчеева Наталья Александровна*, преподаватель

Астраханский государственный университет  
414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а  
E-mail: kof@aspu.ru, kof1@aspu.ru

*На основании неэмпирических квантовых расчетов геометрической и электронной структуры предложены структурно-динамические модели 5- и 6- азаурацилов. В данной работе определены параметры адиабатического потенциала, предложена интерпретация колебательных состояний исследуемого соединения. Проведен анализ структуры молекул исследуемого вещества. Предложен метод расчета сдвига колебательных полос димеров азаурацила, основанный на теории возмущения второго порядка. Обоснован выбор метода и базиса расчета частот фундаментальных колебаний и интенсивностей полос в спектрах ИК и КР. Описана методика оценки ангармонизма колебаний с использованием кубических и квартичных силовых постоянных. В статье представлены результаты численного эксперимента, определены геометрические параметры молекул, такие как длины валентных связей и величины углов между ними. Получены частоты колебательных состояний и величины их интегральных интенсивностей. Приведена интерпретация колебаний мономеров и сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Результаты находятся в хорошем со-*

гласии с экспериментальными значениями. Предложены частоты, которые можно использовать для идентификации соединения по колебательным спектрам молекул. Расчет проводился квантовым методом функционала плотности DFT/B3LYP. Показано, что данный метод может быть использован для моделирования геометрических параметров молекул и электронной структуры различных замещенных бензола. Он позволяет построить на основе численных расчетов структурно-динамические модели указанного класса соединений.

**Ключевые слова:** азаурацил, 5-азаурацил, 6-азаурацил, димер, колебательные спектры, ИК спектры, КР спектры, адиабатический потенциал, ангармоническое смещение, водородная связь.

#### SYSTEM ANALYSIS OF STRUCTURAL AND DYNAMIC MODELS OF AZAURACIL DIMERS IN CONDENSED STATE

*Erman Evgeny A.*, Ph.D. (Engineering)

*Stefanova Galina P.*, D.Sc. (Pedagogics), Professor, First Pro-rector

*Dzhalmukhambetova Elena A.*, Ph.D. (Physics and Mathematics)

*Grechukhina Oksana N.*, Senior Lecturer

*Alykova Olga M.*, Ph.D. (Pedagogics)

*Ravcheeva Natalya A.*, Lecturer

Astrakhan State University

20a Tatishchev st., Astrakhan, 414056, Russia

E-mail: kofl@aspu.ru, kof1@aspu.ru

*Structural and dynamic models of 5- and 6-azauracils are proposed on the basis of ab initio quantum calculations of geometric and electronic structure. The parameters of adiabatic potential are determined, the interpretation of vibrational states of the test compound is proposed. The analysis of molecule structure of the substance is carried out. The method for calculating the shift of vibrational bands of azauracil dimers based on perturbation theory of the second order is presented. A choice of method and basis for calculation of fundamental vibration frequencies and intensities of the bands in the IR and Raman spectra is justified. The technique for evaluation of anharmonicity with cubic and quartic force constants is described. The paper presents the results of numerical experiments, geometric parameters of molecules, such as the valence bond lengths and angles between them. We obtain the frequency of the vibrational states and values of their integrated intensities. The interpretation of monomer vibrations is given. The results are in good agreement with experimental values. The frequencies that can be used to identify the compounds of the vibrational spectra of molecules are proposed. The calculation was carried out by quantum density functional method DFT/B3LYP. It is shown that this method can be used to model the geometrical parameters of molecular and electronic structure of various benzole-substituted. It allows us to construct the structural and dynamic models of this class of compounds by numerical calculations.*

**Keywords:** Azauracil, 5-azauracil, 6-azauracil, Dimer, Vibrational spectra, IR spectra, Raman spectra, Anharmonic shift, Adiabatic potential, Hydrogen bond.

**Введение.** Соединения урацилового ряда являются фрагментами биомолекул с широким спектром фармакологических свойств, в т.ч. и антиканцерогенных. Азаурацилы – не исключение. С этим связан интерес к исследованию структуры и спектров этих соединений, например, публикации [8, 10–12]. Предложенная в периодической литературе интерпретация

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

колебательных спектров 5- и 6- азаурацилов (рис. 1) касалась, как правило, свободных молекул, хотя в реальных условиях соединения находятся в конденсированном состоянии. В работе [2] предпринята попытка учесть межмолекулярное взаимодействие для твердой фазы урацилов. Однако теоретической основой указанных исследований являлась классическая теория молекулярных колебаний [1], существенными недостатками которой является зависимость от исходного приближения в выборе силового поля и ограниченность гармоническим приближением в оценке колебательных состояний исследуемых молекулярных объектов.

Решение этой проблемы связано с применением квантовых методов молекулярной динамики для построения структурно-динамических моделей соединений урацилового ряда. Такие исследования представлены в публикациях [4, 5], результаты которых являются предварительными и нуждаются в продолжении, что является целью данной публикации.

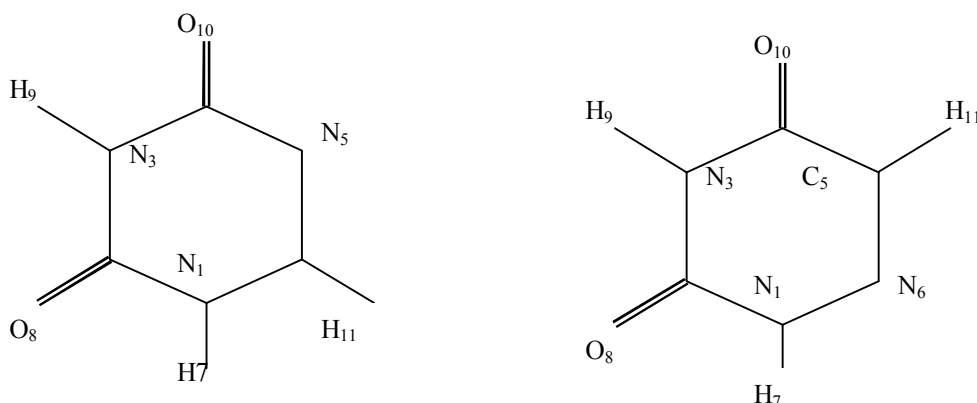


Рис. Молекулярные диаграммы 5- и 6- азаурацилов

### Математическая модель колебательных состояний молекулярных систем

Оценка положения спектральных полос осуществлялась исходя из соотношения теории молекулярных колебаний [9]

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

Для ангармонических констант  $\chi_{sr}$  использовались выражения из публикаций [3, 6]

$$\chi_{ss} = \frac{1}{16} F_{ssss} - \frac{5}{48} \frac{(F_{sss})^2}{\nu_s} + \frac{1}{32} (F_{ssr})^2 (\Omega(s; s; -r) - \Omega(s; s; r) - 12\Omega(r; r; r)) (1 - \delta_{sr}) \quad (2)$$

$$\chi_{sr} = \frac{1}{16} F_{ssrr} - \frac{1}{8} (F_{ssr})^2 (\Omega(s; s; -r) + \Omega(s; s; r) (1 - \delta_{sr})) + \frac{3}{8} (F_{srt})^2 (\Omega(s; r; t) - \Omega(s; r; -t) + \Omega(s; -r; t) - \Omega(s; -r; -t)) \times \\ \times (1 - \delta_{sr}) (1 - \delta_{st}) (1 - \delta_{rt}) + L(\alpha; sr)^2 \frac{\Omega(s; r; 0) + \Omega(s; -r; 0)}{2}. \quad (3)$$

В соотношениях (1)–(3):  $\nu_s$  – частоты гармонических колебаний (в  $\text{см}^{-1}$ ),  $L(\alpha; sr)$  – постоянные Кориолиса;  $F_{srt}$  и  $F_{srtu}$  – кубические и квартичные силовые постоянные (параметры адиабатического потенциала молекулы),  $Q^s$  – безразмерные нормальные колебательные координаты,  $n_s$  – квантовые числа рассматриваемого колебательного состояния;  $\Omega(s; \pm r; \pm t) = (\nu_s \pm \nu_r \pm \nu_t)^{-1}$  – резонансные функции.

Оценки геометрии молекул и параметров адиабатического потенциала мономеров и димеров 5- и 6-азаурацилов осуществлялась с помощью пакета «Gaussian-03» для трех атомных базисов 6-311G\*, 6-311G\*\*, 6-311+G\*\* [12]. О влиянии замены атома углерода шестичленного

цикла урацила атомом азота на изменение геометрических параметров можно судить по результатам модельных расчетов, представленных в табл. 1. Диапазоны значений длин связей, участвующих в образовании димеров, таковы:  $R_{CH}=1.08-1.09$ .  $R_{NH}=1.01$ ,  $R_{C=O}=1.20-1.21 \text{ \AA}$ .

Таблица 1

**Вычисленные значения геометрических параметров урацила, 5-и 6- азаурацилов**

Связи	UR	5-AU	6-AU	Углы	UR	5-AU	6-AU	Углы	UR	5-AU	6-AU
R(1,2)	1,39	1,40	1,39	A(2,1,6)	123	122	127	A(3,4,5)	113	115	112
R(1,6)	1,37	1,37	1,35	A(2,1,7)	115	116	116	A(3,4,10)	120	120	122
R(2,3)	1,38	1,38	1,39	A(1,2,3)	113	111	112	A(4,5,6)	120	118	124
R(3,4)	1,41	1,42	1,40	A(1,2,8)	123	123	123	A(4,5,11)	118	–	118
R(4,5)	1,46	1,40	1,48	A(2,3,4)	128	127	126	A(1,6,5)	122	125	117
R(5,6)	1,35	1,28	1,29	A(2,3,9)	115	116	116	A(1,6,H)	115	114	–

Образование димеров не приводит к существенному изменению по сравнению с мономерами представленных геометрических параметров. Для длин валентных связей оно не выходит за пределы  $0,01 \text{ \AA}$ , для валентных углов  $0,8^\circ$ . Для связей  $R_{NH}$  и  $R_{C=O}$ , участвующих в межмолекулярном взаимодействии длина увеличивается на величину  $\sim 0,02 \text{ \AA}$ . Длина связи O – H между мономерами попадает в интервал  $1,85-1,88 \text{ \AA}$  для димеров 5-азаурацила, для 6-азаурацилов имеет место существенный разброс  $1,78-1,91 \text{ \AA}$ . Нижняя граница соответствует димерам, в образовании которых участвует валентная связь R (1,7). Выбор базиса квантового расчета принципиального значения не имеет.

Таблица 2

**Интерпретация колебаний в мономерах азаурацилов**

Форма колеб	5-азаурацил				6-азаурацил			
	$\nu_{экс}$	$\nu_{анг}$	ИК	КР	$\nu_{экс}$	$\nu_{анг}$	ИК	КР
Характеристические колебания								
$\nu_7$	3464	3466	94	101	3476	3452	101	102
$\nu_9$	3437	3451	61	86	3423	3424	64	81
$\nu_{C=O}$	1796	1826	438	15	1783	1802	523	12
$\nu_{C=O}$	1780	1811	721	21	1767	1779	537	31
$\nu_{C=O}$	402	391	17	2,2	385	383	23	1,7
$\rho_{C=O}$	786	781	41	0,5	739	760	30	0,4
$\rho_{C=O}$	757	752	28	0,3	729	740	20	0,9
$\rho_9$	662	676	94	2,1	668	680	126	1,2
$\rho_7$	587	592	44	1,1	576	604	42	1,4
Колебания, характеристические по частоте и форме								
$\beta_7$	1454	1438	119	5,9	1431	1427	30	12
$\beta, \beta_{NH}$	1393	1394	19	4,0	1405	1379	42	3,5
$\beta_{NH}, \beta$	1375	1357	6,9	9,8	1362	1336	98	5,4
$Q, \beta_{C=O}$	1313	1332	218	3,6	1329	1325	34	2,6
$Q, \beta_{C=O}$	1101	1068	7,4	2,2	1099	1092	22	1,9
$\gamma, Q$	1009	977	15	0,5	1002	980	11	0,9
$\gamma, \beta_{C=O}$	557	552	4,5	4,3	533	533	25	0,3
$\gamma, \beta_{C=O}$	513	504	10	1,6	518	517	7,3	5,0

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Колебания, характеристические по форме								
Q,γ	1643	1662	344	11	1616	1611	28	19
Q,β <sub>NH</sub> ,β	1177	1139	88	3,0	1231	1184	51	24
γ,Q	937	917	7,0	2,5	973	950	25	6,0
Q,γ	786	776	5,9	18	750	724	10	16
β <sub>C=O</sub> ,γ	587	588	0,7	4,5	550	549	13	4,0

Интерпретация колебаний мономеров 5- и 6-азаурацилов представлена в табл. 2. Набор колебаний разделен на три группы: характеристические колебания, колебания, характеристические по частоте и форме, колебания, характеристические по форме. Для спектральной идентификации мономеров следует использовать полосы, относящиеся к двум последним наборам колебаний. При этом доминирующим признаком является интенсивность полос, которая может различаться на порядок, в то время как смещение полос не превышает величины  $\sim 60 \text{ см}^{-1}$ .

Использование ангармонического приближения позволяет получить хорошее согласие опытных и вычисленных значений частот валентных колебаний связей NH. Для кубических и квартичных силовых постоянных этой связи имеем следующие оценки:  $F_{qqq} \sim 2310 \text{ см}^{-1}$ ,  $F_{qqqq} \sim 1360 \text{ см}^{-1}$ . Ангармоническое смещение полос определяют первые два слагаемых выражения (2). Это величина  $\sim 170 \text{ см}^{-1}$ . К такому же результату приводит и процедура масштабирования с параметрами, используемыми в работах [4, 5].

Таблица 3

### Интерпретация колебательных состояний димеров 5-азаурацилов

Форма колебан	v <sub>анг</sub>	ИК	КР	v <sub>анг</sub>	ИК	КР	v <sub>анг</sub>	ИК	КР
	7-8' 8-7'			9-8' 8-9'			10-9' 9-10'		
q <sub>NH</sub>	3130	2874	–	3216	1587	0.0	3154	2152	–
q <sub>NH</sub>	3090	–	719	3189	0,0	472	3118	–	551
β <sub>NH</sub> ,β	1498	232	61	1428	227	46	1441	290	49
Q,β <sub>NH</sub> ,β	1183	169	19	1150	209	3,7	1157	119	7,2
Q,β <sub>C=O</sub>	1069	39	2,5	1069	3,6	4,3	1099	11	5,9
γ,Q	989	86	14	986	34	2,0	974	69	7,6
γ	929	28	2,7	925	78	4,7	934	19	8,6
β <sub>C=O</sub>	594	12	32	554	49	7,3	573	59	14
γ,β <sub>C=O</sub>	506	115	3,5	514	24	3,9	516	35	4,1
ρ <sub>NH</sub>	861	169	–	874	193	–	904	176	0,0
ρ <sub>C=O</sub>	783	129	0,6	764	41	2,3	767	53	1,8
ρ <sub>NH</sub>	676	99	4,3	600	152	1,3	611	135	1,4
	8-7' 9 8'			10-7' 9-8'			10-9' 9-8'		
q <sub>NH</sub>	3178	2003	15	3143	2135	49	3193	1809	0,9
q <sub>NH</sub>	3142	164	572	3095	419	583	3162	4,3	502
β <sub>NH</sub>	1492	206	39	1475	324	57	–	–	–
β <sub>NH</sub>	1429	87	14	–	–	–	1440	259	49
Q,β <sub>C=O</sub>	1067	24	3,5	1101	29	4,3	1080	8,3	4,6
ρ <sub>NH</sub>	824	19	0,4	844	7,5	0,5	–	–	–
ρ <sub>NH</sub>	672	48	2,1	672	51	2,2	–	–	–

Интерпретация колебательных спектров возможных димеров 5- и 6- азаурацилов приведена в табл. 3 и 4. Для 6- азаурацила возможен и димер типа 10-11' 9-10'. Аналогич-

ный димер урацила исследован в публикации [4]. Отметим, что для димеров симметрии  $C_{2h}$  (конформеры 7-8'\_8-7', 9-8'\_8-9', 10-9'\_9-10') имеет место правило альтернативного запрета для интенсивностей полос [1].

Таблица 4

**Интерпретация колебательных состояний димеров 6-азаурацилов**

Форма колебан	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
	8-7'_8-8'			8-9'_9-8'			10-9'_9-10'		
$q_{\text{NH}}$	3195	2466	776	3158	1880	518	3145	2014	552
$Q_{\text{C=O}}$	1743	321	166	1724	451	103	1777	983	26
$Q_{\text{C=O}}$	1723	2925	22	1704	2349	45	1693	1441	91
$*\beta_{\text{NH}}$	1480	123	148	1417	46	67	1424	79	93
$Q, \beta_{\text{NH}}$	1369	266	27	1372	378	11	1371	223	4,8
$Q, \beta_{\text{NH}}$	1196	79	89	1208	103	39	1202	72	58
$Q, \beta$	1091	12	1,8	1092	43	1,4	1100	54	5,2
$\rho_{\text{NH}}$	851	205	0,0	863	222	–	907	176	0,0
$\rho_{\text{C=O}}$	743	116	166	728	17	1,9	739	24	2,0
$\rho_{\text{NH}}$	676	104	1,5	600	193	0,1	627	189	1,3
	10-7'_9-8'			8-7'_9-8'			10-9'_9-8'		
$q_{\text{NH}}$	3195	1802	197	3208	1664	187	3163	1956	0,9
$q_{\text{NH}}$	3132	427	473	3145	495	468	3130	5,1	546
$q$	3067	0,4	224	3063	0,2	263	3065	0,6	234
$\beta_{\text{NH}}$	1460	75	93	1478	61	60	–	–	–
$\beta_{\text{NH}}, Q$	1409	113	26	1421	33	35	1418	76	76
$\beta$	1315	95	3,9	1315	66	6,2	1311	89	4,5
$Q, \beta$	1101	36	4,4	1095	27	2,3	1100	51	3,8
$\rho_{\text{NH}}$	883	188	2,8	880	185	6,1	891	202	1,3
$\rho_{\text{NH}}, \rho$	838	31	0,7	826	41	0,5	873	22	1,5
$\rho_{\text{C=O}}$	743	70	2,4	751	65	2,8	732	21	1,3
$\rho_{\text{NH}}$	674	47	2,0	674	47	1,9	–	–	–

Весь набор фундаментальных колебаний димеров разделен на две части. В табл. 3 и 4 приведены такие димеры, полосы которых можно использовать для спектральной идентификации конформеров. Как сказано выше, доминирующим признаком следует считать интенсивность полос в конкретном спектральном диапазоне.

Образование димера приводит к появлению дублетов, энергетическая щель между которыми может достигать величины  $\sim 100 \text{ см}^{-1}$  для валентных колебаний связей NH ( $q_{\text{NH}}$ ). Для деформационных неплоских колебаний этой связи ( $\rho_{\text{NH}}$ ) такая щель не превышает величины  $\sim 40 \text{ см}^{-1}$ . Для конформеров симметрии  $C_{2h}$  интенсивной является полоса в спектре ИК (тип симметрии  $\nu_u$ ). В спектрах КР интенсивность полос неплоских колебаний ( $\rho, \chi$ ) мала и мало пригодна для решения задачи спектральной идентификации конформеров димеров азаурацилов. По этой причине в табл. 3 и 4 они не приводятся.

О механизме межмолекулярного взаимодействия можно судить по смещениям полос, интерпретированных как валентные и неплоские деформационные колебания связей NH. Валентные колебания смещаются в длинноволновый диапазон на величину порядка  $\sim 300 \text{ см}^{-1}$ , деформационные смещаются в коротковолновый диапазон на величину  $\sim 200 \text{ см}^{-1}$ . Учитывая длины связей между атомами водорода и кислорода, участвующих в образовании димера, можно сделать вывод о существовании водородной связи между мономерами в димерах.

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

Оценка кубических и квартичных силовых постоянных для валентных колебаний связей NH, участвующих в образовании димера приводит к величинам:  $F_{QQQ}, F_{QQq} \sim 1780 \text{ см}^{-1}$ ,  $F_{QQQQ}, F_{QQqq}, F_{qqqq} \sim 750 \text{ см}^{-1}$  (символ  $Q$  относится к колебаниям типа симметрии  $A_g$ , символ  $q$  к антисимметричным колебаниям типа  $B_u$ ). Отметим, что для невзаимодействующих связей NH указанные силовые постоянные оцениваются соответственно величиной  $\sim 1620$  и  $690 \text{ см}^{-1}$ . Согласно формулам (2) и (3), величина ангармонического смещения укладывается в интервал  $\sim 200\text{--}150 \text{ см}^{-1}$ , что вполне согласуется с результатами операции масштабирования.

### Заключение

Проведенные модельные расчеты дают основание для использования метода функционала плотности DFT/B3LYP при решении задач спектральной идентификации замещенных азаурацилов и построения их структурно-динамических моделей. Предложенная методика оценки ангармонического смещения полос пригодна для исследования конденсированных состояний данного класса соединений.

### Список литературы

1. Свердлов Л. М. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – Москва : Наука, 1970. – 559 с.
2. Тен Г. Н. Анализ ИК спектров и водородных связей урацила / Г. Н. Тен, Т. Г. Бурова, В. И. Баранов // Журнал структурной химии. – 2001. – Т. 42, № 4. – С. 666–676.
3. Элькин М. Д. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью / М. Д. Элькин, Л. М. Бабков // Известия СГУ. – 2011. – Т. 11, вып. 1. – С. 20–25.
4. Элькин М. Д. Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия СГУ. – 2008. – Т. 8, вып. 2. – С. 24–30. – (Сер. Физика).
5. Элькин П. М. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний замещенных урацила / П. М. Элькин, О. В. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // Вестник СГТУ. – 2005. – № 4 (9). – С. 36–45.
6. Эрман Е. А. Модельные оценки ангармонического смещения полос в колебательных спектрах димеров карбоновых кислот / Е. А. Эрман, М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2010. – № 4 (12). – С. 53–58.
7. Frisch M. J. Gaussian 03 / M. J. Frisch. – Revision B.03. – 2003. – Pittsburg PA: Gaussian Inc.
8. Fulara J. Theoretical and matrix-isolation experimental study of the infrared spectra of 5-azauracil and 6-azauracil / J. Fulara, M. J. Nowak, L. Lapinski // Spectrochimica Acta. – 1991. – Vol. 47A, № 5. – P. 595–613.
9. Hoy A. R. Anharmonic force constants calculation / A. R. Hoy, I. M. Mills, G. Strey // Molecular Physics. – 1972. – Vol. 21, № 6. – P. 1265–1290.
10. Kumar H. FTIR and FT-Raman spectra of complex Cu(II) with 6-azauracil / H. Kumar, M. Sharm, R. Sharm, B. K. Rai, H. Joe, M. Srivastava, V. K. Rastogi // AIP Conference Proceeding 1267. – 2010. – P. 672–673.
11. Mitran R. A. Some unusual spectral properties of 6-azauracil derivatives / R. A. Mitran, A. C. Bascornea // U.P.B. Sci. Bull. – 2011. – Vol. 73, № 1. – P. 67–74. – (Ser. B.).
12. Potter B. S. Aza analog of nucleic acid bases: Infrared spectra of 5-azauracil and crystal structure of 5-azauracil monohydrate / B. S. Potter, R. A. Palmer, R. Withnall, B. Z. Chowdhry // New Journal of Chemistry. – 1999. – Vol. 23, № 1. – P. 117–122.

### References

1. Sverdlov L. M., Kovner M. A., Kraynov E. P. Kolebatel'nye spektry mnogoatomnyh molekul [Vibrational spectra of polyatomic molecules]. Moscow, Nauka, 1970. 559 p.

2. Ten G. N., Burova T. G., Baranov V. I. Analiz IK spektrov i vodorodnyh svyazei uracila [Analysis of IR spectra and hydrogen bonds of uracil]. *Zhurnal Strukturnoj Himii* [Journal of Structural Chemistry], 2001, vol. 42, no. 4, pp. 666-676.

3. El'kin M. D., Babkov L. M. Uchet angarnonicheskogo smesheniya polos v model'nyh raschetah kolebatel'nyh spektrov dimerov s vodorodnoi svyaz'yu [Accounting of anharmonic shift of bands in model calculations of vibrational spectra of dimers with hydrogen bond]. *Izvestiya SGU* [News of SSU], 2011, vol. 11, iss. 1, pp. 20-25.

4. El'kin M. D., Dzhalmuhambetova E. A., Grechuhina O. N. Proyavlenie mezhmolekulyarnogo vzaimodeistviya v dimerah uracila [Manifestation of intermolecular interaction in uracil dimers]. *Izvestiya SGU* [News of SSU], 2008, vol. 8, iss. 2, pp.24-30, (Ser. Fizika).

5. El'kin P. M., Pulin O. V., Dzhalmuhambetova E. A. Strukturno-dinamicheskie modeli i angarnonicheskii analiz kolebatel'nyh sostoyanii zameshennyh uracila [Structural and dynamic models and anharmonic analysis of vibrational conditions of uracil-substituted]. *Vestnik SGTU* [Bulletin of SSTU], 2005, no. 4 (9), pp. 36-45.

6. Erman E. A., El'kin M. D., Dzhalmuhambetova E. A. Model'nye ocenki angarnonicheskogo smesheniya polos v kolebatel'nyh spektrah dimerov karbonovyh kislot [Model estimates of anharmonic shift of bands in vibrational spectra of dimer of carboxylic acids]. *Prikaspiiskii zhurnal: upravlenie i vysokie tehnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2010, no. 4 (12), pp. 53-58.

7. Frisch M. J. Gaussian 03. Revision B.03. 2003. Pittsburg PA: Gaussian Inc.

8. Fulara J., Nowak M. J., Lapinski L. Theoretical and matrix-isolation experimental study of the infrared spectra of 5-azauracil and 6-azauracil. *Spectrochimica Acta*, 1991, vol. 47A, no. 5, pp. 595-613.

9. Hoy A. R., Mills I. M., Strey G. Anharmonic force constants calculation. *J. Mol. Phys*, 1972, vol. 21, no. 6, pp. 1265-1290.

10. Kumar H., Sharm M., Sharm R., Rai B. K., Joe H., Srivastava M., Rastogi V. K. FTIR and FT-Raman spectra of complex Cu (II) with 6-azauracil. *AIP Conference Proceeding* 1267, 2010, pp. 672-673.

11. Mitran R. A., Bascornea A. C. Some unusual spectral properties of 6-azauracil derivatives. *U.P.B. Sci. Bull.*, 2011, vol. 73, no. 1, pp. 67-74, (Ser. B).

12. Potter B. S., Palmer R. A., Withnall R., Chowdhry B. Z. Aza analog of nucleic acid bases: Infrared spectra of 5-azauracil and crystal structure of 5-azauracil monohydrate. *New Journal of Chemistry*, 1999, vol. 23, no.1, pp. 117-122.

УДК 539.193/.194;535/33.34

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ**

*Эрман Михаил Анатольевич*, аспирант

*Элькин Павел Михайлович*, кандидат физико-математических наук

*Карташов Максим Вячеславович*, магистрант

*Гречухина Оксана Николаевна*, старший преподаватель

Астраханский государственный технический университет

414025, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 18

Энгельский технический институт

Саратовского государственного технического университета

413100, Россия, г. Энгельс, пл. Свободы, 17

Астраханский государственный университет

414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а

E-mail: kofl@aspu.ru, kofl@aspu.ru