

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 539.194: 541.183.12

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТАБУНА

М.Д. Элькин, С.И. Татарinov, А.С. Кладиева

На основании модельных неэмпирических расчетов параметров адиабатического потенциала табуна показана возможность предсказательных расчетов геометрии ИК- и КР-спектров высокотоксичных фосфорорганических азотосодержащих соединений.

Ключевые слова: структурно-динамическая модель, колебательные спектры, табун, DFT-методы, адиабатический потенциал, ангармоничность.

Key words: structural-dinamic model, vibrational spectra, tabun, DFT-methods, adiabatic potential, anharmonicity.

Табун (Ethyl N,N-dimethylphosphoramidocyanidate) – специфическое высокотоксичное фосфорорганическое соединение (рис.), представляющее известную экологическую угрозу. Табун входит в список веществ, находящихся под контролем международной Конвенции о запрещении химического оружия.

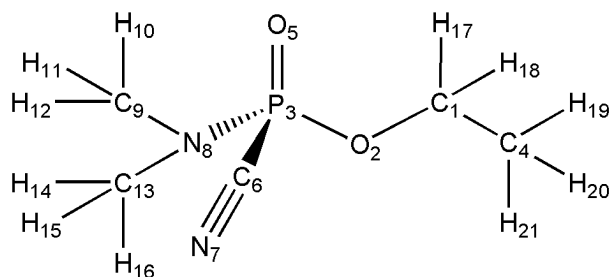


Рис. Молекулярная диаграмма табуна

Для изучения свойств высокотоксичных соединений в научных целях Конвенция разрешает использовать спектральные методы. Эти методы позволяют идентифицировать соединения по их структурным формулам, исследовать молекулярную динамику, оценивать силовые и электрооптические молекулярные параметры.

По понятным причинам спектральный эксперимент подобных соединений не может быть широко представлен на страницах периодической печати. Следовательно, использование классического подхода для получения информации о структуре соединения и его молекулярных параметрах из решения обратных спектральных задач [7] затруднено. Причины известны. Они подробно изложены, например, в диссертации [1] и монографии [6]. Табун не является исключением. Для этого соединения найденный нами в литературе эксперимент по колебательным спектрам представлен в виде спектрограммы ограниченного частотного диапазона [11]. Результаты его обработки в виде, необходимом для теоретической интерпретации, представлены нами в табл. 1.

Таблица 1

Частоты полос поглощения в максимумах (ν_{max}) и оценки интенсивностей (I) табуна (А) и гидролизованного табуна (В)

А		В		А		В		А		В	
ν_{max}	I	ν_{max}	I	ν_{max}	I	ν_{max}	I	ν_{max}	I	ν_{max}	I
—	—	908	сл.	1062	пер.	—	—	1250	пер.	1250	пер.
922	сл.	—	—	—	—	1078	ср.	1262	пер.	1265	ср.ш.
948	о.сл.	948	пер.	1098	сл.	1095	сл.	1290	пл.	1295	пер.
962	сл.	954	сл.	1108	сл.	1109	ср.	1318	сл.ш.	1320	о.сл.
973	сл.	967	о.сл.	1120	о.сл.	1123	пл.	1370	о.сл.	1368	о.сл.
993	ср.ш.	998	сл.	1145	о.сл.	—	—	1399	о.сл.	1395	сл.
—	—	1005	сл.	1164	сл.	1162	сл.	1449	пл.	1445	сл.
1015	пл.ср.	—	—	1175	пл.	1178	пл.	1458	сл.	—	—
1025	о.с.	1020	сл.пл.	—	—	1193	о.сл.ш.	1468	сл.	1470	ср.ш.
1030	пл.	1030	пер.	1204	о.сл.	1204	пер.	1478	сл.	—	—
—	—	1040	о.с.	1230	пер.	—	—	1490	о.сл.	—	—
1050	пер.	1055	пер.	1238	ср.	—	—	—	—	—	—

Примечание. Точность определения частот $\pm 2 \text{ см}^{-1}$, плеч и перегибов $\pm 5 \text{ см}^{-1}$. Обозначения формы и интенсивностей полос: пл. — плечо, пер. — перегиб; ш. — широкая, о.ш. — очень широкая, с. — сильная, о.с. — очень сильная, ср. — средняя, сл. — слабая, о.сл. — очень слабая.

Теоретическая интерпретация требует осуществления предсказательных расчетов геометрии и параметров адиабатического потенциала соединения. Такими возможностями обладают методы молекулярного моделирования. Теоретической основой этого направления в физике молекул в настоящее время являются неэмпирические квантовые методы расчета геометрической и электронной структуры молекулярных систем. В первую очередь, это методы функционала плотности (DFT-методы) [3], компьютерная реализация которых позволяет осуществлять расчет ангармонических параметров адиабатического потенциала молекулы [12].

Анализ модельных расчетов. В молекуле табуна можно вести речь о двух молекулярных фрагментах. Первый из них, назовем его этаноловым, через атом кислорода соединен с фрагментом $P(N(CH_3)_2)O(C\equiv N)$, отвечающим за токсичные свойства соединения. Естественным является предположение о проявлении в колебательном спектре табуна полос, идентифицируемых как колебания этанолового фрагмента.

Для интерпретации колебательных состояний токсичного фрагмента табуна можно использовать информацию, представленную в монографии [7] для диметиламина ($NH(CH_3)_2$) и ацетонитрила ($H_3C\equiv N$).

Поэтому предварительным этапом проведенного исследования стали модельные расчеты молекул этанола и диметиламина, позволившие определиться с базисами неэмпирических квантовых расчетов геометрии и колебательных состояний в рамках метода функционала плотности DFT/B3LYP.

Оптимизация геометрии молекулы этанола (симметрия C_s) дает следующие значения для длин валентных связей и валентных углов: $R_{OH} = 0,96 \text{ \AA}$, $R_{CH} = 1,43 \text{ \AA}$, $R_{CC} = 1,52 \text{ \AA}$, $R_{CH_2} = 1,10 \text{ \AA}$, $R_{CH_3} = 1,09 \text{ \AA}$; $A_{COH} = 107,8\text{--}109,5^\circ$. От соответствующих значений в метаноле [7], определенных из микроволнового эксперимента, отличие составляет $0,005 \text{ \AA}$ для валентных связей и $1,5^\circ$ для валентных углов. В таких же пределах изменяются значения геометрических параметров при смене базиса расчета от 6-31 G(d) до 6-311++ G(d, p). Для метильной и алкильной групп отклонение значений валентных углов от тетраэдрических значений не превышает $2,7^\circ$.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Молекула диметиламина имеет симметрию C_s [7]. Оптимизация геометрии приводит к следующим значениям длин валентных связей и углов: $R_{NC} = 1,46 \text{ \AA}$, $R_{NH} = 1,01 \text{ \AA}$, $R_{CH} = 1,09 \text{ \AA}$; $A_{CNH} = 109,1\text{--}110^\circ$, $A_{CNC} = 112,7\text{--}113,5^\circ$. Электронографические данные из работы [7] совпадают с приведенными расчетными данными для длин связей; для валентных углов эксперимент приводит следующую оценку: $A_{CNH} = 112^\circ$, $A_{CNC} = 116^\circ$, $A_{NCH} = 109,5^\circ$. Расчетные значения валентных углов метильной группы меняются в диапазоне $107,4\text{--}114,4^\circ$. Влияние базиса расчета (от 6-31 G(d, p) до 6-311++ G(d, p)) сказывается на четвертой значащей цифре для валентных связей и на третьей значащей цифре для валентных углов.

Проведенные модельные расчеты геометрии и фундаментальных колебательных состояний этанола и диметиламина дают основание использовать методы функционала плотности (DFT-методы [12]) для построения структурно-динамических моделей табуна.

Оптимизация геометрии осуществлялась для различных ориентаций токсичного фрагмента относительно мостика COP. В качестве критерия выбора возможной конформационной модели табуна являлся факт воспроизведения крутильных колебаний (внутреннее вращение отдельных молекулярных фрагментов относительно друг друга) [7]. Выше это имело место для этанола и диметиламина.

Численный эксперимент, осуществляемый с шагом 60° для двугранного угла $D(1,2,3,5)$, приводит к трем конформационным моделям, представить которые позволяют данные по двугранным углам (табл. 2). Они определяют положение этанолового и токсичного фрагментов (в $^\circ$) относительно плоскости мостика COP. Данные соответствуют базису 6-311 G(d, p). Расчетные значения длин валентных связей: $R_{CC} = 1,52 \text{ \AA}$, $R_{CO} = 1,46 \text{ \AA}$, $R_{OP} = 1,6 \text{ \AA}$, $R_{P=O} = 1,48 \text{ \AA}$, $R_{PC} = 1,81 \text{ \AA}$, $R_{PN} = 1,65 \text{ \AA}$, $R_{C=O} = 1,16 \text{ \AA}$, $R_{NC} = 1,47 \text{ \AA}$. Расхождение при смене модели или базиса $\sim 0,01 \text{ \AA}$.

Значения валентных углов табуна для каждой информационной модели приведены в табл. 2. Величины валентных углов для метильных групп отличаются от тетраэдрических значений не более чем на 3° . При смене базиса расхождение соответствующих значений валентных углов не выходит за указанные пределы для конкретной конформационной модели.

Таблица 2

Двугранные и валентные углы конформационных моделей табуна

Углы	M1	M2	M3	Углы	M1	M2	M3
$D(4,1,2,3)$	88,9	-90,4	103,5	$D(2,1,4,20)$	57,0	-176,2	176,2
$D(17,1,2,3)$	-150,4	33,2	-136,5	$D(2,1,4,21)$	176,3	-56,8	-63,7
$D(18,1,2,3)$	-34,8	149,0	-20,6	$D(17,1,4,19)$	180,0	-58,3	-59,7
$D(1,2,3,5)$	-52,8	51,6	-177,1	$D(17,1,4,20)$	-59,3	61,6	59,8
$D(1,2,3,6)$	67,4	172,5	61,1	$D(17,1,4,21)$	60,1	-179,0	179,9
$D(1,2,3,8)$	177,5	-78,0	-47,1	$D(13,8,9,10)$	178,4	179,7	-168,7
$D(2,3,8,9)$	157,5	159,6	68,3	$D(13,8,9,11)$	-60,5	-59,1	-50,4
$D(2,3,8,13)$	-43,6	-46,1	-107,8	$D(13,8,9,12)$	59,6	60,8	69,4
$D(2,1,4,19)$	-63,8	63,9	56,6				
A_{OCC}	111,0	111,0	110,4	$A_{O=PN}$	116,3	113,9	114,5
A_{COP}	121,7	121,0	127,9	A_{CPN}	106,9	106,7	102,1
$A_{OP=O}$	119,3	119,3	111,2	A_{PNC}	118,9	119,3	119,1
A_{OPC}	100,9	96,8	101,1	A_{PNC}	122,4	121,1	125,4
A_{OPN}	102,0	105,5	112,6	A_{CNC}	115,5	115,0	115,4
$A_{O=PC}$	109,8	112,8	114,3				

Результаты модельных расчетов фундаментальных колебательных состояний этанола сопоставлены в табл. 3 с экспериментальными данными, приведенными в работе [13]. Несоответствие в частотах ($\sim 250 \text{ см}^{-1}$) для валентного колебания связи О–Н объясняется условиями эксперимента. Он осуществлен для кристаллического состояния этанола, в котором имеет место межмолекулярное взаимодействие по типу водородной связи [2] с участием группы ОН. Хорошее согласие с экспериментом для остальных фундаментальных состояний достигается использованием ангармонического приближения теории молекулярных колебаний [4]. Такая возможность реализована в программном продукте [12]. Методика ее применения для кислородосодержащих соединений предложена в работах [4, 5, 10].

Кроме того, в табл. 3 представлены результаты модельных расчетов колебательных состояний диметиламина в различных базисах. Имеет место хорошее совпадение экспериментальных и рассчитанных значений частот фундаментальных колебаний при учете ангармонизма колебаний. Экспериментальные данные, приведенные в табл. 3, соответствуют ИК-эксперименту для газа [7]. Расхождение с экспериментом для диметиламина в жидком состоянии (КР-спектры) для деформационных колебаний метильных групп достигает 16 см^{-1} , что, впрочем, удовлетворяет критерию идентификации соединений в рамках модельных расчетов, предложенных авторами работы [5]. Выбор базиса расчета не имеет принципиального значения для процедуры интерпретации колебаний, однако предпочтение следует отдавать базисам 6–311 G(d, p), 6–311+ G(d, p), 6–311 G++(d, p), для которых достигается лучшее совпадение с экспериментом в высокочастотной части диапазона (колебания q_{NH} , q_{CH}).

Таблица 3

Интерпретация колебательных состояний этанола и диметиламина

Интерпретация колебательных спектров этанола и диметиламина									
Форма колеб	$\nu_{\text{эксп}}$ [7]	Минимум				Максимум			
		ν_z	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	ν_z	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
Этанол (C ₂ H ₅ OH)									
q_{OH}	3336 о.с.	3758	3581	10,8	105	3843	3676	28,0	116
q_{CH_3}	2950 с.	3098	2957	29,8	62,2	3118	2973	35,7	65,4
q_{CH_3}	2920 с.	3032	2911	16,6	143	3051	2939	18,8	156
q_{CH_2}	2880 с.	2978	2843	71,2	120	2997	2870	78,6	128,4
β_{CH_2}	1480 сл.	1526	1484	1,52	3,30	1546	1503	1,77	3,92
β_{CH_3}	1474 с.	1500	1458	3,21	12,5	1522	1481	4,15	14,5
β_{CH_2}	1422 ср.	1448	1396	13,3	3,08	1463	1414	18,5	3,62
β_{CH_3}	1381 с.	1404	1371	0,44	0,08	1421	1386	2,06	0,25
β_{COH}	1273 ср.	1258	1224	68,8	3,20	1272	1240	76,2	4,03
β_{CH_2}	1099 с.	1094	1071	22,2	6,87	1104	1082	29,1	7,29
Q_{CO}	1050 с.	1032	1005	65,1	4,10	1038	1012	69,7	4,27
β_{CH_3}	880 с.	897	879	14,2	5,85	903	886	14,9	6,46
β_{CCO}	433 ср.	418	415	12,2	0,34	418	418	13,3	0,36
q_{CH_3}	2975 с.	3105	2964	32,4	44,4	3126	2979	39,2	47,5
q_{CH_2}	2880 с.	3004	2860	53,0	110	3024	2871	59,2	113
β_{CH_3}	1450 ср.	1482	1443	7,10	8,75	1506	1466	7,73	9,93
β_{CH_2}	1273 ср.	1299	1266	0,06	8,09	1309	1276	0,11	9,26
β_{CH_2}	1149 о.сл.	1176	1143	3,73	0,65	1186	1156	3,91	0,88
β_{CH_2}	802 сл.	821	815	0,04	0,15	827	820	0,16	0,19
XX_{OH}	—	271	263	58,2	1,34	299	313	117	1,86
XX_{CC}	—	232	244	33,3	0,09	245	276	78,8	0,61

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Диметиламин (HN(CH ₃) ₂)									
q_{NH}	3339	3511	3347	0,13	88,8	3533	3371	1,83	93,5
q_{CH}	2961	3089	2946	36,1	91,5	3118	2979	48,4	102
q_{CH}	2912	3042	2907	49,2	157	3070	2943	61,3	190
q_{CH}	2847	2918	2744	154	196	2946	2805	193	289
α_{CH}	1450	1517	1475	2,19	10,6	1548	1504	11,1	23,2
α_{CH}	1460	1494	1450	8,29	0,80	1525	1484	13,3	2,02
α_{CH}	1412	1467	1435	0,94	3,53	1496	1465	1,35	8,23
β_{CH}	1243	1264	1229	0,07	0,89	1284	1250	0,32	2,62
β_{CH}	1137	1181	1149	6,40	0,65	1202	1174	8,10	3,11
Q_{CN}	930	936	915	1,58	6,22	955	934	4,90	8,27
β_{CNH}	724	760	700	118	1,97	796	744	127	3,90
γ_{CNC}	383	382	376	5,81	0,33	388	382	6,54	0,79
xx	257	261	245	2,70	0,24	271	258	3,10	0,27
q_{CH}	2961	3088	2946	27,1	63,1	3118	2978	33,6	71,5
q_{CH}	2912	3041	2907	24,6	15,9	3069	2936	31,2	19,5
q_{CH}	2802	2912	2728	47,4	17,6	2939	2809	53,5	33,5
α_{CH}	1496	1517	1475	0,70	6,84	1545	1504	15,1	32,0
α_{CH}	1479	1487	1445	2,46	9,88	1513	1480	6,67	40,3
α_{CH}	1450	1476	1433	6,36	5,92	1501	1461	7,26	15,2
β_{CH}	1412	1442	1411	0,92	4,50	1466	1436	3,43	9,97
β_{CH}	1137	1168	1132	30,95	1,39	1184	1150	33,1	1,47
β_{CH}	1082	1098	1078	0,00	4,06	1112	1093	0,11	9,08
Q_{CN}	1024	1036	1020	8,79	0,16	1046	1032	10,1	0,52
xx	230	231	214	0,11	0,27	245	230	0,20	0,49

При щели в 10 см^{-1} (по умолчанию [12]) количество ангармонических резонансов достигает 15-ти для Ферми резонансов и 6-ти для Дарлинг-Деннисона [14]. Их учет приводит к смещению фундаментальных полос, которое не превышает соответствующие смещения, полученные в рамках адиабатической теории возмущения [2].

Результаты модельных расчетов колебательных состояний первой конформационной модели табуна в различных атомных базисах приведены в табл. 4. Для второй конформационной модели различия, выходящие за пределы критерия идентификации фрагментов [5], касаются колебаний, интерпретированных как валентное колебание Q_{PC} и деформационные колебания β_{PN} , $\beta_{C=N}$. В табл. 3 они помечены звездочками в первом столбце. Для валентного колебания различие составляет порядка 30 см^{-1} , для деформационных – около 20 см^{-1} . Для третьей конформационной модели расхождение в $\sim 40 \text{ см}^{-1}$ имеет место для ряда колебаний низкочастотного диапазона (ниже 700 см^{-1}). Спектральные полосы этого диапазона интерпретируются как колебания токсичного фрагмента. При этом качественная оценка интенсивностей сохраняется. При наличии эксперимента в данной частотной области можно делать вывод о доминирующем присутствии того или иного конформера табуна.

Для этанолового фрагмента совпадение расчетных значений частот фундаментальных колебаний с имеющимся экспериментом (табл. 1) следует считать удовлетворительным, если учесть, что расчет проведен для свободной молекулы. Для токсичного фрагмента экспериментальными данными для диапазона ниже 900 см^{-1} мы не располагаем, а потому приведенные в таблице расчетные данные следует рассматривать как предсказательные. Отметим характеричность валентного колебания связи $C \equiv N$ [7], а также сильные по интенсивности

ПРИКАСПИЙСКИЙ ЖУРНАЛ:

управление и высокие технологии № 2 (10) 2010

в ИК-спектрах валентные колебания связей СС, СО и ОР мостика СОР, а также связи Р=О токсичного фрагмента. Указанные колебания аналогичным образом проявляются в ИК-спектрах зарина и зомана [8], что может служить признаком спектральной идентификации фосфорорганических соединений – GA, GB, GD-агентов [8]. Сильное по интенсивности в КР-спектре валентное колебание связи С≡N идентифицирует среди них GA-агент (молекулу табуна).

Таблица 4

Интерпретация колебательных состояний табуна

Форма колеб	$\nu_{\text{эксп}}$ [7*,11]	Минимум				Максимум			
		ν_2	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	ν_2	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
Этаноловый фрагмент									
q_{CH}	2950*	3130	2987	16,4	10,5	3158	3011	30,7	13,1
q_{CH}		3104	2963	13,6	83,6	3128	2975	29,8	104
q_{CH}	2920*	3071	2925	3,71	27,4	3095	2948	6,68	33,9
q_{CH}		3048	2914	16,9	74,4	3069	2943	18,5	80,0
q_{CH}	1490	3038	2964	12,9	122	3063	2972	16,1	149
α		1527	1483	6,07	16,8	1552	1497	12,0	30,0
α	1478,1480*	1524	1485	3,26	2,41	1549	1496	7,40	4,68
α	1468,1474*	1504	1453	5,75	1,37	1530	1477	24,4	14,6
α	1458	1503	1464	2,93	6,91	1530	1472	13,5	17,3
α	1490	1502	1454	6,67	2,23	1527	1469	20,1	13,3
α,β	1478	1493	1444	0,82	17,0	1515	1462	1,23	26,5
α,β	1468	1485	1450	4,87	12,8	1514	1462	7,50	21,4
α,β	1458	1475	1439	0,18	6,52	1496	1452	0,36	9,75
β,α	1449	1449	1416	0,07	6,14	1469	1429	0,17	10,7
β,α	1399	1425	1392	22,6	2,07	1448	1401	24,5	5,18
β,α	1370	1402	1373	1,79	0,24	1419	1378	5,77	0,57
β	1318	1339	1304	83,0	1,01	1351	1313	91,7	1,66
β,α	1290,1262	1325	1294	10,7	6,99	1336	1296	14,7	11,1
β,α	1204,1230	1192	1171	18,2	0,82	1206	1176	19,8	1,49
β	1164	1171	1139	1,78	0,46	1184	1151	2,12	1,23
β	1145	1124	1097	0,73	2,44	1137	1111	1,02	4,31
β	1108	1117	1093	13,8	3,87	1129	1097	20,7	4,25
β	1098	1087	1060	8,63	5,38	1100	1070	12,2	7,12
β	802*	818	818	1,20	1,14	823	820	1,45	1,32
Токсичный фрагмент									
$Q_{\text{C}\equiv\text{N}}$	2348*	2301	2273	8,57	89,5	2315	2287	9,02	97,9
$Q_{\text{P}=\text{O}}$	1250	1277	1258	138	8,71	1284	1262	152	9,38
Q_{NC}	1238	1208	1169	28,2	0,81	1222	1181	31,3	1,00
$Q_{\text{CO}},Q_{\text{CC}}$	1025	1044	1004	238	3,36	1060	1016	249	3,51
Q_{NC}	993	1007	974	297	7,87	1016	987	313	8,85
$Q_{\text{CC}},Q_{\text{OP}}$	922	944	924	106	2,53	948	925	116	3,29
$Q_{\text{OP}},Q_{\text{CO}}$	—	773	760	43,3	6,27	781	769	47,9	6,95
Q_{PN}	—	719	706	119	17,1	723	712	121	17,8
$Q_{\text{PC}},\beta_{\text{OP}=\text{O}}^{**}$	—	586	578	71,2	3,61	592	585	81,1	4,40
$R_{\text{CN}},\gamma_{\text{COP}}$	—	502	497	25,3	1,63	505	499	28,2	2,06
$\beta_{\text{CN}},\beta_{\text{OPC}}^{**}$	—	494	489	3,39	1,11	496	490	4,83	1,31
$\beta_{\text{O}=\text{PC}}$	—	438	431	4,40	0,47	440	435	4,72	0,53

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

β_{OPN}	—	397	392	7,39	2,88	400	393	11,3	2,94
β_{PNC}	—	382	374	8,13	0,97	384	376	12,2	1,33
β_{CNC}	383*	355	348	0,65	1,00	360	352	1,02	1,13
$\beta_{\text{OP=O}}$	—	307	304	2,97	1,24	308	305	3,69	1,45
$\beta_{\text{PNC}}, \gamma_{\text{COP}}$	—	273	267	6,69	0,41	278	270	7,12	0,44
$R_{\text{C}\equiv\text{N}}$	—	241	214	1,57	0,23	246	235	2,69	0,34
β_{PNC}	—	228	222	7,32	0,62	229	227	8,42	0,65
$\beta_{\text{C}\equiv\text{N}}^{**}$	—	164	158	0,99	1,09	168	162	2,56	1,81
$\beta_{\text{C}\equiv\text{N}}, R_{\text{C}\equiv\text{N}}$	—	128	117	9,02	0,83	131	125	9,66	1,30

Результаты проведенного численного эксперимента для молекулы табуна, сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам соединения и его отдельных фрагментов позволяют сделать вывод о достоверности предсказательных расчетов геометрии и колебательных состояний фосфорорганических соединений в рамках метода функционала плотности DFT/B3LYP.

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.
2. **Браун, П. А.** Введение в теорию колебательных спектров / П. А. Браун, А. А. Киселев. – Л. : Изд-во ЛГУ, 1983. – 223 с.
3. **Кон, В.** Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности / В. Кон // УФН. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 336–348.
4. **Минкин, В. И.** Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. В. Меняев. – Ростов н/Д. : Феникс, 1997. – 386 с.
5. **Мясоедов, Б. Ф.** Фрагментарные методы расчета ИК-спектров фосфорорганических соединений / Б. Ф. Мясоедов, Л. А. Грибов, А. И. Павлючко // Журнал структурной химии. – 2006. – Т. 47, № 3. – С. 449–456.
6. **Пулин, В. Ф.** Исследование динамики молекулярных соединений различных классов / В. Ф. Пулин, М. Д. Элькин, В. И. Березин. – Саратов : Изд-во СГТУ, 2002. – 546 с.
7. **Свердлов, Л. М.** Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970. – 550 с.
8. **Элькин, М. Д.** Возможности информационной технологии Gaussian в моделировании колебательных спектров фосфорорганических соединений (GB-, GD-, GF-agents) / М. Д. Элькин, О. В. Колесникова, О. Н. Гречухина // Вестник СГТУ. – 2008. – № 2 (32), вып. 1. – С. 105–112.
9. **Элькин, М. Д.** Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия СГТУ. – 2008. – Т. 8, № 2 – С. 24–30.
10. **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.
11. **Ernest, H.** FT-IR analysis of chemical warfare agents / H. Ernest, Jr. Braue, M.G. Pannella // Microchimica Acta. – 1988. – Vol. 94, № 1. – P. 11–16.
12. **Frisch, M. J.** Gaussian 03, Revision B.03; Gaussian / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburgh : Gaussian Inc., 2003.
13. **Mikawa, Y.** Polarized infrared spectra of single crystals of ethyl alcohol / Y. Mikawa, J. W. Brasch, R. J. Jakobsen // Spectrochimica Acta. – 1970. – Vol. 27A, № 4. – P. 529–539.
14. **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.