

---

---

# СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

УДК 539.193/194; 535/33.34

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ СПИНАЗАРИНА

*М.Д. Элькин, Е.А. Джалмухамбетова, И.И. Гордеев*

*Проведен теоретический анализ конформационной структуры и колебательных спектров спиназарина в рамках метода DFT/B3LYP. Показана возможность образования внутримолекулярной водородной связи.*

*Ключевые слова:* колебательные спектры, спиназарин, водородная связь.

*Key words:* vibrational spectra, spinasarine, hydrogen bonding.

Природные продукты спинохромы известны как биологически активные соединения и лекарственные препараты [19]. Информация о геометрической и электронной структуре этих соединений, полученная из эксперимента (ЯМР, масс-спектрометрия, спектры ИК), является крайне ограниченной и не дает возможности построить структурно-динамические модели, как это принято в молекулярной динамике.

Такие возможности предоставляют неэмпирические методы квантовой механики молекул (квантовой химии) [4, 7, 9]. Построенные на их основе структурно-динамические модели для соединений различных классов представлены, к примеру, в монографии [10]. Неэмпирические расчеты геометрии и колебательных состояний свободных молекул, выполненные в гармоническом приближении теории молекулярных колебаний, позволили определиться с методом и базисами. Для предсказательных расчетов геометрической структуры и колебательных состояний циклических и полициклических соединений предпочтение следует отдать методу функционала плотности DFT/B3LYP с базисами от 6-311G(d, p) до 6-311++ G(d, p) [20].

В качестве иллюстрации сказанного сошлемся на работы [1, 3, 12, 14, 18], где интерпретация спектра фундаментальных колебаний выполнена с учетом ангармонизма колебаний. На основании модельных расчетов сделаны выводы, что неэмпирические квантовые расчеты позволяют дать оценку гармоническим силовым постоянным для сложных молекулярных соединений и их димеров, а известную процедуру масштабирования [6, 8] следует рассматривать как качественную оценку влияния ангармонизма колебаний на смещение спектральных полос в ИК- и КР-спектрах. Существенное расхождение результатов операции масштабирования с результатами, полученными при решении ангармонической задачи методами теории возмущения, может иметь место для валентных колебаний связей СН, ОН, NH. Причина тому – влияние ангармонических резонансов, методика учета которых в модельных расчетах предложена нами в работах [15, 17].

Целью данной публикации является построение структурно-динамической модели простейшего представителя спинохромов – спиназарина (см. рис.) на основании неэмпирических квантовых расчетов геометрической и электронной структуры соединения.

**Результаты модельных расчетов.** Отсутствие экспериментальных данных по геометрической структуре спиназарина и предпочтительной конформации фрагментов СОН относительно плоскостей шестичленных циклов потребовало оптимизации геометрии соединения при различных начальных значениях угла между указанными молекулярными фрагментами. При этом принималась во внимание воспроизводимость частот крутильных колебаний фрагментов СОН (частота внутреннего вращения). Такие условия выполняются для плоской модели спиназарина, при этом расположение фрагментов СОН относительно связи С=О соответствует тому, как это изображено на рис. (равновесная молекулярная конфигурация имеет симметрию  $C_{2v}$  [11]). В таком случае может иметь место механизм внутримолекуляр-

ного взаимодействия между фрагментами  $\text{C=O}$  и  $\text{C=O}$ , что непременно должно проявиться в колебательных спектрах соединения.

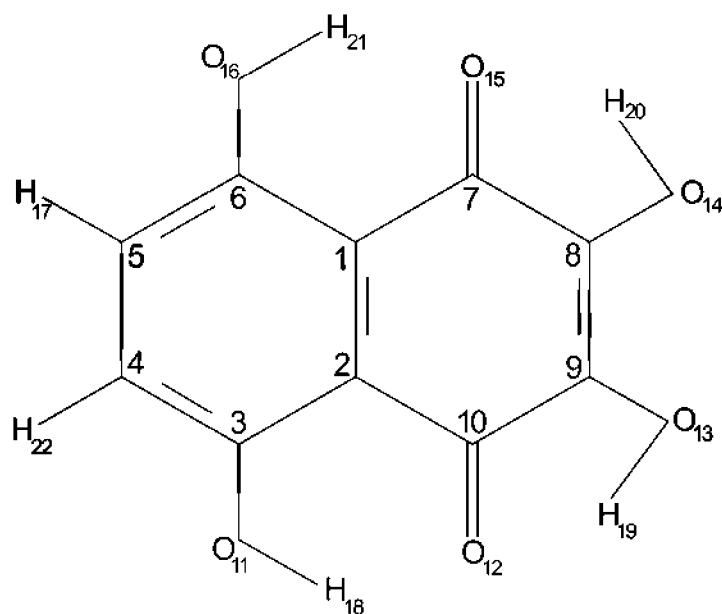


Рис. Структурная формула спиназарина

Оптимизация геометрии приводит к следующим значениям геометрических параметров спиназарина. Длины связей в шестичленных циклах попадают в интервал  $R_{\text{CC}} = 1,36\text{--}1,47 \text{ \AA}$  (в бензоле  $1,4 \text{ \AA}$  [11]),  $R_{\text{C=O}} = 1,25 \text{ \AA}$ ,  $R_{\text{CO}} = 1,34 \text{ \AA}$ ,  $R_{\text{OH}} = 0,98 \text{ \AA}$ ,  $R_{\text{CH}} = 1,08 \text{ \AA}$ . Валентные углы шестичленных циклов попадают в диапазон  $A_{\text{CCC}} = 118,9\text{--}120,7^\circ$ ,  $A_{\text{CCH}} = 117,8\text{--}121,2^\circ$  ( $120^\circ$  в бензоле [16]),  $A_{\text{CCO}} = 116,3\text{--}122,8^\circ$ ,  $A_{\text{CC=O}} = 117,3\text{--}122,9^\circ$  ( $121,9^\circ$  в ацетоне [11]),  $A_{\text{COH}} = 104,9\text{--}106,9^\circ$  ( $106,3^\circ$  в муравьиной кислоте [11]). Влияние атомного базиса не выходит за рамки  $0,005 \text{ \AA}$  для валентных связей и  $0,06^\circ$  для валентных углов. Такие изменения в геометрии отдельных фрагментов спиназарина по отношению к соответствующим геометрическим параметрам родственных по электронной структуре фрагментов соединений из монографии [11] дают основание предполагать наличие характеристичности фундаментальных колебаний для указанных фрагментов. К ним, в первую очередь, относятся валентные и деформационные колебания связей  $\text{C-H}$ ,  $\text{C-O}$ ,  $\text{C=O}$ . Отметим, что эксперимент в ИК-спектре спиназарина [19] касается именно указанных полос.

Интересным представляется результат оптимизации геометрии для модели, представленной на рис. 1. Расстояние между атомом водорода фрагмента  $\text{C-OH}$  одного цикла и атомом кислорода связи  $\text{C=O}$  дает квантово-механическую оценку  $R_{\text{H...O}} \sim 1,74 \text{ \AA}$ , что дает основание предположить наличие внутримолекулярной водородной связи. Приведенные ниже расчеты колебательных состояний спиназарина и их сопоставление с экспериментом из публикации [19] данное предположение подтверждают.

# СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Таблица 1

Интерпретация плоских фундаментальных колебаний спиназарина

| Форма колебаний                    | $V_{\text{гарм}}$ | $V_{\text{масш}}$ | ИК   | КР    | $V_{\text{гарм}}$ | $V_{\text{масш}}$ | ИК   | КР   |
|------------------------------------|-------------------|-------------------|------|-------|-------------------|-------------------|------|------|
|                                    | Тип симметрии А1  |                   |      |       |                   |                   |      |      |
| $q_{\text{OH}}$                    | 3630              | 3452              | 0,31 | 206   | 3652              | 3472              | 1,94 | 215  |
| $q_{\text{OH}}$                    | 3391              | 3232              | 111  | 137   | 3424              | 3262              | 156  | 152  |
| $q_{\text{CH}}$                    | 3206              | 3060              | 1,71 | 227,0 | 3210              | 3064              | 4,35 | 231  |
| $Q, \beta$                         | 1732              | 1674              | 109  | 163   | 1735              | 1678              | 118  | 165  |
| $Q, \beta$                         | 1684              | 1629              | 0,86 | 55,5  | 1685              | 1630              | 1,89 | 56,6 |
| $Q_{\text{C=O}}$                   | 1612              | 1560              | 143  | 180   | 1616              | 1564              | 146  | 182  |
| $\beta_{\text{OH}}$                | 1500              | 1453              | 2,48 | 83,4  | 1505              | 1458              | 4,68 | 89,2 |
| $Q, \beta$                         | 1453              | 1408              | 18,8 | 163   | 1454              | 1409              | 25,8 | 166  |
| $Q, \beta_{\text{OH}}$             | 1416              | 1372              | 1,40 | 53,4  | 1420              | 1377              | 17,4 | 67,3 |
| $\beta_{\text{OH}}, Q_{\text{CO}}$ | 1352              | 1311              | 623  | 51,7  | 1359              | 1318              | 724  | 67,2 |
| $Q_{\text{CO}}$                    | 1321              | 1281              | 16,9 | 7,06  | 1321              | 1282              | 34,2 | 14,1 |
| $\beta_{\text{OH}}, Q$             | 1250              | 1214              | 431  | 35,8  | 1254              | 1217              | 471  | 37,1 |
| $\beta_{\text{CH}}$                | 1185              | 1151              | 146  | 2,11  | 1188              | 1154              | 156  | 2,64 |
| $\beta_{\text{CH}}$                | 1111              | 1079              | 36,7 | 11,8  | 1112              | 1081              | 42,6 | 13,0 |
| $Q$                                | 913               | 889               | 12,7 | 36,4  | 914               | 890               | 13,1 | 36,8 |
| $Q$                                | 563               | 549               | 0,32 | 39,9  | 563               | 549               | 0,47 | 40,8 |
| $\gamma$                           | 467               | 456               | 11,8 | 18,9  | 467               | 457               | 15,6 | 19,1 |
| $\gamma$                           | 445               | 435               | 7,80 | 6,27  | 445               | 435               | 25,6 | 7,61 |
| $\beta_{\text{CO}}$                | 437               | 427               | 21,9 | 0,34  | 440               | 430               | 35,6 | 2,27 |
| $\beta_{\text{CO}}$                | 339               | 332               | 0,93 | 0,04  | 348               | 341               | 2,21 | 0,15 |
| $\gamma$                           | 294               | 288               | 18,1 | 0,61  | 298               | 291               | 18,2 | 0,72 |
|                                    | Тип симметрии В2  |                   |      |       |                   |                   |      |      |
| $q_{\text{OH}}$                    | 3628              | 3450              | 199  | 39,2  | 3650              | 3470              | 245  | 41,2 |
| $q_{\text{OH}}$                    | 3394              | 3234              | 27,1 | 33,6  | 3426              | 3264              | 29,5 | 42,1 |
| $q_{\text{CH}}$                    | 3192              | 3047              | 1,36 | 98,3  | 3196              | 3051              | 2,37 | 100  |
| $Q_{\text{C=O}}$                   | 1636              | 1583              | 374  | 1,35  | 1637              | 1584              | 478  | 5,18 |
| $Q, \gamma$                        | 1626              | 1573              | 79,9 | 40,9  | 1629              | 1576              | 174  | 44,4 |
| $\beta, Q_{\text{CO}}$             | 1495              | 1448              | 220  | 0,01  | 1499              | 1452              | 249  | 0,05 |
| $\beta_{\text{OH}}, \gamma$        | 1450              | 1405              | 104  | 64,9  | 1458              | 1413              | 136  | 68,0 |
| $\beta_{\text{OH}}$                | 1406              | 1363              | 410  | 7,09  | 1411              | 1368              | 422  | 12,8 |
| $\gamma, \beta$                    | 1354              | 1313              | 104  | 4,58  | 1356              | 1315              | 113  | 6,49 |
| $Q_{\text{CO}}$                    | 1338              | 1298              | 427  | 6,11  | 1338              | 1298              | 443  | 6,16 |
| $Q, \beta$                         | 1237              | 1201              | 108  | 8,29  | 1238              | 1202              | 124  | 8,50 |
| $Q, \gamma$                        | 1077              | 1047              | 23,0 | 20,6  | 1079              | 1050              | 23,7 | 21,5 |
| $Q, \gamma$                        | 988               | 961               | 42,1 | 1,58  | 989               | 962               | 42,4 | 1,67 |
| $\beta_{\text{CO}}$                | 854               | 831               | 3,37 | 0,01  | 854               | 832               | 3,52 | 0,03 |
| $\gamma$                           | 725               | 707               | 24,8 | 2,92  | 726               | 708               | 25,8 | 3,03 |
| $\gamma$                           | 625               | 610               | 12,5 | 0,11  | 625               | 610               | 13,3 | 0,13 |
| $\beta_{\text{C=O}}$               | 516               | 504               | 2,76 | 2,40  | 517               | 505               | 3,40 | 2,53 |
| $\gamma$                           | 404               | 395               | 4,76 | 2,73  | 407               | 398               | 4,94 | 2,74 |
| $\gamma$                           | 333               | 326               | 2,55 | 0,11  | 340               | 332               | 3,33 | 0,18 |
| $\gamma$                           | 243               | 237               | 8,44 | 1,53  | 250               | 245               | 8,59 | 1,67 |

Результаты модельных расчетов колебательных состояний, их интерпретация по преимущественной форме колебания [11] и распределению потенциальной энергии по колебательным степеням свободы [2] приведены в табл. 1–2 для базисов 6–311 G(d) и 6–311 G(d, p). Влиянием поляризационных эффектов при выборе базиса можно пренебречь в задачах идентификации соединения по его колебательным спектрам. Расчеты с использованием базисов 6–311+ G(d) и 6–311+ G(d, p), учитывающие диффузионные эффекты для плоских колебаний приводят к смещениям соответствующих полос  $\sim 12 \text{ см}^{-1}$ . При этом качественная оценка интенсивностей полос не меняется. Для неплюских колебаний картина иная. Не удалось воспроизвести низкочастотное крутильные колебание ( $\chi\chi$  в табл. 2), интерпретированное как изменение угла между шестичленными фрагментами. По этой причине здесь не приводятся расчетные данные для диффузионных базисов.

Таблица 2

**Интерпретация неплюских фундаментальных колебаний спиназарина**

| Форма колебаний     | $V_{\text{гарм}}$ | $V_{\text{масш}}$ | ИК   | КР   | $V_{\text{гарм}}$ | $V_{\text{масш}}$ | ИК   | КР   |
|---------------------|-------------------|-------------------|------|------|-------------------|-------------------|------|------|
|                     | Тип симметрии A2  |                   |      |      |                   |                   |      |      |
| $\rho_{\text{CH}}$  | 978               | 951               | 0,00 | 0,01 | 979               | 953               | 0,00 | 0,02 |
| $\rho_{\text{OH}}$  | 781               | 762               | 0,00 | 2,61 | 805               | 784               | 0,00 | 2,77 |
| $\rho_{\text{CO}}$  | 691               | 674               | 0,00 | 0,52 | 704               | 686               | 0,00 | 0,56 |
| $\rho_{\text{C=O}}$ | 644               | 629               | 0,00 | 0,02 | 660               | 644               | 0,00 | 0,12 |
| $\rho_{\text{OH}}$  | 597               | 583               | 0,00 | 3,83 | 599               | 585               | 0,00 | 4,55 |
| $\rho_{\text{CO}}$  | 555               | 542               | 0,00 | 1,79 | 567               | 554               | 0,00 | 2,50 |
| $\rho_{\text{CC}}$  | 405               | 396               | 0,00 | 0,79 | 411               | 402               | 0,00 | 0,97 |
| $\chi$              | 360               | 352               | 0,00 | 0,51 | 363               | 355               | 0,00 | 0,66 |
| $\chi$              | 140               | 137               | 0,00 | 0,08 | 142               | 139               | 0,00 | 0,09 |
| $\chi\chi$          | 91                | 89                | 0,00 | 0,18 | 91                | 89                | 0,00 | 0,19 |
| Тип симметрии B1    |                   |                   |      |      |                   |                   |      |      |
| $\rho_{\text{CH}}$  | 853               | 831               | 20,7 | 1,48 | 858               | 835               | 24,2 | 1,55 |
| $\rho_{\text{OH}}$  | 789               | 769               | 231  | 0,00 | 811               | 790               | 277  | 0,01 |
| $\rho_{\text{C=O}}$ | 737               | 719               | 0,24 | 0,00 | 738               | 720               | 4,00 | 0,00 |
| $\rho_{\text{OH}}$  | 608               | 593               | 193  | 1,32 | 615               | 601               | 218  | 1,49 |
| $\rho_{\text{CO}}$  | 578               | 564               | 5,03 | 0,08 | 579               | 565               | 6,73 | 0,08 |
| $\rho_{\text{CO}}$  | 328               | 321               | 0,16 | 0,27 | 330               | 323               | 0,37 | 0,31 |
| $\rho_{\text{CC}}$  | 184               | 181               | 0,00 | 1,06 | 185               | 181               | 0,02 | 1,07 |
| $\chi$              | 162               | 158               | 0,77 | 0,00 | 162               | 159               | 0,78 | 0,01 |
| $\chi$              | 88                | 86                | 0,22 | 1,51 | 88                | 86                | 0,31 | 1,55 |

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

Теперь обратимся к фундаментальным колебаниям фрагментов СОН. Различие в частотах  $\sim 200 \text{ см}^{-1}$  для валентных колебаний связей ОН указывает на наличие внутримолекулярной водородной связи [5] между атомом водорода Н фрагмента СОН левого цикла и атомом кислорода связи С=О правого шестичленного цикла. Наблюдаемые в эксперименте [19] полосы в  $3520 \text{ см}^{-1}$  и  $3433 \text{ см}^{-1}$  интерпретированы авторами статьи как валентное колебание связей ОН. Учитывая систематические ошибки операции масштабирования, занижающие ангармонические расчеты для данных колебаний на величину  $\sim 60\text{--}100 \text{ см}^{-1}$  [12, 13], констатируем удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных данных для колебательных состояний связей ОН. Имеет место и увеличение частоты ( $\sim 180 \text{ см}^{-1}$ ) неплюского деформационного колебания этой связи ( $\rho_{\text{OH}}$ ) при образовании внутримолекулярной водородной связи.

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Следует отметить и значение расчетной величины валентного колебания связи С=О. Как правило, в соединениях различного класса положение соответствующей сильной в обоих спектрах соответствует диапазону 1680–1780 см<sup>-1</sup> в зависимости от того, участвует ли связь С=О в образовании димера, как это имеет место в карбоновых кислотах [12] и для шестичленных азациклических соединений – урацилов и азоурацилов [13]. Однако экспериментальные данные для данного колебания ~1601 см<sup>-1</sup>, приведенные в работе [19], хорошо согласуются с таковыми из табл. 1, учитывая, что операция масштабирования занижает расчеты в ангармоническом приближении для данной области колебательного спектра ~ 20–30 см<sup>-1</sup> [5, 17].

Для оценки возможностей неэмпирических квантовых методов в предсказательных расчетах колебательных состояний шестичленных фрагментов спиназарина обратимся к молекуле нафталина (симметрия D<sub>2h</sub>), представляющей два сопряженных бензольных кольца (C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>).

Геометрическая структура нафталина, колебательный спектр различных дейтерозамещенных нафталина подробно представлены в монографии [11]. Длины связей СС, оцененные по рентгеноструктурному эксперименту, лежат в диапазоне 1,36–1,42 Å, углы изменяются в пределах 119,2–120,5°. Характер поведения длин валентных связей кольца в зависимости от их местоположения полностью соответствует таковым в спиназарине.

Таблица 3

**Интерпретация фундаментальных колебаний нафталина**

| Форма           | Сим. | V <sub>экс</sub> | V <sub>гарм</sub> | V <sub>анг</sub> | KP   | Сим. | V <sub>экс</sub> | V <sub>гарм</sub> | V <sub>анг</sub> | ИК   |
|-----------------|------|------------------|-------------------|------------------|------|------|------------------|-------------------|------------------|------|
| q <sub>CH</sub> | AG   | 3060             | 3188              | 3048             | 627  | B1U  | 3065             | 3176              | 3038             | 64,2 |
| q <sub>CH</sub> | AG   | 3031             | 3164              | 3029             | 265  | B1U  | 3058             | 3158              | 3040             | 5,74 |
| Q.β.γ           | AG   | 1577             | 1613              | 1576             | 31,7 | B1U  | 1592             | 1641              | 1604             | 4,88 |
| Q.β.γ           | AG   | 1460             | 1491              | 1467             | 61,8 | B1U  | 1387             | 1418              | 1390             | 5,08 |
| Q.β.γ           | AG   | 1376             | 1398              | 1364             | 158  | B1U  | 1267             | 1287              | 1277             | 7,04 |
| Q.β.γ           | AG   | 1145             | 1185              | 1171             | 1,44 | B1U  | 1128             | 1151              | 1135             | 4,78 |
| Q.β.γ           | AG   | 1025             | 1046              | 1033             | 32,6 |      |                  |                   |                  |      |
| Q.β.γ           | AG   | 758              | 773               | 761              | 38,1 | B1U  | 753              | 809               | 799              | 0,21 |
| γ               | AG   | 512              | 520               | 515              | 15,9 | B1U  | 359              | 366               | 366              | 1,41 |
| q <sub>CH</sub> | B3G  | 3090             | 3174              | 3043             | 182  | B2U  | 3090             | 3187              | 3061             | 48,9 |
| q <sub>CH</sub> | B3G  | 3060             | 3156              | 2996             | 21,3 | B2U  | 3032             | 3160              | 3028             | 1,04 |
| Q.β.γ           | B3G  | 1624             | 1671              | 1629             | 7,97 | B2U  | 1506             | 1549              | 1513             | 9,08 |
| Q.β.γ           | B3G  | 1438             | 1492              | 1464             | 3,21 | B2U  | 1361             | 1391              | 1364             | 1,47 |
| Q.β.γ           | B3G  | 1239             | 1270              | 1247             | 3,97 | B2U  | 1210             | 1232              | 1214             | 1,17 |
| Q.β.γ           | B3G  | 1158             | 1172              | 1155             | 8,91 | B2U  | 1138             | 1169              | 1152             | 0,88 |
| Q.β.γ           | B3G  | 938              | 951               | 939              | 0,01 | B2U  | 1011             | 1036              | 1018             | 7,07 |
| γ               | B3G  | 506              | 519               | 513              | 8,54 | B2U  | 618              | 636               | 630              | 3,45 |
| ρ.χ             | B2G  | 878              | 897               | 883              | 2,08 | B3U  | 782              | 798               | 787              | 114  |
| ρ.χ             | B2G  | 782              | 787               | 774              | 1,72 | B3U  | 476              | 488               | 479              | 21,7 |

Результаты модельных расчетов колебательных состояний нафталина (табл. 3) указывают на отсутствие зависимости положения полос от поляризационных и диффузных параметров атомного базиса (6–311 G). Хорошее совпадение экспериментальных и вычисленных параметров спектра фундаментальных колебаний достигается использованием ангармонического приближения. При этом операция масштабирования частот дает результаты того же порядка величины, что и ангармонические расчеты. Валентные колебания связей СС шестичленных фрагментов попадают в ту же область ~1560–1630 см<sup>-1</sup>.

Понижение частот деформационных колебаний валентных углов (γ) соответствует характеру поведения указанных колебаний при дейтерозамещении [11]. Отметим характеристичность валентных и деформационных колебаний связей СН в области 1260–1480 см<sup>-1</sup>.

Влияние ангармонических резонансов на смещение колебательных полос полностью перекрывается результатами расчета колебательных состояний нафталина во втором порядке ангармонической теории молекулярных колебаний.

1. Неэмпирические квантовые методы DFT/B3LYP позволяют осуществлять предсказательные расчеты геометрической и электронной структуры соединений нафтазаринового ряда. Предпочтителен базис 6–311 G. Влияние поляризационных и диффузионных составляющих атомного базиса сказывается на значениях расчетных величин интенсивностей в спектрах ИК и КР, не меняя качественной оценки интенсивности полосы.

2. В спиназарине имеет место внутримолекулярная водородная связь между атомом водорода гидроксильной группы и атомом кислорода фрагмента C=O. Этот факт полностью подтверждается характером поведения фундаментальных частот колебаний гидроксильного фрагмента в модельных расчетах и проявляется в реальном эксперименте.

3. Для данного класса соединений полученную оценку гармонического силового поля следует считать достоверной, операцию масштабирования частот – качественной оценкой ангармоничности колебаний. Возможности неэмпирических квантовых методов позволяют избавиться от процедуры масштабирования гармонических силовых полей и осуществлять расчеты данного класса соединений в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний.

#### **Библиографический список**

1. *Березин, К. В.* Ангармонический анализ колебательных состояний пиримидина методом функционала плотности / К. В. Березин, В. В. Нечаев, П. М. Элькин // Оптика и спектроскопия. – 2004. – Т. 97, № 2. – С. 1–11.
2. *Грибов, Л. А.* Интерпретированные колебательные спектры алканов, алкенов и производных бензола / Л. А. Грибов, В. А. Дементьев, А. Т. Тодоровский. – М.: Наука, 1986. – 264 с.
3. *Джалмухамбетова, Е. А.* Структурно-динамические модели и колебательные спектры дибензогетероциклов (флуорен, дибензофуран, дибензотиофен, карбозол) / Е. А. Джалмухамбетова, М. Д. Элькин // Вестник СГТУ. – 2007. – № 2 (25), вып. 2. – С. 7–12.
4. *Кон, В.* Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности / В. Кон // УФН. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 336–348.
5. *Кондратьев, В. Н.* Структура атомов и молекул / В. Н. Кондратьев. – М.: Наука, 1959. – 524 с.
6. *Краснощеков, С. В.* Масштабирующие множители как эффективные параметры для коррекции неэмпирического силового поля / С. В. Краснощеков, Н. Ф. Степанов // Журнал физической химии. – 2007. – Т. 81, № 4. – С. 680–689.
7. *Минкин, В. И.* Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. И. Симкин, Р. М. Меняев. – Ростов н/Д.: Феникс, 1997. – 386 с.
8. *Панченко, Ю. Н.* Методы и программы масштабирования квантово-механических силовых полей молекул / Ю. Н. Панченко, А. В. Абраменков // Журнал физической химии. – 2003. – Т. 77, № 6. – С. 1062–1069.
9. *Попл, Дж. А.* Квантово-химические модели / Дж. А. Попл // УФН. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 349–356.
10. *Пулин, В. Ф.* Исследование динамики молекулярных соединений различных классов / В. Ф. Пулин, М. Д. Элькин, О. В. Пулин, В. И. Березин. – Саратов: Изд-во Саратов. гос. техн. ун-та, 2002. – 548 с.
11. *Свердлов, Л. М.* Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М.: Наука, 1970. – 560 с.
12. *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. 109–114.
13. *Элькин, М. Д.* Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия Саратов. ун-та. – 2008. – Т. 8, № 2. – С. 24–30. – (Новая сер. Физика).

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

14. 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.

15. Элькин, П. М. Ангармонический анализ пятичленных гетероциклических соединений / П. М. Элькин, В. Ф. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 2. – С. 153–156.

16. Элькин, П. М. Квантово-химический расчет нормальных колебаний молекул замещенных пятичленных халькоген-гетероциклических соединений с учетом ангармонизма анализ структуры и спектров пятичленных циклических соединений / П. М. Элькин, Е. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2009. – Т. 76, № 2. – С. 170–175.

17. Элькин, П. М. Моделирование структуры и колебательных спектров кислородосодержащих соединений. 1. Спирты / П. М. Элькин, Т. А. Шальнова, О. Н. Гречухина // Известия Саратов. ун-та. – 2009. – Т. 9, № 1. – С. 27–33. – (Новая сер. Физика).

18. 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.

19. Якубовская, А. Я. Спиазарин и этилспиазарин – 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.).

20. *Gaussian 03*. Revision A.7 / M. J. Frisch [et al.]. – Pittsburgh: Gaussian Inc., 2003.