

problemy i puti ikh resheniya v nauke, transporte, proizvodstve i obrazovanii'2012: materialy mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii [Current problems and ways of their solution in science, transport and education'2012: Proceedings of the International Scientific-Practical Conference]. Odessa, 2012, issue 4, pp. 53–55.

5. Shcherbakov M. V., Skorobogatchenko D. A., Avdeev A. A., Al-Gunaid M. A. Problemy proektirovaniya sistem prognozirovaniya ekspluatatsionnogo sostoyaniya avtomobilnykh dorog na osnove nechetkikh neyronnykh setey [Problems of designing of forecasting of exploitation state of roads based on fuzzy neuron networks]. *Izvestiya Volgogradskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya. Aktualnye problemy upravleniya, vychislitelnoy tekhniki i informatiki v tekhnicheskikh sistemakh* [News of Volgograd State Technical University. Series. Actual problems of management, computer engineering and informatics in technical systems], 2011, issue 10, no. 3, pp. 82–87.

6. Shcherbakov M. V., Al-Gunaid M. A. Razrabotka i issledovanie gibridnykh nechetkikh modeley identifikatsii dlya prognozirovaniya potrebleniya elektroenergii [Development and research of hybrid fuzzy identification models for forecasting power consumption]. *Izvestiya Volgogradskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya. Aktualnye problemy upravleniya, vychislitelnoy tekhniki i informatiki v tekhnicheskikh sistemakh* [News of Volgograd State Technical University. Series. Actual problems of management, computer engineering and informatics in technical systems], 2012, issue 14, no. 15, pp. 66–72.

7. Shcherbakov M. V. et al. Spetsifika primeneniya intellektualnykh modeley analiza dannykh dlya povysheniya energeticheskoy effektivnosti [Specificity of application of intellectual models of data analysis for increasing energetic efficiency]. *Izvestiya Volgogradskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya. Aktualnye problemy upravleniya, vychislitelnoy tekhniki i informatiki v tekhnicheskikh sistemakh* [News of Volgograd State Technical University. Series. Actual problems of management, computer engineering and informatics in technical systems], 2010, issue 9, no. 11, pp. 72–76.

8. Ummuhan Basaran Filik, Omer Nezhik Gerek, Mehmet Kurban. A novel modeling approach for hourly forecasting of long-term electric energy demand. *Energy Conversion and Management*, 2011, vol. 52, no. 1, pp. 199–211.

УДК 539.193/.194;535/33.34

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДИМЕРОВ МОНОГИДРОКСИУРАЦИЛА СО СЛАБОЙ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗЬЮ

Элькин Михаил Давыдович, доктор физико-математических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru

Смирнов Владимир Вячеславович, кандидат физико-математических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

Джалмухамбетова Елена Азатуллаевна, кандидат физико-математических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

Гречухина Оксана Николаевна, кандидат физико-математических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

Алыкova Ольга Михайловна, кандидат педагогических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

Гайсина Альфия Рафаиловна, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

Гидроксиурацилы могут образовывать димеры со слабой водородной связью. Геометрические параметры молекул димеров незначительно изменяются по сравнению с мономерами данных соединений. Расчетные значения длин водородных связей NH---OH располагаются в интервале 1,96–2,03 Å, а связей CH---OH в интервале 2,46–2,65 Å. В работе представлены результаты модельных расчетов частот фундаментальных колебаний димеров моногидроксиурацилов и интерпретация соответствующих полос в ИК и КР спектрах. Межмолекулярное взаимодействие оказывает влияние на положение и интенсивности полос, интерпретированных как валентные и неплоские деформационные колебания связей NH, участвующих в образовании водородных связей. Смещение спектральных полос в длинноволновый диапазон может достигать величины 150 см⁻¹ для валентных колебаний и 100 см⁻¹ для неплоских деформационных колебаний связей NH. Оптимизированные структуры и частоты колебаний исследованных соединений определены с помощью метода DFT/B3LYP/6-311G(d,p).

Ключевые слова: моногидроксиурацил, урацил, димер, конформер, таутомер, колебательный спектр, ангармонизм, адиабатический потенциал

STRUCTURAL AND DYNAMIC MODELS OF DIMERS OF MONOHYDROXY URACIL WITH WEAK HYDROGEN BONDS

Elkin Mikhail D., D.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru

Smirnov Vladimir V., Ph.D. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

Dzhalmukhambetova Yelena A., Ph.D. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

Grechukhina Oksana N., Ph.D. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

Alykova Olga M., Ph.D. (Pedagogics), Associate Professor, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

Gaysina Alfiya R., Assistant, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kofl@aspu.ru

Hydroxyuracil can form dimers with weak hydrogen bond. The geometrical parameters of dimer molecules vary slightly compared to the monomers of these compounds. Calculated values of the lengths of the hydrogen bonds NH---OH are in the range of 1.96–2.03 Å, and CH---OH bonds in the range 2.46–2.65 Å. The results of model calculations of the frequencies of the fundamental vibrations of monohydroxy uracil dimers and interpretation of the appropriate bands in the IR and Raman spectra. Intermolecular interactions has an effect on the position and intensity of the bands, interpreted as valence and non-planar deformation vibrations of NH, involved in the formation of hydrogen bonds. Shift of the spectral bands in the wavelength range can reach 150 cm⁻¹ for the stretching vibration and 100 cm⁻¹ for the non-planar deformation vibrations of the NH. Optimized structures and vibration frequencies of investigated compounds are determined at the DFT/B3LYP/6-311G (d, p)

Keywords: monohydroxy uracil, uracil, dimer, conformer, tautomer, vibrational spectra, anharmonic, adiabatic potential

Введение. Молекула гидроксиурацила получается заменой одного из атомов кислорода на гидроксильную группу за счет атомов водорода связей NH. Они представляют собой возможные таутомеры урацила и могут образовывать димеры со слабой водородной связью (NiH---OjH, C5H---OjH; i = 1,3; j = 7,8). На рисунке представлены молекулярные диаграммы соответствующих мономеров и фрагменты их димеров. Теоретическая интерпретация коле-

бательных спектров указанных димеров и выявление признаков их спектральной идентификации является целью данной работы.

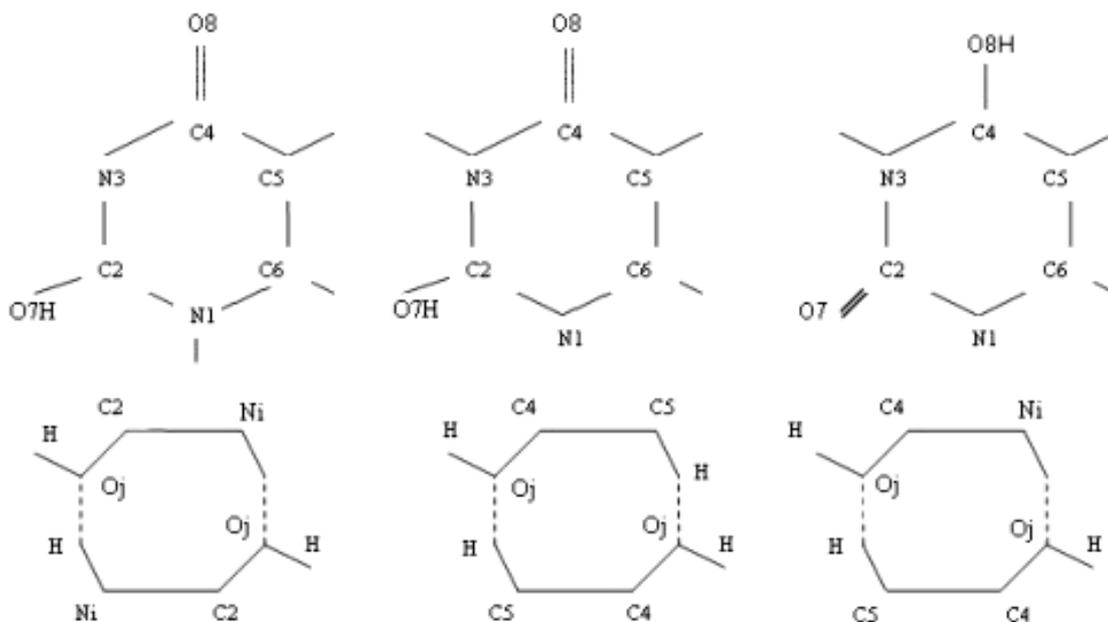


Рис. Молекулярные диаграммы моногидроксиурацила и фрагменты их димеров

Мы не располагаем экспериментальными данными по колебательным спектрам рассматриваемых мономеров и димеров, поэтому будем сопоставлять полученные результаты модельных расчетов колебательных состояний с имеющимися экспериментальными данными по спектрам ИК и КР базового соединения – урацила.

Физическим обоснованием такого методического приема служит тот факт, что электронная структура циклического фрагмента моногидроксиурацилов не претерпевает существенных изменений по сравнению с урацилом. Доказательством тому служат экспериментальные данные по ИК и КР спектрам урацила и его димеров в различных фазовых состояниях, где четко проявляются дублеты и триплеты полос, энергетическая щель между которыми $\sim 10\text{--}20\text{ см}^{-1}$. Этот факт дает основание полагать, что в реальном эксперименте присутствовала смесь конформеров урацила (в том числе и гидроксиурацилы). Такие исследования были предметом работы [9]. Однако авторы ограничились теоретическим исследованием колебательных спектров только мономеров различных таутомерных форм урацила, сопоставляя результаты модельных расчетов фундаментальных колебаний в гармоническом приближении. Отметим, что возможность использования гибридного квантового метода DFT/B3LYP [8] для получения параметров адиабатического потенциала и построения на их основе структурно-динамических моделей мономеров, димеров урацила и ряда его замещенных соединений была отмечена в ряде работ [1–3, 5, 6].

Таблица 1

Интерпретация фундаментальных колебаний 4-ГДУ (N3H)

Форма	V _{эксп} [8]	v _{анг}	Мономер		Димер		Форма	V _{эксп} [8]	v _{анг}	Мономер		Димер	
			ИК	КР	ИК	КР				ИК	КР	ИК	КР
q _{OH}	-	3628	98	120	231	179	Q, γ	987	903	33	1,0	107	5,6
q _{NH}	3436	3418	72	92	-	-	γ	756	772	18	23	34	58
	-	3352	-	-	938	460	β _{C=O}	559	583	2,3	6,9	12	13
q _{C=O, γ}	1756	1742	696	20	1292	31	β _{CO}	551	534	1,9	4,0	2,9	6,7
Q, γ, β	1641	1626	187	7,2	425	15	γ		509	6,1	3,2	13	8,2
Q, β _{NH} , β	1515	1552	467	8,7	924	19	β _{CO}		357	5,6	1,3	7,7	3,3
Q, β _{NH} , β	1461	1461	176	9,3	379	17	ρ _{C=O, χ}	804	783	46	0,4	162	0,6
Q, β _{NH} , β	1371	1385	44	6,2	15	9,1	ρ	717	719	66	0,4	8,3	0,1
β, β _{NH}	1356	1335	20	8,5	117	21	ρ _{CO, χ}	-	687	29	0,1	-	-
β _{NH, qCO}	-	1255	18	5,8	61	4,1		-	663	-	-	4,4	2,5
β _{OH}	-	1174	122	4,7	152	6,7	ρ _{NH}	-	746	-	-	112	0,5
β, Q	1082	1095	39	6,5	80	14		662	642	9,2	2,3	-	-
β, γ, Q		1041	11	5,3	22	12	χ	-	439	3,2	0,2	8,9	0,9
γ, Q	990	1003	3,3	1,4	8,2	3,9	χ _{OH}	391	378	127	2,5	217	4,1

Примечание. Частоты колебаний в см⁻¹. Интенсивности в спектрах ИК в 10³ м/моль, в спектрах КР в Å⁴/а.е.м.

Модельные расчеты и их интерпретация. Оптимизация геометрических параметров молекул димеров исследуемых соединений показала, что их изменение по сравнению с мономерами определяется вторым знаком мантииссы для валентных углов и третьим знаком для длин валентных связей.

Расчетные значения длин водородных связей NiH---OjH располагаются в интервале 1,96–2,03 Å, для связей C5H---OjH в интервале 2,46–2,65 Å. Для значений углов, определяющих структуру фрагмента с водородными связями, имеем: A(H---OC) = 126–131°, A(NH---O) = 172–178°. Отметим здесь, что образование димеров приводит к понижению их энергии электронного состояния по сравнению с суммарной энергией составляющих их мономеров на величины ~ 0,002–0,005 а.е. для соединений с водородными связями HO---HC и на 0,009–0,011 а.е. для соединений с водородными связями HO---HN. Что подтверждает ожидаемую зависимость от длины водородных связей.

Оценка положения полос осуществлялась с помощью соотношения:

$$E_v = v_s \left(n_s + \frac{1}{2} \right) + \chi_{sr} \left(n_s + \frac{1}{2} \right) \left(n_r + \frac{1}{2} \right). \quad (1)$$

Для ангармонических констант χ_{sr} использовались выражения из работы [2]:

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

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

В формулах (1)–(3) $P_\alpha = L(a; sr) Q^s P_r$; $L(a; sr)$ – постоянные Кориолиса; v_s – частоты гармонических колебаний (в см⁻¹); Q^s – безразмерные нормальные колебательные координаты; F_{srt} и F_{srtu} – кубические и квартичные силовые постоянные; $\Omega(s; \pm r; \pm t) = (v_s \pm v_r \pm v_t)^{-1}$ – резонансные функции; n_s – набор квантовых чисел колебательного состояния.

Таблица 2

Интерпретация фундаментальных колебаний 4-ГДУ(N3H)-2-ГДУ (N1H)

Форма	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	Форма	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	Форма	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
ν_{OH}	3624	91	103	$\beta_{\text{NH}}, \beta, \beta_{\text{OH}}^*$	1341	89	13	$\beta_{\text{C=O}}, \gamma$	552	6.1	1.4
ν_{OH}	3577	124	66	β_{NH}	1250	24	2,7	$\beta_{\text{CO}}, \gamma^*$	539	15	9,3
ν_{NH}	3397	496	220	$\nu_{\text{CO}}, Q, \beta_{\text{OH}}$	1219	6,3	0,3	$\gamma, \beta_{\text{C=O}}^*$	514	18	17
ν_{NH}	3311	620	319	β_{OH}	1204	52	1,4	β_{CO}	382	6,7	0,8
$\nu_{\text{C=O}}, \gamma$	1744	649	18	β_{OH}	1184	316	3,7	β_{CO}	359	4,9	2,1
$\nu_{\text{C=O}}, \gamma$	1715	258	44	β, Q	1165	50	7,3	$\rho_{\text{C=O}}, \rho$	817	51	1,1
$Q, \gamma, \beta, \beta_{\text{OH}}$	1661	476	19	β, Q	1095	40	7,3	$\rho_{\text{C=O}}, \chi$	789	94	0,3
Q, γ, β	1633	228	7,1	β, Q^*	1042	41	19	$\rho_{\text{CO}}, \rho, \chi^*$	746	59	2,8
$Q, \gamma, \beta_{\text{NH}}$	1589	366	3,3	γ, Q	984	1,8	4,9	ρ_{CO}, χ	692	16	0,5
$Q, \gamma, \beta_{\text{NH}}, \beta$	1554	462	6,2	γ	919	6,1	1,0	ρ_{NH}	715	11	0,2
$Q, \gamma, \beta_{\text{NH}}$	1506	242	5,0	Q, γ	903	57	2,9	$\rho_{\text{NH}}, \chi_{\text{OH}}$	569	20	0,7
$Q, \gamma, \beta_{\text{NH}}, \beta$	1466	205	9,8	γ	770	18	30	$\chi_{\text{OH}}, \rho_{\text{NH}}$	518	161	2,3
β	1397	8,3	3,3	γ	747	31	17	ρ_{NH}, χ	409	19	0,9
$Q, \gamma, \beta_{\text{NH}}, \beta$	1378	11	3,8	$\beta_{\text{C=O}}$	583	8,5	6,9	χ_{OH}	355	81	2,6

Примечание. Звездочкой помечены дублеты с щелью $\sim 15\text{--}20 \text{ см}^{-1}$.

Результаты модельных расчетов частот фундаментальных колебаний с базисом 6-311G** димеров моногидроксиурацилов, интерпретация соответствующих полос в спектрах ИК и КР представлены в табл. 1–4. Отметим, что учет диффузионных параметров базиса (6-311+G**), как было показано в работах [1–4], для данного класса соединений принципиального значения не имеет. Происходит смещение полос на величину $\sim 20 \text{ см}^{-1}$, качественная оценка интенсивностей сохраняется.

Таблица 3

Интерпретация фундаментальных колебаний 2-ГДУ

Форма колебаний	$\nu_{\text{эксп}}$ [8]	Таутомер N1H					Таутомер N3H				
		$\nu_{\text{анг}}$	Мономер		Димер		$\nu_{\text{анг}}$	Мономер		Димер	
			ИК	КР	ИК	КР		ИК	КР	ИК	КР
ν_{OH}	-	3571	108	89	206	150	3577	116	115	252	172
ν_{NH}	3484	3482	105	104	-	-	3424	62	93	-	-
	-	3348	-	-	1455	655	3329	-	-	949	463
$\nu_{\text{C=O}}, \gamma$	1741	1746	291	39	-	-	1772	580	25	-	-
	-	1716	-	-	578	98	1733	-	-	1073	42
Q, γ, β	1681	1669	421	18	956	28	1621	208	2,2	501	5,5
$Q, \gamma, \beta_{\text{NH}}$	1609	1595	290	2,8	771	3,8	1556	570	31	1185	60
$Q, \gamma, \beta_{\text{NH}}$	1517	1510	215	4,6	441	10	1491	8,5	15	7,9	40
β	1389	1383	7,1	6,3	39	9,1	1402	6,0	3,0	35	6,6
$\beta_{\text{NH}}, \beta, \beta_{\text{OH}}$	1359	1344	2,2	0,5	63	1,3	1320	4,3	9,0	63	11
$\nu_{\text{CO}}, Q, \beta_{\text{OH}}$	1217	1227	19	0,2	77	1,6	1268	5,8	1,8	21	0,5
β_{OH}	1192	1191	307	1,2	583	2,0	1182	117	13	166	14
β, Q	1176	1166	36	8,1	47	18	1149	152	4,0	257	12
β, Q	1065	1046	30	6,8	53	18	1078	0,6	4,0	0,4	12
γ, Q	987	988	5,1	2,4	5,4	12	994	36	4,6	57	8,6
γ	944	926	9,7	0,5	5,8	1,6	936	19	0,8	78	4,3
γ	759	748	20	17	66	36	762	8,3	17	19	47
$\beta_{\text{C=O}}, \gamma$	551	556	2,4	1,8	17	4,0	563	0,4	6,1	11	10
γ	545	544	5,1	5,6	35	19	531	0,6	5,1	11	10

$\beta_{C=O}$	516	516	5,5	2,9	11	11	516	24	0,8	46	0,8
β_{CO}	391	372	14	1,5	14	2,7	361	3,4	1,5	7,0	3,2
$\rho_{C=O}, \rho$	804	822	49	1,2	95	2,1	828	53	0,4	123	0,9
ρ_{CO}, ρ, χ	757	747	1,5	2,0	0,0	6,0	759	18	1,4	4,8	2,5
ρ_{NH}, ρ_{CO}	717	698	24	0,6	56	0,8	687	-	-	54	1,3
ρ_{NH}, χ_{OH}	657	636	-	-	154	0,9	778	-	-	88	1,3
ρ_{NH}, χ_{OH}	-	509	154	1,3	-	-	664	60	2,0	-	-
χ_{OH}, ρ_{NH}	516	515	25	3,2	201	7,1	507	114	3,2	199	4,7
χ, ρ_{NH}	393	411	33	1,4	10	1,2	416	31	0,8	35	2,3

Межмолекулярное взаимодействие сказывается на положении и интенсивности полос, интерпретированных как валентные (ν_{NH}) и неплоские деформационные (ρ_{NH}) колебания связей NH, участвующих в образовании водородных связей. Смещение в длинноволновый диапазон может достигать величины $\sim 150 \text{ см}^{-1}$ для валентных колебаний и $\sim 100 \text{ см}^{-1}$ для неплоских деформационных колебаний связей NH. Смещение остальных фундаментальных полос при димеризации не превосходит величины 20 см^{-1} , поэтому в таблицах для них указаны усредненные значения расчетных значений частот ($\nu_{анг}$). Дублетное расщепление указанных фундаментальных частот колебаний как результат образования димеров укладывается в те же границы $\sim 20 \text{ см}^{-1}$. Поэтому спектральная идентификация таутомеров в диапазоне ниже 1600 см^{-1} возможна лишь с привлечением данных по интенсивностям полос. В первую очередь следует рассматривать сильные по интенсивности в ИК спектрах полосы, интерпретированные как крутильные колебания связей OH гидроксильного фрагмента (χ_{OH}). Как следует из табл. 2–5, различие в значении частот данных колебаний в различных таутомерах может достигать величины $\sim 120 \text{ см}^{-1}$. Отметим, что в низкочастотном диапазоне (ниже 600 см^{-1}) интенсивность других фундаментальных полос меньше на порядок.

Таблица 4

Интерпретация фундаментальных колебаний 4-ГДУ (C5H---OH)

Таутомер N1H						Таутомер N3H					
Форма колебаний	$\nu_{анг}$	Мономер		Димер		Форма колебаний	$\nu_{анг}$	Мономер		Димер	
		ИК	КР	ИК	КР			ИК	КР	ИК	КР
ν_{OH}	3552	83	109	160	188	ν_{OH}	3620	81	125	161	168
ν_{NH}	3448	75	110	160	253	ν_{NH}	3403	40	102	84	199
ν	3096	0,6	110	77	406	ν	3094	0,8	104	17	265
ν	3131	3,3	96	-	-	ν	-	-	-	-	-
	3054	-	-	11	175		2986	26	144	51	249
$\nu_{C=O}, \nu$	1778	666	17	-	-	$\nu_{C=O}, \nu$	-	-	-	-	-
	1749			1447	41		1745	687	19	1472	48
ν, β	1640	313	7,8	706	21	ν, γ, β	1629	149	11	258	25
ν, β, ν_{OH}	1559	186	17	355	30	$\nu, \gamma, \beta_{NH}, \beta$	1542	510	12	1175	25
$\nu_{CO}, \nu, \beta, \gamma$	1458	166	7,2	369	16	$\nu, \gamma, \beta_{NH}, \beta$	1444	8,6	4,5	19	11
β_{NH}, ν_{OH}	1439	37	1,7	144	4,3	$\nu, \gamma, \beta_{NH}, \beta$	1382	30	6,1	52	10
β, ν_{OH}	1342	1,2	8,3	-	-	β, β_{NH}	1329	92	8,5	197	27
	1318	-	-	16	16		-	-	-	-	-
β_{OH}, β	1232	125	2,3	236	5,0	β_{NH}	1256	82	5,0	194	9,8
β, ν	1177	98	4,1	299	6,9	β_{OH}	1167	217	4,4	353	6,6
β_{OH}, ν	1144	194	7,4	250	12	β, ν	1081	3,3	8,1	7,2	22
β	1092	8,2	9,1	31	30	β, γ, ν	1038	6,0	4,3	11	11
ν	979	1,1	1,3	7,2	7,4	$\gamma, \nu, \nu_{C=O}$	987	1,4	1,9	4,9	4,4
ν, ν	910	6,7	1,6	8,0	3,5	ν, γ	893	14	0,7	21	1,7

γ, Q	752	7,0	22	19	46	γ	775	29	21	65	44
γ	568	0,9	6,4	2,7	21	$\beta_{C=O}$	581	2,8	6,7	8,7	20
$\beta_{C=O}, \beta_{CO}$	544	0,4	0,9	1,6	1,4	β_{CO}	535	7,7	2,1	12	5,6
$\gamma, \beta_{C=O}, \beta_{CO}$	525	7,4	3,2	26	6,3	γ	507	2,9	4,1	10	7,5
β_{CO}	372	19	1,2	26	2,5	β_{CO}	350	12	3,2	18	7,7
$\rho_{C=O}, \chi$	780	47	0,3	75	0,9	$\rho_{C=O}, \chi$	777	47	0,3	128	0,5
ρ, ρ_{CO}, χ	778	26	0,3	75	1,1	ρ	760	28	0,1	17	0,2
ρ, ρ_{CO}, χ	728	6,8	1,1	2,2	1,2	ρ_{CO}, χ	687	21	0,1	28	0,0
ρ_{NH}	648	120	0,3	218	0,5	ρ_{NH}	579	69	3,9	141	7,6
χ_{OH}, χ	559	46	5,2	100	9,6	χ	435	30	0,0	61	0,0
χ	408	261	0,9	45	2,4	χ_{OH}	256	77	2,4	137	4,3

Следует отметить, что в рассматриваемых молекулярных объектах энергетическая щель между соседними фундаментальными колебательными полосами в диапазоне 1700–600 см^{-1} превышает, как правило, величину 50 см^{-1} . Такое разрешение позволяет использовать для задач спектральной идентификации сильные по интенсивности полосы в ИК спектрах. В первую очередь это относится к полосам в диапазоне 1400–1100 см^{-1} , интерпретированным как деформационные колебания гидроксильного фрагмента (β_{OH}) и связей NH (β_{NH}).

Заключение. Представленные результаты модельных расчетов структуры и колебательных состояний димеров моногидроксиурацилов дают основание сделать вывод, что методы функционала плотности DFT/B3LYP позволяют осуществлять достоверные предсказательные расчеты параметров структурно-динамических моделей таутомеров и димеров соединений урацилового ряда.

Список литературы

1. Элькин М. Д. Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия СГУ. Сер. Физика. – 2008. – Т. 8, № 2. – С. 24–30.
2. Элькин М. Д. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью / М. Д. Элькин, Л. М. Бабков // Известия СГУ. Сер. Физика. – 2011. – Т. 11, № 1. – С. 20–25.
3. Элькин П. М. Анализ колебательных спектров метилзамещенных урацила в ангармоническом приближении / П. М. Элькин, М. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2006. – Т. 73, № 4. – С. 431–436.
4. Элькин П. М. Математическое моделирование структуры и динамики урацила и азаурацилов / П. М. Элькин, М. А. Эрман, В. М. Карташов // Вестник Волгоградского государственного университета. – 2012. – № 10 (97). – С. 57–63.
5. 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.
6. Эрман Е. А. Системный анализ структурно-динамических моделей биомолекул. Мономеры галоидоурацилов. Димеры хлорурацилов / Е. А. Эрман, М. Д. Элькин, Н. А. Равчеева, А. М. Лихтер, Е. А. Джалмухамбетова, О. М. Алыкова // Естественные науки. – 2012. – № 2 (39). – С. 213–227.
7. Colarusso P. The infrared spectra of uracil, thymine, and adenine in gas phase / P. Colarusso, K. Zhang, B. Guo, P. F. Bernath // Chemical Physics Letters. – 1997. – Vol. 269. – P. 29–48.
8. Gaussian 03. Revision B.3. / M. J. Frisch et al. – Pittsburgh PA. : Gaussian Inc., 2003.
9. Ten G. N. Calculation and analysis of the structure and vibrational spectra of uracil tautomers / G. N. Ten, V. V. Nechev, R. S. Sherbakov, V. I. Baranov // Journal of Structural Chemistry. – 2010. – Vol. 51, № 1. – P. 32–39.

References

1. Elkin M. D., Dzhalmukhambetova Ye. A., Grechukhina O. N. Proyavlenie mezhmolekulyarnogo vzaimodeystviya v dimerakh uratsila [The manifestation of intermolecular interaction in uracil dimers]. *Izvestiya Saratovskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya Fizika* [News of Saratov State University. Series Physics], 2008, vol. 8, issue 2, pp. 24–30.
2. Elkin M. D., Babkov L. M. Uchet anгармонического smeshcheniya polos v modelnykh raschetakh kolebatelnykh spektrov dimerov s vodorodnoy svyazyu [The accounting of anharmonic band shift in model calculations of vibrational spectra of dimers with hydrogen bond]. *Izvestiya Saratovskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya Fizika* [News of Saratov State University. Series Physics], 2011, vol. 11, issue 1, pp. 20–24.
3. Elkin P. M., Erman M. A., Pulin V. F. Analiz kolebatelnykh spektrov metilzameshchennykh uratsila v anгармоническом priblizhenii [Analysis of vibrational spectra of methyl-substituted uracils in the anharmonic approximation]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2006, vol. 73, issue 4, pp. 431–436.
4. Elkin P. M., Erman M. A., Kartashov V. M. Matematicheskoe modelirovanie struktury i dinamiki uratsila i azauratsilov [Mathematical modeling of the structure and dynamics of uracil and azauracil]. *Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo universiteta* [Bulletin of Volgograd State University], 2006, no. 10 (97), pp. 57–63.
5. Erman Ye. A., Elkin M. D., Dzhalmukhambetova Ye. A. Modelnye otsenki anгармонического smeshcheniya polos v kolebatelnykh spektrakh dimerov karbonovykh kislot [Model estimates of anharmonic band shift in vibrational spectra of carboxylic acid dimers]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2010, no. 4 (12), pp. 53–58.
6. Erman Ye. A., Elkin M. D., Ravcheeva N. A., Likhter A. M., Dzhalmukhambetova Ye. A., Alykova O. M. Sistemnyy analiz strukturno-dinamicheskikh modeley biomolekul. Monomery galoidouratsilov. Dimery khlorouratsilov [System analysis of structural and dynamic models of biomolecules. Halogenuracil monomers. Chloruracil dimers]. *Yestestvennye nauki* [Natural Sciences], 2012, no. 2 (39), pp. 213–227.
7. Colarusso P., Zhang K., Guo B., Bernath P. F. The infrared spectra of uracil, thymine, and adenine in gas phase. *Chemical Physics Letters*, 1997, vol. 269, pp. 29–48.
8. Frisch M. J. et al. *Gaussian 03. Revision B.3*. Pittsburgh PA., Gaussian Inc., 2003.
9. Ten G. N., Nechev V. V., Sherbakov R. S., Baranov V. I. Calculation and analysis of the structure and vibrational spectra of uracil tautomers. *Journal of Structural Chemistry*, 2010, vol. 51, no. 1, pp. 32–39.

УДК 539.193/.194;535/33.34

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДИАБАТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ МОНОГИДРОКСИАЗАУРАЦИЛОВ В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

Элькин Михаил Давыдович, доктор физико-математических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru

Смирнов Владимир Вячеславович, кандидат физико-математических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

Джалмухамбетова Елена Азатуллаевна, кандидат физико-математических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru

Гречухина Оксана Николаевна, кандидат физико-математических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kofl@aspu.ru