

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 539.193/.194;535/33.34

ПОСТРОЕНИЕ СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ФТАЛИМИДА И ИЗАТИНА В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

О.Н. Гречухина, Е.А. Джалмухамбетова,
А.М. Лихтер, П.М. Элькин

В приближении функционала плотности DFT/B3LYP проведен теоретический анализ колебательных спектров фталимида и изатина в ангармоническом приближении. Оценено влияние межмолекулярного взаимодействия в димерах соединений.

Ключевые слова: колебательные спектры, фталимид, изатин, резонансные эффекты, ангармонизм колебаний, водородная связь.

Key words: vibrational spectra, phthalimide, isatin, dimer, anharmonicity, hydrogen bonding.

Возможности неэмпирических квантовых методов для построения структурно-динамических моделей сопряженных циклических соединений продемонстрированы в работе [6] на таутомерах и димерах пурина. Предложенная в данной работе методика теоретического анализа колебательных состояний молекулярных систем в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний использована для оценки межмолекулярного взаимодействия в димерах фталимида и изатина (рис. 1).

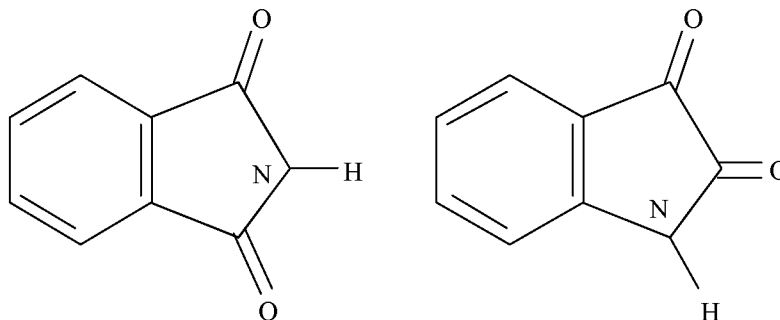


Рис 1. Структура молекул фталимида и изатина

Экспериментальные данные по колебательным спектрам исследуемых соединений неоднократно представлялись в периодической литературе, из них наглядно демонстрируют проявление межмолекулярного взаимодействия [2, 4, 8]. В первых двух работах эксперимент осуществлен для паров и растворов фталимида и касался поведения полос поглощения, интерпретированных как валентные колебания связей NH и CO, в последней – для кристаллического состояния фталимида и изатина в ИК- и КР-спектрах в области 4000–200 см⁻¹, где наличие межмолекулярного взаимодействия типа водородной связи между атомами кислорода и водорода пятичленного фрагмента считалось установленным фактом.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Попытка интерпретации спектра фундаментальных состояний, принадлежащих к группам симметрии C_{2v} и C_s соответственно, мономеров фталимида и изатина, предпринятая в работе [8], основывалась на сопоставлении с отнесением колебаний для ортозамещенных бензола, ангидридов и имидов. Димеры обоих соединений принадлежат к группе симметрии C_i , для которой имеет место правило альтернативного запрета в ИК- и КР-спектрах. Теоретическая интерпретация колебательных спектров фталимида и изатина, основанная на привлечении неэмпирических расчетов параметров адиабатического потенциала, осуществлялась неоднократно, но в рамках гармонического приближения теории молекулярных колебаний. Достаточно сослаться на недавние публикации [11–14].

Поскольку величина смещения спектральных полос за счет ангармонизма колебаний и наличия межмолекулярного взаимодействия могут иметь одинаковый порядок [6], следует, для достоверности, осуществлять расчеты в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний, учитывая возможность резонансного взаимодействия между основными и обертонными колебательными состояниями [5].

Анализ колебательных состояний. Расчеты параметров адиабатического потенциала мономеров и димеров фталимида и изатина осуществлялся в рамках метода функционала плотности DFT/B3LYP [7] для 12-ти базисных наборов: от 6–31 G(d) до 6–311++ G(d, p) [10], учитывающие диффузионные и поляризационные эффекты атомных орбиталей.

Для шестичленного цикла мономера фталимида длины валентных связей находятся в диапазоне $R_{CC} = 1,38\text{--}1,40 \text{ \AA}$, валентные углы $A_{CCC} = 117,4\text{--}121,5^\circ$, $A_{CCH} = 119,3\text{--}121,7^\circ$. Для пятичленного цикла: $R_{CC} = 1,50 \text{ \AA}$, $R_{CN} = 1,40 \text{ \AA}$, $R_{CO} = 1,21 \text{ \AA}$, $A_{CCC} = 108,2^\circ$, $A_{CCN} = 104,6^\circ$, $A_{CNC} = 113,4^\circ$.

Для шестичленного цикла мономера изатина: $R_{CC} = 1,39\text{--}1,41 \text{ \AA}$, $A_{CCC} = 117,5\text{--}120,8^\circ$, $A_{CCH} = 118,7\text{--}121,6^\circ$. Для пятичленного цикла: $R_{CC} = 1,47 \text{ \AA}$ и $1,57 \text{ \AA}$, $R_{CN} = 1,39\text{--}1,40 \text{ \AA}$, $R_{CO} = 1,20\text{--}1,21 \text{ \AA}$, $A_{CCC} = 104,9\text{--}110,2^\circ$, $A_{CCN} = 104,8^\circ$, $A_{CNC} = 112,2^\circ$.

Образование димеров приводит к изменению длин валентных связей и валентных углов, не примыкающих к водородным связям, на величины не более $0,01 \text{ \AA}$ и $0,4^\circ$ соответственно. Для прилежащих валентных углов пятичленного цикла изменение достигает $1,4^\circ$. Длины водородных связей $R_{O\cdots H}$ в фталимиде и изатине равны $1,92 \text{ \AA}$ и $1,88 \text{ \AA}$ соответственно. Значения валентных углов: $A_{CO\cdots H} = 123,7\text{--}127,5^\circ$, $A_{NH\cdots O} = 163,9\text{--}167,1^\circ$ для фталимида, $A_{CO\cdots H} = 119,6\text{--}122,9^\circ$, $A_{NH\cdots O} = 166,8\text{--}169,8^\circ$ для изатина определяются выбранным базисом расчета.

Необходимость неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала иллюстрируют предложенные в работах [8, 9, 15] отнесения фундаментальных частот колебаний кристаллического фталимида (табл. 1). Указанные отнесения приписаны свободной молекуле, тогда как в кристаллическом состоянии имеет место межмолекулярное взаимодействие типа водородной связи между атомами кислорода и водорода пятичленного цикла. Теоретический анализ колебательных спектров фталимида, проведенный в работе [9] с целью подтверждения предложенной интерпретации, дает отклонение от эксперимента $\sim 100 \text{ см}^{-1}$, что ставит под сомнение как саму интерпретацию колебаний, так и оценку гармонического силового поля.

Наличие атомов водорода делает необходимым решение задачи в ангармоническом приближении, что позволяет интерпретировать деформационные колебания связей СН в диапазоне $1000\text{--}1600 \text{ см}^{-1}$, куда могут попасть валентные колебания шестичленного и пятичленного кольца [3]. Результаты анализа колебательных состояний мономеров фталимида и изатина в различных атомных базисах представлены в табл. 2, 3.

Для фталимида в соответствии с правилами отбора неплоские колебания типа симметрии A_2 не проявляются в ИК- и КР-спектрах. Экспериментальные данные, приведенные в табл. 2, относятся к кристаллическому состоянию вещества, где имеет место димеризация. Ее влияние на силовое поле мономера носит локальный характер, что отражается в хорошем согласии эксперимента с расчетом в ангармоническом приближении для колебаний, относящихся к шестичленному фрагменту.

Таблица 1

**Сопоставление отнесений частот фундаментальных колебаний (в см⁻¹)
для мономера фталимида**

Тип сим.	V _{эксп}			Тип сим.	V _{эксп}			Тип сим.	V _{эксп}		
	[4]	[12]	[13]		[4]	[12]	[13]		[4]	[12]	[13]
A1	3200	3203	3220	A1	356	354	359	B2	261	259	262
A1	3085	3076	3077	B2	3095	3086	3090	A2	–	974	–
A1	3060	3048	3064	B2	3045	3063	3051	A2	–	892	–
A1	1772	1766	1768	B2	1731	1736	1745	A2	–	814	–
A1	1605	1607	1582	B2	1578	1607	1607	A2	–	579	–
A1	1467	1469	1438	B2	1435	1432	1470	A2	–	382	454
A1	1386	1369	1389	B2	1355	1386	1362	A2	164	157	167
A1	1304	1306	1309	B2	1285	1290	1291	B1	973	920	976
A1	1164	1167	1167	B2	1183	1181	1186	B1	793	803	798
A1	1136	1145	1146	B2	1091	1088	1092	B1	735	718	717
A1	999	1012	1016	B2	1050	1052	1050	B1	715	510	–
A1	744	746	746	B2	816	794	814	B1	665	220	407
A1	646	650	646	B2	715	691	–	B1	407	196	202
A1	547	546	551	B2	532	405	535	B1	200	165	173

Согласно модельным расчетам, частота валентного колебания связи NH в мономере меняется в диапазоне 3470–3487 см⁻¹, что хорошо согласуется с экспериментом [4]: для паров фталимида – 3470 см⁻¹, в растворе CCl₄ – 3449 см⁻¹. Полосы 1783 см⁻¹ и 1745 см⁻¹ в работе [4] интерпретируются как валентные колебания связей C=O.

Согласно расчетам для фталимида имеет место ~ 30-ти резонансов Ферми между фундаментальными и обертовыми состояниями при значении энергетической щели, по умолчанию равной 10 см⁻¹. Однако смещение резонирующих колебательных состояний не выходит за границы, полученные во втором порядке адиабатической теории возмущения [1]:

$$\Delta E = \chi_{sr}(n_s + 1/2)(n_r + 1/2)(1 + \delta_{sr}/2), \quad (1)$$

где χ_{sr} – ангармонические постоянные, n_s – колебательные квантовые числа.

Выбор базиса для квантового расчета в рамках используемого метода функционала плотности (табл. 2) существенного влияния на значения вычисленных молекулярных параметров для мономера фталимида не имеет.

Моделирование колебательных состояний димера фталимида подтверждает, что образуются две водородные связи между атомами водорода и азота мономеров. При этом в исходной геометрии длина связи H---O полагалась равной 1,9 Å, а угол NH---O ~ 178°. Оптимизация геометрии димера фталимида приводит к значениям геометрических параметров, указанным выше, указывает на образование двух водородных связей и принадлежность соединения к симметрии C_{2h}, а наличие центра симметрии – к правилу альтернативного запрета. В таблице 4 мы ограничились лишь теми состояниями, которые интерпретированы как валентные и деформационные колебания связей C=O и NH, участвующие в образовании водородных связей. Образование димера фталимида приводит к понижению частоты валентного колебания связи NH на величину ~ 270 см⁻¹. При этом резко возрастают частоты непоплотских деформационных колебаний этой связи. Частоты валентных и деформационных колебаний связей C=O изменяются незначительно по сравнению с мономером и легко интерпретируются.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Таблица 2

Интерпретация фундаментальных колебаний мономера фталимида

Тип сим.	Форма колеб.	ν_{exp} [4, 10, 11]	Минимум				Максимум			
			ν_h	ν_{anh}	ИК	КР	ν_h	ν_{anh}	ИК	КР
A1	ν_{NH}	3187с	3630	3471	74,5	148	3655	3487	102	159
A1	q	3084	3201	3061	7,84	251	3224	3080	12,7	276
A1	q	3060	3186	3051	4,79	107	3209	3070	9,79	116
A1	ν_{CO}	1772с	1831	1814	104	94,5	1861	1824	146	157
A1	Q, β	1604сл	1642	1608	2,26	4,89	1660	1619	3,01	7,25
A1	β	1468	1492	1466	0,30	0,46	1509	1474	1,33	0,63
A1	Q, β	1386с	1390	1349	55,1	12,3	1409	1380	65,9	14,3
A1	Q', γ'	1307о.с	1314	1294	226	30,1	1331	1297	239	34,9
A1	β ,Q	1180сл	1190	1170	0,17	7,94	1200	1176	0,54	10,3
A1	β	1128сл	1160	1145	0,13	17,9	1168	1145	0,20	27,1
A1	Q, β	1012	1031	1015	1,41	19,6	1039	1021	2,25	29,1
A1	γ	744	755	745	2,51	11,3	758	747	3,01	15,5
A1	γ'	646ср	647	637	11,6	10,2	650	639	13,1	11,2
A1	γ	548ср	550	546	6,97	6,91	553	546	7,87	8,11
A1	β_{CCO}	356ср	341	330	13,4	3,06	344	350	14,9	3,27
A2	ρ_{CH}	892	908	894	0,00	0,06	914	897	0,00	4,16
A2	ρ_{CO}	814	790	799	0,00	0,01	816	809	0,00	0,19
A2	χ	-	669	671	0,00	0,25	685	674	0,00	0,44
A2	ρ_{CC}	454	456	464	0,00	0,27	468	465	0,00	0,65
A2	χ'	164	136	137	0,00	0,93	141	139	0,00	2,41
B1	ρ_{CH}	792сл	798	792	4,85	0,17	811	797	17,8	1,19
B1	ρ_{CO}	715с	720	715	64,6	0,08	733	722	98,6	3,89
B1	ρ_{NH}	548с	556	562	101	0,82	589	567	123	4,56
B1	χ	407сл	413	410	0,25	0,00	420	412	1,15	0,03
B1	ρ_{CC}	201сл	182	186	1,28	0,91	188	187	2,89	1,97
B1	χ'	158	142	152	1,49	0,16	149	154	2,18	0,44
B2	q	3047	3174	3069	1,44	56,8	3196	3090	2,00	62,0
B2	ν_{CO}	1750о.с	1798	1779	642	20,0	1832	1792	833	34,8
B2	Q, β	1578	1647	1615	12,7	32,2	1666	1629	17,6	44,1
B2	β ,Q	1435	1497	1468	5,54	1,09	1513	1478	6,45	1,83
B2	β_{CNH}	1307	1346	1296	18,7	7,38	1363	1305	26,5	8,92
B2	β	1287сл	1309	1284	0,00	0,00	1317	1288	0,12	0,07
B2	β ,Q	1167	1190	1171	8,74	5,44	1199	1173	14,7	8,30
B2	Q, β	1089ср	1098	1073	13,1	0,60	1105	1075	21,6	1,54
B2	Q', β_{CNH}	1052с	1038	1005	73,1	0,51	1048	1013	110	1,36
B2	γ	817сл	808	799	1,23	3,38	811	799	1,49	3,91
B2	γ , β_{CCO}	665сл	663	657	1,64	1,59	668	662	1,81	2,03
B2	γ'	534ср	533	526	9,61	0,71	535	527	10,7	0,77
B2	γ , β_{CCO}	246сл.	242	243	0,17	2,24	246	244	0,33	2,38

Примечание. Качественная оценка интенсивности полос ИК-спектров: о.с. – очень сильная, с. – сильная, ср. – средняя, сл. – слабая. Интенсивности в ИК-спектрах в Км/Моль, в КР-спектрах в $\text{\AA}^4/\text{а.е.м.}$ Штрихами помечена форма колебаний пятичленного фрагмента.

Для остальных колебаний образование димера сказывается несущественно. Исключение составляет частота плоского кольцевого колебания пятичленного фрагмента типа симметрии B_2 ($\sim 1360 \text{ см}^{-1}$). В эксперименте [6, 9, 15] такая полоса обнаружена всеми исследователями. В мономере (табл. 2) это колебание на основании квантового расчета отнесено к сильной по интенсивности полосе $\sim 1310 \text{ см}^{-1}$.

Предлагаемая интерпретация спектра фундаментальных колебаний мономера изатина представлена в табл. 3. Понижение симметрии приводит к смешиванию форм колебаний, однако отличие частот колебаний шестичленного фрагмента изатина от фталимида не позволяет идентифицировать соединения. Для пятичленного цикла – для колебаний связей C=O и CN. Это касается как самих частот фундаментальных колебаний мономеров фталимида и изатина, так и интенсивностей полос в ИК- и КР-спектрах. Для этого следует учесть корреляцию симметрии колебаний ($A' \Rightarrow A1 + B2$; $A'' \Rightarrow A2 + B1$) и правила отбора [1].

Таблица 3

Интерпретация фундаментальных колебаний мономера изатина

Тип сим.	Форма колеб.	ν_{exp} [4]	Минимум				Максимум			
			ν_h	ν_{anh}	ИК	КР	ν_h	ν_{anh}	ИК	КР
A'	q_{NH}	3188m	3628	3445	34,6	143	3653	3468	52,1	166,9
A'	q_{CH}	3108w	3199	3072	8,89	244	3222	3089	16,9	272
A'	q_{CH}	3059w	3189	3077	7,68	63,7	3211	3102	16,5	75,2
A'	q_{CH}	3037w	3183	3051	3,23	111	3205	3069	6,47	121
A'	q_{CH}	3015w	3172	3066	2,15	51,5	3193	3076	2,93	57,2
A'	q_{CO}	1744s	1832	1812	226	22,6	1861	1833	306	35,8
A'	q_{CO}	1723vs	1812	1782	341	103	1833	1795	426	145
A'	Q, β	1614s	1657	1618	297	50,5	1676	1630	337	64,8
A'	Q, β	1596sh	1635	1598	6,54	4,72	1653	1610	13,6	7,23
A'	β	1483w	1511	1482	22,6	4,36	1528	1492	29,6	6,69
A'	β	1462s	1497	1468	80,5	1,87	1515	1477	89,2	2,32
A'	β_{CNH}	1363	1405	1380	44,6	17,0	1420	1383	49,9	23,9
A'	β	1329s	1349	1319	61,2	2,08	1363	1329	64,1	6,87
A'	β	1281w	1300	1276	16,8	22,8	1314	1285	27,4	31,5
A'	β	1263mw	1257	1232	9,28	1,83	1269	1235	10,7	6,08
A'	γ, β	1198mw	1207	1185	30,9	4,47	1216	1199	41,8	8,98
A'	β	1183w	1190	1168	42,6	15,0	1202	1173	55,3	27,5
A'	β	1141mw	1157	1128	38,5	34,6	1172	1146	59,3	47,4
A'	β	1092m	1114	1097	26,3	0,73	1121	1099	33,8	1,45
A'	Q	1012w	1039	1021	0,34	20,8	1047	1026	0,88	31,4
A'	Q'	944m	941	924	19,1	2,07	949	928	22,4	4,52
A'	γ	884mw	889	880	11,3	2,66	893	881	13,4	3,44
A'	γ, Q'	734m	732	722	3,12	16,8	736	725	3,59	21,1
A'	γ'	660ms	659	655	12,5	1,05	661	658	13,4	1,84
A'	γ	635m	647	634	0,02	2,42	651	647	0,53	2,69
A'	γ'	542vw	546	542	4,28	6,53	548	543	5,23	7,55
A'	γ	478m	485	474	2,75	11,1	486	477	3,29	11,8
A'	β_{CCO}	337m	311	308	3,35	2,25	315	310	3,43	2,65
A'	β_{CCO}	272m	267	264	3,45	0,88	270	265	3,56	0,94
A''	ρ_{CH}	988vw	984	981	0,04	0,10	1001	985	0,09	0,18
A''	ρ_{CH}	949sh	956	952	0,73	0,02	971	956	1,18	1,54
A''	ρ_{CH}	875sh	873	866	0,72	0,05	881	869	1,03	4,68
A''	ρ_{CO}, χ'	815w	823	815	2,16	0,01	837	824	4,90	0,39
A''	ρ_{CH}	769ms	765	759	44,7	0,03	770	759	59,4	1,30
A''	$\rho_{CO}, \chi, \rho_{CC}$	718sh	731	724	1,43	0,01	737	727	11,4	0,85
A''	χ, ρ_{CC}	535vw	549	545	0,01	0,01	555	546	5,07	0,12
A''	ρ_{NH}, ρ_{CO}	—	510	502	115	0,41	528	507	129	1,50
A''	ρ_{NH}, χ	454m	421	420	11,1	0,40	434	428	19,1	1,28
A''	$\chi, \rho_{NH}, \rho_{CO}$	386vw	386	381	5,35	0,46	391	385	7,65	1,17
A''	χ', ρ_{NH}	257	253	259	0,00	1,05	263	262	0,60	2,58
A''	χ'	—	138	139	0,35	0,68	142	141	0,57	2,00
A''	χ', ρ_{NH}	—	96	100	0,09	0,20	102	103	0,24	0,68

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Сравнение расчетных и экспериментальных полос в колебательных спектрах димеров изатина и фталимида, интерпретированных как проявление колебаний связей NH и CO, участвующих в образовании водородных связей, приведено в табл. 4. Имеет место различие в частоте интенсивного деформационного колебания связи CN ($\sim 100 \text{ см}^{-1}$). По остальным колебаниям идентификация соединений затруднена.

Таблица 4

Интерпретация колебаний в димерах фталимида и изатина

Тип сим.	Форма колеб.	ν_{exp} [11]	Минимум			Максимум		
			ν_{h}	ν_{m}	КР/ИК	ν_{h}	ν_{m}	КР/ИК
Димер фталимида								
AG	q_{NH}	3202	3361	3204	1103	3370	3212	1287
AG	q_{CO}	1772	1821	1760	184	1852	1788	274
AG	q_{CO}	1750	1766	1706	147	1795	1735	162
AG	β_{CNH}	1386	1416	1373	84,3	1434	1390	94,5
AG	β_{CO}	356	355	347	7,74	356	348	8,75
AG	β_{CO}	246	259	253	5,39	259	254	6,00
AU	ρ_{NH}	816	812	792	147	845	823	201
AU	ρ_{CO}	795	801	781	13,3	811	790	32,9
AU	ρ_{CO}	715	722	705	117	733	715	146
BG	ρ_{NH}	802	802	782	0,34	812	791	3,15
BG	ρ_{CO}	792	796	776	0,13	807	787	0,61
BG	ρ_{CO}	715	721	703	0,43	733	715	8,64
BU	q_{NH}	3202	3391	3232	2495	3396	3236	2726
BU	q_{CO}	1772	1827	1765	301	1852	1788	375
BU	q_{CO}	1750	1771	1712	1533	1795	1735	1863
BU	β_{CNH}	1386	1410	1367	56,0	1428	1384	75,8
BU	β_{CO}	356	361	353	64,45	364	356	65,64
BU	β_{CO}	256	255	250	0,76	364	356	1,19
Димер изатина								
AG	q_{NH}	3188m	3293	3141	1179	3315	3161	1280
AG	q_{CO}	1744s	1813	1752	133	1836	1774	202,0
AG	q_{CO}	1723vs	1769	1710	134	1794	1733	158
AG	β_{CNH}	1462s	1457	1412	94,1	1475	1429	123,03
AG	β_{CO}	337	334	326	9,04	335	328	10,60
AG	β_{CO}	272	272	266	2,21	275	269	2,43
AU	ρ_{NH}	815	828	806	36,3	841	820	130
AU	ρ_{CO}	769ms	801	781	43,1	817	796	105
AU	ρ_{CO}	720	728	710	0,01	738	720	2,72
BG	ρ_{NH}	815	823	802	0,33	838	816	0,88
BG	ρ_{CO}	769ms	774	755	0,01	792	772	0,88
BG	ρ_{CO}	720	723	705	0,00	736	717	1,30
BU	q_{NH}	3188m	3337	3181	2323	3351	3194	2642
BU	q_{CO}	1744s	1813	1751	340	1836	1774	499
BU	q_{CO}	1723vs	1796	1735	1108	1818	1756	1226
BU	β_{CNH}	1462s	1448	1403	130	1462	1416	152,8
BU	β_{CO}	337	346	338	29,6	348	340	32,5
BU	β_{CO}	272	271	265	14,8	275	269	15,7

1. Для соединений, содержащих подобные сопряженные циклы, выбор базиса для предсказательных расчетов геометрической структуры и колебательных состояний решающего значения не имеет. Тем не менее рекомендуется базис 6–311+ G(d, p); ++ G(d, p).

2. Интерпретация колебательных спектров требует проведения расчета параметров адиабатического потенциала в ангармоническом приближении теории колебаний. В основном это касается диапазона выше 900 см^{-1} .

3. В конденсированном состоянии фталимида и изатина предположение о межмолекулярном взаимодействии по типу водородной связи между атомами водорода и кислорода мономеров подтверждается неэмпирическими квантовыми расчетами. Существенно ($\sim 200\text{ см}^{-1}$) уменьшается частота валентного колебания связи CN. Интенсивность полосы увеличивается на порядок по сравнению с мономером. Резко возрастают частоты неплоских колебаний связей NH в димерах. Смещения полос остальных колебаний при переходе от мономера к димерам одного порядка со смещением, вызванным учетом ангармонизма колебаний.

Библиографический список

1. Браун, П. А. Введение в теорию молекулярных спектров / П. А. Браун, А. А. Киселев. – Л. : Изд-во ЛГУ, 1983. – 232 с.
2. Залеская, Е. А. Зависимость интенсивностей обертонов NH-колебаний паров метиламина и фталимида от температуры / Е. А. Залеская // Оптика и спектр. – 1967. – Т. 22, № 3. – С. 121–124.
3. Свердлов, Л. М. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970. – 560 с.
4. Ховратович, Н. Н. Интенсивности полос поглощения NH_2 -, NH-, CO-групп производных фталимида / Н. Н. Ховратович, Н. А. Борисевич // Журнал прикладной спектроскопии. – 1968. – Т. 8, № 3. – С. 4433–4446.
5. Элькин, П. М. Квантовохимический расчет нормальных колебаний молекул пятичленных налькоген-гетероциклических соединений с учетом ангармонизма / П. М. Элькин, Е. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2009. – Т. 76, № 2. – С. 170–175.
6. Элькин, П. М. Теоретический анализ колебательных спектров таутомерных форм пурина / П. М. Элькин, О. В. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // Журнал прикладной спектроскопии. – 2008. – Т. 75, № 1. – С. 23–27.
7. A new approach to vibrational analysis of large molecules by density functional theory: Wavenumber-linear scaling method / H. Yoshida, K. Takeda, J. Okamura, A. Ehara, H. Matsuura // Journal of Physical Chemistry. A. – 2002. – Vol. 106, № 14. – P. 3580–3586.
8. Bigotto, A. Infrared and Raman spectra of phthalimide and isatin / A. Bigotto, V. Galasso // Spectrochimica Acta. – 1979. – Vol. 35A, № 8. – P. 729–732.
9. Bree, A. The vibrational spectra of phthalimide / A. Bree, M. Edelson // Spectrochimica Acta. – 1981. – Vol. 37A, № 4. – P. 225–231.
10. Gaussian 03. Revision A.7. Frisch M.J. [et al.]. – Pittsburgh: Gaussian, Inc., 2003.
11. Krishnakumar, V. Density functional theory study of the FT-IR spectra phthalimide and N-bromophthalimide / V. Krishnakumar // Spectrochimica Acta. – 2005. – Vol. 62A, № 5. – P. 918–925.
12. Naumov, V. P. Experimental and theoretical vibration spectra of isatin and its 5(NO, F, Cl, Br, I, CH_3) analogues / V. P. Naumov, F. Anastasova // Spectrochimica Acta. – 2001. – Vol. 57A, № 3. – P. 469–481.
13. Safinejad, F. Hydrogen bonding of isolidole in reaction field: Vibration spectroscopy study / F. Safinejad, M. Asghari-Khiavi // Chemical Physics. – 2009. – № 358 (1). – P. 1–6.
14. Singh, V. B. DFT study on the spectra and structure of isatin and its 5R substituted derivatives / V.B. Singh // Abstracts of OSU international symposium of Molecular spectroscopy. – Режим доступа: <http://hdl.handle.net/1811/31534/>, свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. англ.
15. Yoshuki, H. The infrared and Raman spectra phthalimide, N-d phthalimide and potassium phthalimide / H. Yoshuki // J. Molecular Structure. – 1978. – Vol. 28, № 3. – P. 33–42.