

#### References

1. Bochkova A. B. *Roznichnye torgovye seti: sostoyanie i perspektivy razvitiya* [Retail trade networks: state and development prospects]. Saratov, Scientific Book, 2008. 205 p.
2. Volkova V. N., Denisov A. A. *Osnovy teorii sistem i sistemnogo analiza* [Fundamentals of system theory and system analysis]. 2<sup>nd</sup> ed. Saint-Petersburg, Saint-Petersburg State Technical Univ. Publ. House, 2001. 512 p.
3. Naberezhnaya A. V., Shikulsкая O. M. Obzor kolichestvennykh metodov optimizatsii razmeshcheniya obektov biznesa [Review of quantitative methods of business object location optimization]. *Pri-kaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies]. Astrakhan, Astrakhan State University, Publishing House "Astrakhan University", 2012, no. 1 (17), pp. 142–146.

УДК 539.193/.194;535/33.34

#### МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СПЕКТРА ФЕНОТИАЗИНА

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

**Алыкова Ольга Михайловна**, кандидат педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

**Карташов Максим Вячеславович**, магистрант, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

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

**Степанович Екатерина Юрьевна**, старший преподаватель, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

**Равчеева Наталья Александровна**, преподаватель, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

Фенотиазин известен в медицинской практике как транквилизатор. Многие его производные являются нейролептическими препаратами. В периодической литературе данных по экспериментальным и теоретическим исследованиям его структуры и колебательных спектров недостаточно для построения структурно-динамической модели соединения.

В данной статье оценены параметры адиабатического потенциала фенотиазина в рамках квантового метода функционала плотности DFT/B3LYP, проведена интерпретация колебательных состояний соединения и выявлены признаки его спектральной идентификации.

Расчеты показали, что характерной особенностью колебательного спектра фенотиазина является низкая интенсивность значительной части полос в ИК спектре соединения, а также наличие дублетов полос ( $\Delta\nu \sim 10 \text{ см}^{-1}$ ), интерпретированных как неплоские (тип симметрии A2 и B1) деформационные колебания циклических фрагментов (p, x). Колебания типа симметрии A2 неактивны в ИК спектре, интенсивность в КР спектре низкая. Колебания типа симметрии B1 активны в обоих спектрах, однако интенсивность КР полос также низка.

Достоверность полученных результатов по геометрической структуре и параметрам адиабатического потенциала обоснована тем, что подобные расчеты для родственных по электронной структуре соединений дают хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам.

**Ключевые слова:** фенотиазин, колебательные спектры, молекулярные спектры, ИК спектры, адиабатический потенциал, силовые постоянные

## MODELING STRUCTURE AND SPECTRUM OF PHENOTHIAZINE

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

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

*Kartashov Maksim V.*, undergraduate student, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Smirnov Vladimir V.*, Ph.D. (Physical and Mathematics), Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Stepanovich Yekaterina Yu.*, Senior Lecturer, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Ravcheeva Natalya A.*, Lecturer, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

The article relates that in medical practice, phenothiazine is used as a tranquilizer, while many of its derivatives are antipsychotic preparations. It adds that in the periodic literary data accruing from experimental and theoretical research on the medication's structure and shake spectrum are inadequate to serve as a basis for constructing a structural-dynamics model of its application.

Nevertheless, within the framework of the DFT/B3LYP quantum method of functional closeness, the paper seeks to appraise the adiabatic potential parameters of phenothiazine, interpreting its shake states of application and also deducing the signs of its spectral authentication.

According to the critique, calculations have demonstrated that the characteristic feature of a shake spectrum of phenothiazine is a subzero intensity of considerable parts of stripes in an IR spectrum, as well as the presence of duplicate stripes ( $\Delta\nu \sim 10 \text{ cm}^{-1}$ ). The latter are interpreted as non-planar (A2 and B1 types of symmetry) deformation vibrations of cyclic fragments (p, x). The vibrations of the A2 type of symmetry are inactive in the IR spectrum, and have a subzero intensity in the IR spectrum. By contrast, the vibrations of the B1 type of symmetry are active in both spectra, wherein the Raman spectra intensity of stripes is also subzero.

In conclusion, the research paper suggests that the obtained results can be authenticated within geometrical structure and adiabatic potential parameters, and that similar calculations probably could be attained by making electronic structure connections that would confirm the present experimental data on shake spectrums.

**Keywords:** phenothiazine, vibrational spectra, molecular spectra, IR spectra, adiabatic potential, force constants

**Введение.** Фенотиазин (тиодифениламин, дибензотиазин, парадибензотиазин) – известный в медицинской практике транквилизатор. Исторически относится к первому классу антипсихотических средств. Многие его производные являются нейролептическими препаратами. Общепринятая молекулярная диаграмма соединения представлена на рис. 1.

В отличие от известных полициклических молекул, имеющих сходные молекулярные диаграммы (антрацен, дибензо-п-диоксин, акридин, акридон, фенизин), представленных в периодической литературе данных по экспериментальным и теоретическим исследованиям

структуры и колебательных спектров соединения недостаточно для построения структурно-динамической модели соединения. Возможный выход из положения – использование предсказательных возможностей неэмпирических квантовых методов молекулярного моделирования. Достоверность получаемых данных по геометрической структуре и параметрам адиабатического потенциала (силового поля молекулы) может быть обоснована тем, что в подобных расчетах для перечисленных выше родственных по электронной структуре соединений имело место хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам [1, 4, 5, 8].

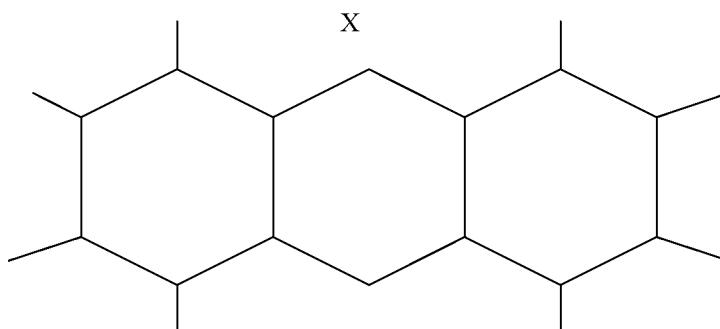


Рис. 1. Молекулярные диаграммы фенотиазина ( $X = S$ ,  $Y = NH$ ), антрацена ( $X, Y = CH$ ), дибензо-*p*-диоксина ( $X, Y = O$ ), акридоны ( $X = C = O$ ,  $Y = NH$ ), феназина ( $X, Y = N$ )

### Результаты моделирования и их интерпретация

Для оценки колебательных состояний использована известная математическая модель учета ангармонизма колебаний [11]

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

Для расчета ангармонических констант ( $\chi_{sr}$ ) взяты выражения из работы [7]:

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

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

Значения кубических ( $F_{qqq}$ ) и квартичных ( $F_{qqqq}$ ) силовых постоянных связей *CH* и *NH* заимствованы из публикаций [6]. Отметим, что полученная оценка ангармонического смещения полос хорошо согласуется с результатами процедуры масштабирования частот фундаментальных колебаний [3].

Данные по модельным расчетам спектра фундаментальных колебательных состояний фенотиазина представлены в табл. 1, 2. Для сравнения там же приведена интерпретация экспериментальных данных по колебательным спектрам антрацена, дибензо-*p*-диоксина, акридоны, акридина и фенизина. Сопоставление результатов позволяет сделать вывод, что значения силовых констант сопряженных шестичленных циклов в различных соединениях близки. Этот факт можно использовать в качестве нулевого приближения для решения прямых и обратных задач колебательной спектроскопии, контроля за достоверностью результатов в модельных оценках параметров адиабатического потенциала родственных полициклических молекул.

Таблица 1

**Интерпретация неплоских колебаний фенотиазина**

| Форма колеб.    | V <sub>эксп</sub><br>[9] | V <sub>эксп</sub><br>[10] | V <sub>эксп</sub><br>[4] | V <sub>эксп</sub><br>[11] | V <sub>анг</sub> |     | 6-311G* |     | 6-311G** |     | 6-311+G** |     |
|-----------------|--------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------|------------------|-----|---------|-----|----------|-----|-----------|-----|
|                 |                          |                           |                          |                           | A2               | B1  | ИК      | КР  | ИК       | КР  | ИК        | КР  |
| ρ               | 979                      | 943                       | 973                      | 930                       | 939              | 939 | 0,1     | 0,3 | 0,1      | 0,3 | 0         | 0,5 |
| ρ               | 904                      | 898                       | 948                      | —                         | 901              | 900 | 4,5     | 0,3 | 4,0      | 0,1 | 4,0       | 0,8 |
| ρ               | 848                      | —                         | 804                      | 815                       | 825              | 823 | 3,3     | 2,7 | 1,9      | 2,3 | 2,3       | 0,6 |
| ρ,χ             | 727                      | 725                       | 754                      | —                         | 734              | 729 | 145     | 0,2 | 139      | 0,1 | 150       | 5,2 |
| χ               | —                        | —                         | 677                      | 680                       | 686              | 692 | 14      | 1,1 | 8,1      | 1,2 | 9,9       | 0,3 |
| χ               | 577                      | 533                       | 575                      | —                         | 527              | 523 | 2,1     | 0,6 | 2,0      | 0,6 | 2,6       | 0,2 |
| χ               | —                        | 430                       | 403                      | —                         | 425              | 430 | 10      | 0,3 | 11       | 0,3 | 9,7       | 0,2 |
| ρ <sub>NH</sub> | —                        | —                         | —                        | —                         | —                | 373 | 74      | 0,8 | 63       | 0,9 | 60        | 0,8 |
| χ               | 217                      | 242                       | 287                      | —                         | 242              | 239 | 2,0     | 6,9 | 1,8      | 6,6 | 1,2       | 6,1 |
| χ               | 126                      | —                         | 139                      | —                         | —                | 150 | 1,3     | 1,5 | 1,1      | 1,5 | 1,4       | 1,2 |
| χ               | 108                      | —                         | 108                      | —                         | 107              | —   | 0       | 0,1 | 0        | 0,1 | 0         | 0,1 |

*Примечание.* Частоты колебаний в см<sup>-1</sup>, интенсивности в ИК спектрах в км/моль, в КР спектрах в Å<sup>4</sup>/а.е.м.

Таблица 2

**Интерпретация плоских колебаний фенотиазина**

| Форма колебаний                   | V <sub>эксп</sub><br>[9] | V <sub>эксп</sub><br>[10] | V <sub>эксп</sub><br>[4] | V <sub>эксп</sub><br>[11] | v <sub>Г</sub> | V <sub>анг</sub> | 6-311G* |     | 6-311G** |     | 6-311+G** |     |
|-----------------------------------|--------------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------|----------------|------------------|---------|-----|----------|-----|-----------|-----|
|                                   |                          |                           |                          |                           |                |                  | ИК      | КР  | ИК       | КР  | ИК        | КР  |
| Тип симметрии A1                  |                          |                           |                          |                           |                |                  |         |     |          |     |           |     |
| q <sub>NH</sub>                   | —                        | —                         | —                        |                           | 3635           | 3510             | 17      | 107 | 25       | 114 | 27        | 126 |
| β, Q, γ                           | 1634                     | 1602                      | 1635                     | 1605                      | 1646           | 1604             | 17      | 137 | 18       | 139 | 23        | 173 |
| β, Q, γ                           | 1596                     | 1586                      | 1598                     | 1590                      | 1628           | 1586             | 0,0     | 6,4 | 0,1      | 5,8 | 0,3       | 10  |
| β, Q                              | 1480                     | 1470                      | 1490                     | 1475                      | 1531           | 1492             | 0,6     | 14  | 0,6      | 15  | 0,9       | 12  |
| β                                 | 1447                     | 1452                      | 1457                     | 1445                      | 1478           | 1440             | 19      | 3,5 | 19       | 3,3 | 18        | 4,4 |
| Q, β                              | 1304                     | 1310                      | 1344                     | 1290                      | 1337           | 1304             | 6,8     | 87  | 6,7      | 84  | 5,8       | 93  |
| β, γ                              | 1261                     | 1254                      | 1286                     | 1260                      | 1314           | 1282             | 7,8     | 1,4 | 7,2      | 0,8 | 6,8       | 1,5 |
| Q <sub>CN</sub> , β               | 1181                     | 1208                      | 1264                     | 1220                      | 1265           | 1235             | 3,2     | 165 | 3,0      | 170 | 3,7       | 203 |
| β                                 | 1165                     | 1192                      | 1182                     | 1160                      | 1186           | 1158             | 2,6     | 13  | 2,5      | 13  | 2,4       | 12  |
| Q, β                              | 1130                     | 1152                      | 1158                     | 1140                      | 1156           | 1129             | 5,2     | 18  | 5,3      | 19  | 6,4       | 21  |
| Q <sub>S</sub> , β                | 1107                     | 1094                      | 1108                     | 1060                      | 1094           | 1068             | 6,7     | 25  | 6,9      | 27  | 6,9       | 30  |
| Q, β                              | 1007                     | 1023                      | 1032                     | 980                       | 1061           | 1036             | 2,0     | 154 | 1,9      | 153 | 1,6       | 192 |
| γ <sub>N</sub> , γ                | 848                      | 827                       | 858                      | 815                       | 850            | 831              | 1,5     | 4,6 | 1,6      | 4,6 | 1,6       | 4,2 |
| γ                                 | —                        | 726                       | 707                      | 680                       | 690            | 676              | 4,3     | 6,4 | 4,3      | 6,3 | 3,9       | 7,3 |
| γ <sub>N</sub> , γ                | —                        | —                         | 653                      | 620                       | 664            | 650              | 1,6     | 7,8 | 1,6      | 8,0 | 1,4       | 9,1 |
| γ <sub>S</sub>                    | —                        | 450                       | —                        | —                         | 467            | 457              | 0,0     | 3,1 | 0,0      | 3,1 | 0,0       | 3,9 |
| β <sub>CCC</sub>                  | —                        | —                         | 383                      | —                         | 347            | 340              | 0,0     | 27  | 0,0      | 27  | 0,0       | 28  |
| β <sub>CCC</sub>                  | 234                      | 245                       | 234                      | —                         | 224            | 219              | 0,4     | 0,5 | 0,4      | 0,5 | 0,4       | 0,7 |
| Тип симметрии B2                  |                          |                           |                          |                           |                |                  |         |     |          |     |           |     |
| β, Q, γ                           | —                        | 1622                      | 1614                     | 1570                      | 1632           | 1589             | 8,8     | 6,5 | 4,4      | 5,8 | 3,3       | 9,4 |
| β, Q, γ                           | 1561                     | 1584                      | 1570                     | 1525                      | 1614           | 1572             | 41      | 105 | 43       | 108 | 46        | 128 |
| β, Q                              | 1536                     | 1466                      | 1530                     | 1500                      | 1550           | 1511             | 49      | 0,1 | 63       | 0,3 | 65        | 0,1 |
| β, Q                              | 1462                     | 1457                      | 1472                     | 1460                      | 1513           | 1475             | 570     | 2,6 | 564      | 2,4 | 566       | 2,2 |
| β, β <sub>NH</sub>                | 1414                     | —                         | 1433                     | 1380                      | 1444           | 1408             | 11      | 1,4 | 14       | 1,7 | 15        | 1,3 |
| Q <sub>CN</sub> , β <sub>NH</sub> | 1316                     | 1305                      | 1320                     | 1310                      | 1342           | 1309             | 181     | 0,2 | 169      | 0,3 | 179       | 0,2 |
| Q, β                              | 1269                     | 1293                      | —                        | 1245                      | 1289           | 1258             | 9,4     | 4,3 | 10       | 4,5 | 14        | 4,6 |
| β <sub>NH</sub>                   | —                        | 1196                      | 1205                     | 1185                      | 1257           | 1227             | 1,3     | 0,5 | 1,2      | 0,3 | 2,1       | 0,7 |
| β                                 | 1165                     | 1151                      | 1163                     | 1160                      | 1184           | 1155             | 0,3     | 2,9 | 0,3      | 2,9 | 0,5       | 2,9 |
| Q, β                              | 1126                     | 1120                      | 1102                     | —                         | 1143           | 1116             | 25      | 2,7 | 26       | 2,9 | 28        | 2,3 |
| Q, β                              | —                        | 1094                      | 1020                     | —                         | 1080           | 1055             | 1,5     | 1,2 | 1,9      | 1,3 | 1,8       | 2,3 |

|                       |     |      |     |     |      |      |     |     |     |     |     |     |
|-----------------------|-----|------|-----|-----|------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $Q_{CS}, \gamma$      | 999 | 1023 | 937 | —   | 1058 | 1034 | 40  | 0,7 | 39  | 0,7 | 44  | 1,2 |
| $\gamma$              | 906 | 854  | 885 | —   | 901  | 880  | 4,6 | 10  | 4,4 | 11  | 3,9 | 12  |
| $\gamma$              | 650 | 676  | 626 | 680 | 691  | 676  | 6,2 | 7,5 | 6,1 | 7,6 | 6,2 | 8,7 |
| $\gamma, \beta_{CCC}$ | 601 | 598  | 587 | 615 | 615  | 602  | 3,0 | 0,9 | 3,0 | 0,9 | 2,8 | 1,1 |
| $\gamma$              | —   | —    | 437 | —   | 441  | 432  | 0,0 | 4,0 | 0,0 | 4,0 | 0,0 | 4,0 |
| $\beta_{CCC}$         | 396 | —    | 333 | —   | 382  | 374  | 1,8 | 1,3 | 1,8 | 1,3 | 1,9 | 1,3 |

Характерной особенностью колебательного спектра фенотиазина (молекула принадлежит группе симметрии  $C_{2v}$ ) следует считать низкую интенсивность значительной части полос в ИК спектре соединения. Особенно это касается симметричных колебаний (тип симметрии  $A_1$ ). Исключение составляют полосы  $\sim 1470, 1300, 1030 \text{ см}^{-1}$  (тип симметрии  $B_2$ ) и  $730 \text{ см}^{-1}$  (тип симметрии  $B_1$ ). Те же закономерности в поведении интенсивностей полос наблюдаются и в антрацене, дибензо-*p*-диоксине, феназине. Указанные соединения принадлежат группе симметрии  $D_{2h}$ , для которой имеет место правило альтернативного запрета для интенсивностей полос в ИК и КР спектрах молекул. Этот факт можно считать дополнительным аргументом достоверности представленных результатов модельных расчетов спектров фенотиазина.

Другой особенностью, подтверждающей достоверность квантовых оценок параметров адиабатического потенциала, является наличие дублетов полос ( $\Delta\nu \sim 10 \text{ см}^{-1}$ ), интерпретированных как неплоские (тип симметрии  $A_2$  и  $B_1$ ) деформационные колебания циклических фрагментов ( $\rho, \chi$ ). Колебания типа симметрии  $A_2$  неактивны в ИК спектре, интенсивность в КР спектре низкая. Колебания типа симметрии  $B_1$  активны в обоих спектрах, однако интенсивность КР полос также низка. Эти закономерности характерны и для остальных упомянутых выше соединений.

Подчеркнем и тот факт, что учет поляризационных (\*\*) и диффузионных (+) параметров базиса расчета не имеет принципиального значения в задаче интерпретации колебательного спектра фенотиазина.

Оптимизация геометрии фенотиазина осуществлялась в предположении плоской структуры соединения. Для длин валентных связей (в Å) получены следующие расчетные значения:  $R_{CS} = 1,79$ ,  $R_{CN} = 1,39$ ,  $R_{CC} = 1,39\text{--}1,4$ ;  $R_{NH} = 1,01$ ,  $R_{CH} = 1,08\text{--}1,09$ . Для валентных углов, связанных с атомами азота и серы, имеем:  $A_{CSC} = 102,6$ ;  $R_{CNC} = 127,7$ ;  $A_{SCC} = 117,4$ . Отклонения значений остальных валентных углов отличаются от  $120^\circ$  на величину, не превышающую  $3^\circ$ . Указанные закономерности в расчетных данных по оптимизации геометрии имеют место и в упомянутых в тесте полициклических соединениях.

**Выводы.** Сопоставление результатов модельных расчетов структуры и колебательных состояний фенотиазина с имеющимися экспериментальными данными и теоретической интерпретацией колебательных спектров родственных по электронной структуре полициклических молекул дает основание утверждать, что методы функционала плотности позволяют осуществлять построение достоверных предсказательных структурно-динамических моделей исследуемого класса соединений и их замещенных аналогов.

#### Список литературы

1. Березин К. В. Теоретический анализ ИК спектров и спектров комбинационного рассеяния акридонa с учетом межмолекулярной водородной связи / К. В. Березин, Т. В. Кривохижина, В. В. Нечаев // Оптика и спектроскопия. – 2006. – Т. 100, № 1. – С. 20–27.
2. Гастилович Е. А. Оптические спектры и фотофизические свойства полихлорированных производных дибензо-*p*-диоксина / Е. А. Гастилович, В. Г. Клименко, Н. В. Королькова, Р. Н. Нурмухаметов // Успехи химии. – 2000. – № 69 (11). – С. 1128–1148.
3. 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.

4. Сverdlov L. M. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – Москва : Наука, 1970. – 559 с.
5. Элькин Л. М. Колебательные спектры и фотофизические свойства полихлорированных дибензоциклов (дибензо-п-диоксина, антрацена, акридона, антахинона) / Л. М. Элькин, А. Б. Осин, Е. А. Джалмухамбетова // Проблемы оптической физики : материалы 10-й Международной молодежной научной школы по оптике, лазерной физике и биофизике. – Саратов, 2007. – С. 214–220.
6. Элькин М. Д. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью / М. Д. Элькин, Л. М. Бабков // Известия Саратовского государственного университета. – 2011, – Т. 11, вып. 1. – С. 20–25. – (Сер. Физика).
7. Элькин М. Д. Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия Саратовского государственного университета. – 2008, – Т. 8, вып. 2. – С. 24–30. – (Сер. Физика).
8. Элькин П. М. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний полихлорированных дибензо-п-диоксинов / П. М. Элькин, М. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 1. – С. 21–24.
9. Bandyopadhyay I. Force fields and assignments of the vibrational spectra of acridine and phenazine. Ab initio study / I. Bandyopadhyay // J. Mol. Structure. – 2000. – Vol. 507. – P. 217–227.
10. Fu A. Density functional theory study of vibrational spectra of acridine and phenazine / A. Fu, D. Du, Z. Zhou // Spectrochim. Acta. – 2003. – Vol. 59, № 2. – P. 245–253.
11. Hoy A. R. Anharmonic force constants calculation / A. R. Hoy, I. M. Mills, G. Strey. // J. Mol. Phys. – 1972. – Vol. 21, № 6. – P. 1265–1290.
12. Kure B. Raman spectra of phenothiazine and pharmaceutical derivatives / B. Kure, M. D. Morris // Talanta. – 1976. – Vol. 23. – P. 398–400.
13. Rasanen J. Raman scattering from molecular crystals-II. Anthracene / J. Rasanen, F. Stenman, E. Penttinen // Spectrochim. Acta. – 1973. – Vol. 29A, № 3. – P. 595–403.

#### References

1. Berezin K. V., Krivokhizhina T. V., Nechaev V. V. Teoreticheskiy analiz IK spektrov i spektrov kombinatsionnogo rasseyaniya akridona s uchetom mezhmolekulyarnoy vodorodnoy svyazi [Theoretical analysis of IR spectra and acridone Raman scattering spectra taking into account intermolecular hydrogen bond]. *Optika i spektr* [Optics and spectroscopy], 2006, vol. 100, no. 1, pp. 20–27.
2. Gasilovich Ye. A., Klimenko V. G., Korolkova N. V., Nurmukhametov R. N. Opticheskie spektry i fotofizicheskie svoystva polikhlorirovannykh proizvodnykh dibenzo-n-dioksina [Optical spectra and photophysical properties of polychlorinated derivatives of dibenzo-n-dioxine]. *Uspekhi khimii* [Russian Chemical Reviews], 2000, no. 69 (11), pp. 1128–1148.
3. Krasnoshchekov S. V., Stepanov N. F. Masshtabiruyushchie mnozhiteli kak effektivnye parametry dlya korrektsii neempiricheskogo silovogo polya [Scaling multipliers as effective parameters for correction of ab initio force field]. *Zhurnal fizicheskoy khimii* [Russian Journal of Physical Chemistry], 2007, vol. 81, no. 4, pp. 680–689.
4. Sverdlov L. M., Kovner M. A., Kraynov Ye. P. *Kolebatelnye spektry mnogoatomnykh molekul* [Vibrational spectra of polyatomic molecules]. Moscow, Science, 1970. 559 p.
5. Elkin L. M., Osin A. B., Dzhalukhambetova Ye. A. Kolebatelnye spektry i foto-fizicheskie svoystva polikhlorirovannykh dibenzociklov (dibenzo-n-dioksina, antratsena, akridona, antakhinona) [Vibrational spectra and photophysical properties of polychlorinated dibenzocycles (dibenzo-n-dioxine, anthracene, acridone, anthachinone)]. *Problemy opticheskoy fiziki: materialy 10-y Mezhdunarodnoy molodezhnoy nauchnoy shkoly po optike, lazernoy fizike i biofizike* [Problems of optical physics: Proceedings of the Tenth International Youth Scientific School on Optics, Laser Physics and Biophysics]. Saratov, 2007, pp. 214–220.
6. Elkin M. D., Dzhalukhambetova Ye. A., Grechukhina O. N. Proyavlenie mezhmolekulyarnogo vzaimodeystviya v dimerakh uratsila [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.
7. Elkin M. D., Babkov L. M. Uchet angarnonicheskogo smeshcheniya polos v modelnykh raschetakh kolebatelnykh spektrov dimerov s vodorodnoy svyazyu [The accounting of anharmonic shift of bands in model calculations of vibrational spectra of dimers with hydrogen bond]. *Izvestiya Saratovskogo gosudar-*

*stvennogo universiteta. Seriya Fizika [News of Saratov State University. Series Physics], 2011, vol. 11, issue 1, pp. 20–25.*

8. Elkin P. M., Erman M. A., Pulin V. F. Strukturno-dinamicheskie modeli i angarmonicheskiy analiz kolebatelnykh sostoyaniy polikhlorirovannykh dibenzo-n-dioksinov [Structural and dynamic models and anharmonic analysis of vibrational states of polychlorinated dibenzo-n-dioxine]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2007, vol. 74, no. 1, pp. 21–24.

9. Bandyopadhyay I. Force fields and assignments of the vibrational spectra of acridine and phenazine. Ab initio study. *J. Mol. Structure*, 2000, vol. 507, pp. 217–227.

10. Fu A., Du D., Zhou Z. Density functional theory study of vibrational spectra of acridine and phenazine. *Spectrochim. Acta*, 2003, vol. 59, no. 2, pp. 245–253.

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

12. Kure B., Morris M. D. Raman spectra of phenothiazine and pharmaceutical derivatived. *Talanta*, 1976, vol. 23, pp. 398–400.

13. Rasanen J., Stenman F., Penttinen E. Raman scattering from molecular crystals-II. Anthracene. *Spectrochim. Acta*, 1973, vol. 29A, no. 3, pp. 595–403.

УДК 539.193/.194.535/.33/34

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ S-ГЕКСОГЕНА**

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

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

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

*Алыкова Ольга Михайловна*, кандидат педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Амантаева Луиза Садыговна*, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

На основании неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала в данной работе предложена интерпретация колебательных состояний гексогена, или циклотриметилентринитроамин (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub>O<sub>6</sub>). Проведен анализ конформационной структуры исследуемого соединения, выявлены признаки его спектральной идентификации. Обоснован выбор метода и базиса расчета частот фундаментальных колебаний и интенсивностей полос в спектрах ИК и КР. Описана методика оценки ангармонизма колебаний с использованием кубических и квартичных силовых постоянных. В статье представлены результаты численного эксперимента, определены геометрические параметры молекул, такие как длины валентных связей и величины углов между ними. Получены частоты колебательных состояний и величины их интегральных интенсивностей. Для исследованного соединения предложена теоретическая интерпретация спектра, приводится сравнение с экспериментальными данными по ИК и КР спектрам. Расчет проводился квантовым методом функционала плотности DFT/B3LYP для четырех базисных наборов 6-311G\*, 6-311G\*\*, 6-311+G\*\*, 6-311++G\*. Показано, что данный метод может быть использован для моделирования геометрических параметров молекул и