

11. Torrez Perla. Vibrational spectroscopy study of α and β RDX deposits / Perla Torrez, L. Mercado, I. Cotle et al. // *J. Phys. Chem.* – 2004. – Vol. 108 (26). – P. 8799–8805.
12. Zheng X. High-pressure vibrational spectroscopy of hexahidro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX) / X. Zheng, J. Zheo, D. Tan et al. // *Properlants, Explosives, Pyrotechnics*. – 2011. – Vol. 36, № 1. – P. 22–27.

References

1. 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* [Journal of Physical Chemistry], 2007, vol. 81, no. 4, pp. 680–689.
2. Sverdlov L. M., Kovner M. A., Kraynov Ye. P. *Kolebatelnye spektry mnogoatomnykh molekul* [Vibrational spectra of polyatomic molecules]. Moscow, Nauka, 1970. 559 p.
3. Elkin M. D., Pulin V. F., Osin A. B. Matematicheskie modeli v molekulyarnom modelirovanii [Mathematical models in molecular modeling]. *Vestnik Saratovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Bulletin of Saratov State Technical University], 2010, no. 4 (49), pp. 36–39.
4. Elkin M. D., Smirnov V. V., Dzhalukhambetova Ye. A., Alykova O. M., Amantaeva L. S. Modelirovanie kolebatelnykh sostoyaniy s-trinitrotriazina [Modeling of vibrational states of s-trinitrotriazine]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2012, no. 3 (19), pp. 120–127.
5. Elkin M. D., Smirnov V. V., Dzhalukhambetova Ye. A., Alykova O. M., Amantaeva L. S. Modelnye raschety kolebatelnykh sostoyaniy izomerov trinitrotoluola [Model calculations of vibrational states of trinitrotoluene isomers]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2012, no. 1 (17), pp. 118–125.
6. Guadarrama-Perez Carlos, Martinez J. M., Balbuena P. B. Theoretical infrared and terahertz spectra of RDX/aluminum complex. *J. Phys. Chem.*, 2010, vol. 114 (6), pp. 2284–2292.
7. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. *Gaussian, Inc.* Pittsburgh PA, 2003.
8. Infant-Castillo Ricardo, Pacheco-Londono Leonardo C., Hernandez-Rivera Samuel P. Monitoring the α , β solid-solid phase transition of RDX with Raman spectroscopy: A theoretical and experimental study. *J. Mol. Structure*. 2010, vol. 970, pp. 51–58.
9. Infant-Castillo Ricardo, Pacheco-Londono Leonardo C. Vibrational spectra and structure of RDX and its ^{13}C and ^{15}N -labeled derivatives: a theoretical and experimental study. *Spectrochim. Acta*, 2010 A, vol. 76, no. 2, pp. 137–141.
10. Rice Betsy M., Chabalowski Cary F. Ab initio and Nonlocal density functional study of 1,3,5-trinitro-s-triazine(RDX). *J. Phys. Chem. A*, 1997, vol. 101, pp. 8720–8726.
11. Torrez Perla, Mercado L., Cotle I. et al. Vibrational spectroscopy study of α and β RDX deposits. *J. Phys. Chem.*, 2004, vol. 108 (26), pp. 8799–8805.
12. Zheng X., Zheo J., Tan D. et al. High-pressure vibrational spectroscopy of hexahidro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX). *Properlants, Explosives, Pyrotechnics*, 2011, vol. 36, no. 1, pp. 22–27.

УДК 539.193/.194;535/33.34

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДИАБАТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ТАУТОМЕРОВ И КОНФОРМЕРОВ МЕРКАПТОПУРИНА

Эрман Евгений Анатольевич, кандидат технических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru

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

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

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

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

Попов Андрей Александрович, магистрант, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru

Меркаптопурин – известный в медицинской практике цитостатический препарат из группы антиметаболитов. Его таутомерные производные являются основой целого класса противоопухолевых лекарственных препаратов. Таутомеры и конформеры меркаптопурина можно рассматривать как 4SH-замещенные пурина. Этот факт используется в качестве критерия для обоснования достоверности полученных оценок параметров адиабатического потенциала в исследуемых соединениях. Дополнительным обоснованием указанной достоверности является хорошее совпадение результатов теоретической и экспериментальной интерпретации колебательных спектров как для отдельных, так и сопряженных родственных по электронной структуре фрагментов.

В работе в рамках метода DFT/b3LYP/6-311G осуществлено теоретическое моделирование структуры и колебательного спектра таутомеров N7 и N9 меркаптопурина и 4S-N1-пурина, а также дана интерпретация имеющихся экспериментальных данных. Показано, что для спектральной идентификации таутомеров 4S-пурина можно использовать как смещение положения полос в колебательном спектре соединений, так и их интенсивность. В основном это касается плоских колебаний в диапазоне выше 700 см^{-1} , а также неплоских деформационных колебаний связей NH, располагающихся в диапазоне ниже 600 см^{-1} . Находясь в конденсированном состоянии, исследуемые соединения образуют димеры. При этом наблюдается общая закономерность изменения фундаментальных частот колебаний при переходе от мономеров к димеру с водородной связью. Наиболее интенсивна частота неплоского колебания связи NH, примыкающей к водородной связи в ИК спектрах. Это возможно использовать для спектральной идентификации димеров меркаптопурина.

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

MODELING THE ADIABATIC POTENTIAL OF MERCAPTOPURINE TAUTOMERS AND CONFORMERS

Erman Yevgeniy A., Ph.D. (Engineering), Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kof@aspu.ru

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

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

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

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

Popov Andrey A., undergraduate student, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kof@aspu.ru

The article relates that mercaptopurine is a cytostatic preparation belonging in medical practice to a group of anti-metabolites. Its tautomer derivatives are a basis of the whole class of antineoplastic medicines. According to the paper, mercaptopurine tautomers and its conformers can be considered as purine 4SH-substitutes. This fact is used as a criterion for justifying the reliability of the received estimates of its adiabatic parameter potential in studied connections. Additional justification of its specified reliability provides probable coincidence of the results of theoretical and experimental interpretation of its oscillatory ranges, as well as for its interface-related fragments in electronic structures.

The research work implements the DFT/b3LYP/6-311G method of theoretical modeling of structure and vibrational spectra for tautomers of N7 and N9 mercaptopurine and for 4S-H1-purine, while also giving an interpretation of the available experimental data. The commentary says that spectral identification of the 4S-purine tautomers enables them to be used to alter the provision of strips in the vibrational spectra of compounds and in their intensity. Generally, flat fluctuations would occur in a range above 700 cm^{-1} (note that the 600 cm^{-1} example is lower than the non-planar deformation fluctuations of NH bonds, which normally settle down in range). The studied connections, being in a condensed state, are formed by dimers. The general regularity of change of fundamental frequencies of fluctuations is thus observed upon transition from a monomer to a dimer with a hydrogen bond. The frequency of non-planar fluctuation of communication of NH adjoining the hydrogen bond in the IR spectra is very intense, and could possibly be used for spectral identification of the mercaptopurine dimers.

Keywords: mercaptopurine, vibrational spectra, molecular spectra, IR spectra, adiabatic potential, force constants

Введение. Меркаптопурин – известный в медицинской практике цитостатический препарат из группы антиметаболитов, антагонистов пурина, различные таутомерные производные которого являются основой целого класса противоопухолевых лекарственных препаратов, играющих определяющую роль в мутагенных процессах белковых образований.

Структурно-динамические модели таутомеров пурина предложены, к примеру, в работе [9], где на основании квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала соединения в рамках метода функционала плотности [13] предложена интерпретация имеющегося в периодической литературе эксперимента по его колебательным спектрам. Таутомеры и конформеры меркаптопурина (рис.) можно рассматривать как 4SH-замещенные пурина, предполагая, что влияние монозамещения на силовое поле шестичленного цикла носит локальный характер [1] и существенно сказывается на частоте колебаний валентной связи и валентных углов заместителя. Этот факт можно использовать в качестве критерия для обоснования достоверности полученных оценок параметров адиабатического потенциала в исследуемых соединениях. Дополнительным обоснованием указанной достоверности является хорошее совпадение результатов теоретической и экспериментальной интерпретации колебательных спектров как для отдельных, так и сопряженных родственных по электронной структуре фрагментов [3–8, 11].

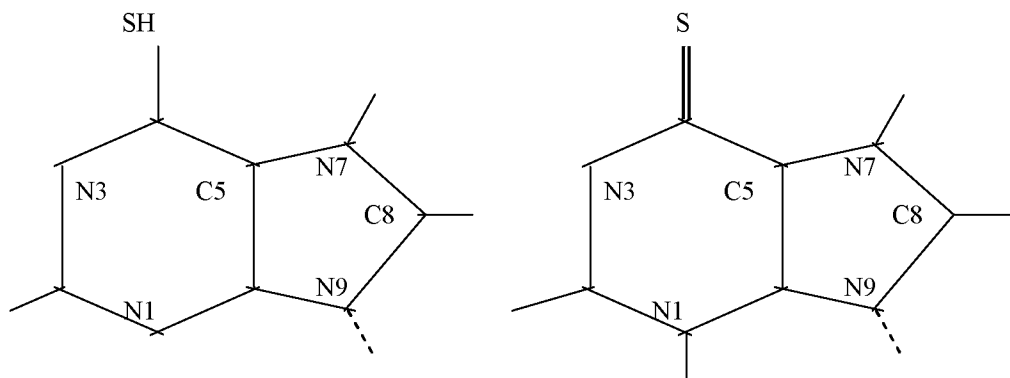


Рис. Молекулярные диаграммы конформеров меркаптопурина и 4S-пурина

Цель данной работы – теоретическое моделирование структуры и колебательного спектра таутомеров N7 и N9 меркаптопурина и 4S-N1-пурина, интерпретация имеющихся экспериментальных данных [12, 14, 16].

Результаты модельных расчетов. Оптимизация предполагаемой плоской исходной геометрии молекул (тип симметрии Cs) осуществлена в рамках метода DFT/b3LYP/6-311G** [13]. Результаты представлены в табл. 1. Расхождение в значениях валентных связей (Å) и валентных углов (°) иллюстрирует наличие заголовков (K1, K2 конформеры с двугранными углами $D(3,4,11,S) = 0$ и 180° соответственно. Символы T1 и T2 относятся к N7 и N9 таутомерам). По сравнению с пурином, изменение соответствующих длин валентных связей не превышает величины $\sim 0,01$ Å, для валентных углов – $0,1^\circ$. Значение валентного угла $A(4,S,H)$ оценивается интервалом $93,2\text{--}94,7^\circ$ для конформеров K1 таутомера N7 и конформеров таутомера N9. Для конформера K2 таутомера N7 расчет дает значение $97,3^\circ$. Оценки длин валентных связей CS, C=S и SH хорошо согласуются с данными из работы [2].

Теоретическая оценка положения полос в колебательном спектре соединения осуществлялась с помощью известного соотношения [15]

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

Таблица 1

Оптимизированные геометрические параметры меркапто- и 4S-пурина

Пар-ры	(C-S)	(C=S)	Пар-ры	(C-S)	(C=S)	Пар-ры	(C-S)	T1 _(C=S)	T2 _(C=S)
R _(1,2)	1,33	1,37	R _(5,7)	1,38	1,38	A _(2,3,4)	118,5	121,3	122,4
R _(1,6)	1,34	1,37	R _(6,9)	1,37	1,36	A _(3,4,5)	119,1	113,7	114,3
R _(2,3)	1,35	1,29	R _(11,14)	1,35	–	A _(5,7,8)	105,2	107,1	105,8
R _(3,4)	1,33	1,40	A _(2,1,6)	112,8	116,1	A _(7,8,9)	113,7	112,9	112,6
R _(4,5)	1,39	1,44	A _(1,2,3)	128,1	124,8	A _(5,7,12)	127,7	124,1	–
R _(4,11)	1,78	1,66	A _(1,2,10)	116,6	114,7	A _(6,9,8)	105,6	103,3	105,2
R _(5,6)	1,41	1,38	A _(3,2,10)	115,3	119,4	A _(8,9,12)	127,6	–	126,9
Пар-ры	K1	K2	T1 _(C=S)	T2 _(C=S)	Пар-ры	K1	K2	T1 _(C=S)	T2 _(C=S)
A _(3,4,11)	119,7	116	123,3	120,7	A _(5,4,11)	121,4	124,8	123	125
Пар-ры	T1	T2	T1 _(C=S)	T2 _(C=S)	T1	T2	C=S	T1 _(C=S)	T2 _(C=S)
R _(7,8)	1,38	1,31	1,36	1,30	A _(6,5,7)	105,1	111	103,7	109,1
R _(8,9)	1,31	1,38	1,33	1,39	A _(1,6,5)	122,8	126,6	118,4	122,4
A _(4,5,6)	118,2	115,5	123,7	120,1	A _(7,8,13)	121	125	122,5	126,3
A _(4,5,7)	136,8	133,4	132,6	130,8	A _(9,8,13)	125	121,4	124,6	121,1

Для ангармонических констант χ_{sr} использованы выражения из работы [10]:

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

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

Оценочные значения ангармонических силовых констант (F_{srt} и F_{srtv}) для связей NH заимствованы из работ [3, 9].

Результаты модельных расчетов колебательных состояний исследуемых молекулярных объектов представлены в табл. 2–4. Слабые по интенсивности полосы, как и полосы, интерпретированные как валентные колебания связей СН, исключены из рассмотрения. Отметим, что спектральная идентификация конформеров рассматриваемых таутомеров меркаптопурина по положению и интенсивностям полос затруднена. В диапазоне выше 500 см^{-1} относительное смещение полос не превосходит величины $\sim 10 \text{ см}^{-1}$, а низкочастотные колебания имеют слабую интенсивность. Для спектральной идентификации таутомеров N7 и N9 можно использовать значения интенсивностей полос в диапазоне $1600\text{--}1200 \text{ см}^{-1}$.

Таблица 2

Интерпретация колебаний конформеров таутомера меркаптопурина-N7

Форма колеб.	$V_{\text{эксп}}$ [1, 14]	$V_{\text{эксп}}$ [4]	K1			K2		
			$v_{\text{анг}}$	ИК	КР	$v_{\text{анг}}$	ИК	КР
q _{CN}	3506	3425	3470	73	91	3475	59	88,0
q _{SH}	2570	—	2574	4,3	140	2564	13	82
Q, β , γ	1609	1610	1586	91	9,4	1583	68	10
β , γ	1584	1520	1523	190	19	1524	221	18
Q, β	1488	—	1468	53	25	1472	53	26
β , Q	1451	1410	1437	19	1,8	1437	23	1,7
Q, β^*	1403	1345	1356	211	28	1353	204	22
Q, β	1333	—	1316	53	62	1313	57	64
Q, β	1289	1275	1267	68	11	1271	60	9,2
Q	1228	1220	1232	5,4	14	1232	7,3	10
β , Q	1060	—	1067	15	13	1067	18	13
β_{SH} , q _{CS}	—	930	963	45	5,8	976	32	14
γ	896	970	872	28	3,1	897	50	7,5
γ , q _{CS}	788	—	820	51	15	831	34	8,6
ρ	882	—	866	11	0,0	865	12	0,0
ρ_{NH}	438	—	441	102	1,2	410	115	2,1
χ_{SH}	242	—	251	13	3,7	138	8,3	2,5
χ	214	—	188	21	3,9	—	—	—

Таблица 3

Интерпретация колебаний конформеров таутомера меркаптопурина-N9

Форма колеб.	$\nu_{\text{эксп}}$ [1, 14]	$\nu_{\text{эксп}}$ [4]	K1			K2		
			$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
q_{NH}	3506	3425	3469	97	167	3467	96	169
q_{SH}	2570	—	2571	0,7	137	2557	0,8	79
Q, β , γ	1609	1575	1580	73	9,6	1581	93	9,8
Q, β , γ	1584	1520	1548	273	16	1545	253	17
β , γ	1488	—	1464	14	73	1464	17	65
β , Q	1451	1410	1415	70	5,2	1418	78	4,6
Q, β , γ^*	1403	1345	1365	37	31	1365	31	31
Q, β , γ	1339	—	1314	82	64	1315	80	72
Q, β	1289	1275	1265	6,8	44	1263	9,8	39
Q, β	1228	1220	1235	98	8,3	1239	102	6,3
Q, β	1180	1150	1150	5,7	14	1154	4,7	12
β , Q	1060	—	1048	21	8,0	1051	19	7,9
β_{SH} , γ	1034	1010	997	38	7,7	1003	45	11
β_{SH} , γ	—	930	913	12	2,5	927	10	4,2
β_{SH} , γ	896	870	890	24	2,6	893	21	3,9
γ	788	—	830	69	11	838	47	8,5
γ_{CC} , β_{CS}	562	—	513	39	2,1	489	12	1,2
β_{CS}	—	—	220	10	0,3	187	3,3	3,1
ρ_{CC} , χ	562	—	560	81	0,9	560	89	0,9
X_{SH}	—	—	333	15	7,6	343	21	6,1

Примечание. Частоты колебаний в см^{-1} . Интенсивности в спектрах ИК в км/моль , в КР спектрах $\text{\AA}^4/\text{а.е.м.}$ Символом * помечены дублеты (щель $< 20 \text{ см}^{-1}$).

Согласно данным, приведенным в табл. 4, для спектральной идентификации таутомеров 4S-пурина можно использовать как смещение положения полос в колебательном спектре соединений, так и их интенсивность. В основном это касается плоских колебаний в диапазоне выше 700 см^{-1} , а также неплоских деформационных колебаний связей NH, располагающихся в диапазоне ниже 600 см^{-1} .

Таблица 4

Интерпретация колебаний таутомеров 4S-пурина

4S-пурин-N7					4S-пурин-N9				
Форма	$\nu_{\text{эксп}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	Форма	$\nu_{\text{эксп}}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
q_{NH}^*	3506	3441	220	249	q_{NH}^*	3506	3455	176	452
Q, β , γ	1609	1591	457	57	Q, β , γ	1609	1608	279	51
Q, β , β_{NH}	1584	1562	91	18	Q, β , γ	1584	1541	302	14
Q, β , β_{NH}	1488	1475	11	74	Q, β_{NH} , β	1488	1516	23	47
Q, β , γ	1451	1427	28	22	Q, β	1451	1475	6	66
Q, β , β_{NH}	1403	1417	76	8,0	Q, β_{NH} , β^*	1403	1365	77	11
β , Q*	1333	1361	136	96	Q, β , γ	1333	1333	22	58
Q, β , β_{NH}	1289	1312	33	79	β , β_{NH}	1289	1316	44	38
Q, β , γ	1228	1269	69	13	β , β_{NH} , Q	1228	1246	2,1	28
β , q_{CS}	1206	1190	19	21	γ , β , q_{CS}	1206	1191	83	20
$q_{\text{C=S}}$, β_{CS}	1180	1155	113	15	β , β_{NH} , Q	1180	1121	86	45
β , Q	1101	1082	36	34	β , Q	1101	1035	54	1,7
β , Q	1060	1037	94	1,1	β	1060	1026	95	10
γ , β	1034	978	31	7,7	Q, γ , β_{CS}	1034	977	11	6,8

γ	986	938	8,1	7,5	γ	903	913	30	5,6
γ	766	861	15	2,8	γ	882	859	15	4,2
γ	643	661	2,4	19	γ	662	652	3,7	18
γ	562	567	0,5	7,8	γ	562	554	0,7	6,3
γ	—	472	14	0,9	γ_{CC}	—	473	1,3	1,2
γ	438	428	7,5	15	γ	438	429	4,8	18
ρ	793	833	9,9	0,1	ρ	793	797	16	0,9
χ, ρ	662	640	31	1,7	ρ_{CC}, χ	607	623	5,1	1,6
ρ_{NH}	607	581	62	3,0	ρ_{NH}, χ	438	439	141	2,8
ρ_{NH}	562	556	85	2,1	ρ_{NH}	—	349	57	1,1
χ	—	482	13	1,5	χ	—	501	6,1	0,9
χ	242	291	25	0,1	χ	242	277	4,0	0,0

В реальных условиях исследуемые соединения находятся в конденсированном состоянии, образуя димеры. Как и в молекуле пурина [3, 9], имеет место общая закономерность изменения фундаментальных частот колебаний при переходе от мономеров к димеру с водородной связью [2]. Идентификация соединения может определяться по частоте валентного колебания связи NH, соседствующей с водородной связью. Понижение указанной частоты на величину $\sim 200\text{см}^{-1}$ согласуется с эффектом водородной связи [1]. В то же время заметно увеличивается частота неплоского колебания связи NH, примыкающей к водородной связи. Для различных таутомеров указанное колебание смещается на величину $\sim 60\text{см}^{-1}$. Они наиболее интенсивны в ИК спектрах, что можно использовать для спектральной идентификации димеров меркаптопурина.

Заключение. Проведенные модельные расчеты параметров адиабатического потенциала таутомеров и конформеров меркаптопурина, их сравнение с подобными данными для пурина и его димеров, а также с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам, дают основание полагать, что методы функционала плотности можно использовать для достоверных предсказательных расчетов структуры и спектра различных пуриновых оснований.

Список литературы

1. Березин В. И. Учет влияния замещения на силовое поле ароматического кольца / В. И. Березин, М. Д. Элькин // Журнал прикладной спектроскопии. – 1974. – Т. 37, № 2. – С. 237–240.
2. Свердлов Л. М. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – Москва : Наука, 1970. – 559 с.
3. Элькин М. Д. Квантовый анализ колебательных спектров таутомерных форм димеров пурина / М. Д. Элькин, О. В. Пулин // Вестник Саратов. гос. техн. ун-та. – 2007. – № 4. – С. 54–62.
4. Элькин П. М. Квантово-химический расчет нормальных колебаний молекул замещенных пятичленных гетероциклических соединений с учетом ангармонизма / П. М. Элькин, Е. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2009. – Т. 76, № 2. – С. 170–175.
5. Элькин М. Д. Моделирование структуры и колебательных спектров серосодержащих соединений. Метилмеркаптан и этилмеркаптан / М. Д. Элькин, Т. А. Шальнова, Е. А. Джалмухамбетова // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2009. – № 2 (6). – С. 81–88.
6. Элькин М. Д. Системный анализ структурно-динамических моделей хлорурацилов / М. Д. Элькин, Н. А. Равчеева, А. М. Лихтер, Е. А. Джалмухамбетова, О. М. Алыкова // Естественные науки. – 2012. – № 2. – С. 213–220.
7. Элькин М. Д. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний пятичленных циклических соединений / М. Д. Элькин, М. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Вестник Саратов. гос. техн. ун-та. – 2006. – № 4, вып. 4. – С. 38–44.

8. Элькин М. Д. Структурно-динамические модели и колебательные состояния димеров хлорурацилов / М. Д. Элькин, А. М. Лихтер, Е. А. Джалмухамбетова, О. М. Алыкова, Н. А. Равчеева // *Естественные науки*. – 2012. – № 2. – С. 220–227.
9. Элькин П. М. Теоретический анализ таутомерных форм пурина / П. М. Элькин, О. В. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // *Журнал прикладной спектроскопии*. – 2008. – Т. 75, № 1. – С. 23–27.
10. Элькин М. Д. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью / М. Д. Элькин, Л. М. Бабков // *Известия Саратов. гос. ун-та. – Серия Физика*. – 2011. – Т. 11, вып. 1. – С. 20–25.
11. Элькин М. Д. DFT анализ структуры и спектров таутомерных форм аденина / М. Д. Элькин, Э. К. Костерина // *Южно-Российский вестник геологии, географии и глобальной энергии*. – 2006. – № 5 (18). – С. 52–60.
12. Acevedo-Chaves R. Vagnetic study of the novel polynuclear compound / R. Acevedo-Chaves, M.e. Costas, R. Escudero // *J. Solid state chemistry*. –1997. – V. 132. – P. 78–87.
13. Frisch M. J. Gaussian / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburg PA, 2003.
14. Gnasecaran S. Vibrational spectra and normal coordinate analysis on structure of mercaptopurine / S. Gnasecaran, U. Pomnambalan, S. Muthu, L. Mapiaphan // *Asian Journal of Physics*. – 2003. – Vol. 12, № 1. – P. 51–56.
15. 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.
16. Stepanenko T. Tautomerism and infrared spectra of 2-thiopurine: an experimental matrix isolation and theoretical ab initio and density functional theory study / T. Stepanenko, L. Lapinsky, M. Novak, J. Kwiatkowski, J. Leszczinski // *Spectrochim. Acta*. – 2001. – Vol. 57, № 2. – P. 375–383.

References

1. Berezin V. I., Elkin M. D. Uchet vliyaniya zameshcheniya na silovoe pole aromatischeskogo koltsa [Accounting of influence of substitution on force field of aromatic ring]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 1974, vol. 37, no. 2, pp. 237–240.
2. Sverdlov L. M., Kovner M. A., Kraynov Ye. P. Kolebatelnye spektry mnogoatomnykh molekul [Vibrational spectra of polyatomic molecules]. Moscow, Nauka, 1970. 559 p.
3. Elkin M. D., Pulin O. V. Kvantovyy analiz kolebatelnykh spektrov tautomermykh form dimerov purina [Quantum analysis of vibrational spectra of tautomer forms of purine dimers] *Vestnik Saratovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Bulletin of Saratov State Technical University], 2007, no. 4, pp. 54–62.
4. Elkin P. M., Erman Ye. A., Pulin O. V. Kvantovo-khimicheskiy raschet normalnykh kolebaniy molekul zameshchennykh pyatichlennykh geterotsiklicheskiykh soedineniy s uchetom angarmonizma [Quantum and chemical calculation of normal fluctuations of molecules of substituted pentagonal heterocyclic compounds with the accounting of anharmonicity]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2009, vol. 76, no. 2, pp. 170–175.
5. Elkin M. D., Shalnova T. A., Dzhalumukhambetova Ye. A. Modelirovanie struktury i kolebatelnykh spektrov serosoderzhashchikh soedineniy. Metilmerkaptan i etilmerkaptan [Modeling of structure and vibrational spectra of sulfur-containing compounds. Methylmercaptan and ethylmercaptan]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2009, no. 2 (6), pp. 81–88.
6. Elkin M. D., Ravcheeva N. A., Likhter A. M., Dzhalumukhambetova Ye. A., Alykova O. M. Sistemyy analiz strukturno-dinamicheskikh modeley khluratsilov [System analysis of structural and dynamic models of chlorouracils]. *Yestestvennye nauki* [Natural Sciences], 2012, no. 2, pp. 213–220.
7. Elkin M. D., Erman M. A., Pulin V. F. Strukturno-dinamicheskie modeli i angarmonicheskiy analiz kolebatelnykh sostoyaniy pyatichlennykh tsiklicheskiykh soedineniy [Structural and dynamic models and anharmonic analysis of vibrational states of pentagonal cyclic compounds]. *Vestnik Saratovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Bulletin of Saratov State Technical University], 2006, no. 4, issue 4, pp. 38–44.
8. Elkin M. D., Likhter A. M., Dzhalumukhambetova Ye. A., Alykova O. M., Ravcheeva N. A. Strukturno-dinamicheskie modeli i kolebatelnye sostoyaniya dimerov khluratsilov [Structural and dynamic models and vibrational states of chlorouracil dimers]. *Yestestvennye nauki* [Natural Sciences], 2012, no. 2, pp. 220–227.

9. Elkin P. M., Pulin O. V., Dzhalukhambetova Ye. A. Teoreticheskiy analiz tautomernykh form purina [Theoretical analysis of tautomer forms of purine]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2008, vol. 75, no. 1, pp. 23–27.
10. Elkin M. D., Babkov L. M. Uchet angarnonicheskogo smeshcheniya polos v modelnykh raschetakh kolebatelnykh spektrov dimerov s vodorodnoy svyazu [The accounting of anharmonic shift of bands 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. 20–25.
11. Elkin M. D., Kosterina E. K. DFT analiz struktury i spektrov tautomernykh form adenina [DFT analysis of structure and spectra of tautomer forms of adenine]. *Yuzhno-Rossiyskiy vestnik geologii, geografii i globalnoy energii* [South-Russian Bulletin of Geology, Geography and Global Energy], 2006, no. 5 (18), pp. 52–60.
12. Acevedo-Chaves R., Costas M. E., Escudero R. Vagmetic study of the novel polynuclear compound. *J. Solid State Chemistry*, 1997, vol. 132, pp. 78–87.
13. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. *Gaussian*. Pittsburg PA, 2003.
14. Gnasecaran S., Pomnambalan U., Muthu S., Mapiaphan L. Vibrational spectra and normal coordinate analisis on structure of mercaptopurine. *Asian Journal of Physics*, 2003, vol. 12, no. 1, pp. 51–56.
15. Hoy A. R., Mills I. M., Strey G. Anharmonic force constants calculation. *J. Mol. Phys.*, 1972, vol. 21, no. 6, pp. 1265–1290.
16. Stepanenko T., Lapinsky L., Novak M., Kwiatkowski J., Leszczinski J. Tautomerizm and infrared spectra of 2-thiopurine: an experimental matrix isolation and theoretical ab initio and density functional theory study. *Spectrochim. Acta*, 2001, vol. 57, no. 2, pp. 375–383.