



Список литературы

1. *Kato T.* Теория возмущений линейных операторов. М.: Мир, 1972. 740 с.
2. *Гавва С. П.* Аналитические возмущения волновых функций и уровней энергии колебательных состояний молекул // *Опт. и спектр.* 2009. Т. 106, № 4. С. 533–536.
3. *Wilson Jr. E. B., Hovard J. B.* The vibration-rotation energy levels of polyatomic molecules // *J. Chem. Phys.* 1936. Vol. 4. P. 260–268.
4. *Watson J. K. G.* Simplification of the molecular vibration-rotation Hamiltonian // *Mol. Phys.* 1968. Vol. 15. P. 479 – 490.
5. *Aliiev M. R., Watson J. K. G.* Calculated sextic centrifugal distortion constants of polyatomic molecules // *J. Mol. Spectros.* 1976. Vol. 61. P. 29–52.
6. *Niroomond A. A., Parker P. M.* Sequential contact transformation formulation of asymmetric-rotator vibration-rotation Hamiltonian // *J. Mol. Spectros.* 1981. Vol. 85. P. 40–54.
7. *Amat C., Nielsen H. H., Tarrago G.* Rotation-vibration of polyatomic molecules. N. Y.: M. Dekker Inc., 1971. 520 p.
8. *Алиев М. Р., Михайлов В. М.* Интенсивности колебательно-вращательных переходов в основных ИК полосах поглощения многоатомных молекул // *Опт. и спектр.* 1981. Т. 51. С. 633–638.

УДК 539.193/194;535/33/34

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ДИМЕРОВ 5X-ЗАМЕЩЕННЫХ УРАЦИЛА

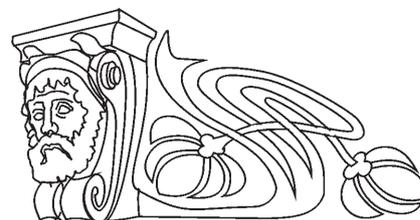
П. М. Элькин, В. Ф. Пулин, В. И. Березин¹

Саратовский государственный технический университет

E-mail: pashaelkin@yandex.ru

¹Саратовский государственный университет

E-mail: elkinmd@mail.ru



На основании квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала ряда замещенных 5X урацила (X = CH₃, NH₂, F, Cl) построена теория характеристических колебаний для мономеров и димеров данного класса биомолекул. Выявлены признаки спектральной идентификации для димеров с сильной водородной связью.

Ключевые слова: колебательные спектры, димеры 5X-замещенных урацила, параметры адиабатического потенциала.

System's Analysis of Vibrational Spectra in Dimers of 5X-Substituted Uracile

P. M. Elkin, V. F. Pulin, V. I. Berezin

On based of method DFT/b3LYP for parameters of adiabatic potential for the substituted 5X-uraciles (X = CH₃, NH₂, F, Cl) the theory of characteristic vibration for monomers and dimers for the regarded class biomolecules are constructed. The indications of spectral identification for dimers with strong hydrogen bonds are revealed.

Key words: vibrational spectra, dimers of 5X-substituted uraciles, parameters of adiabatic potential.

Введение

Теоретическая интерпретация колебательных спектров замещенных урацила как одного из оснований ДНК являлась предметом исследования многих публикаций. Достаточно сослаться на те из них [1–9], в которых список литературы дает представление об интересе к построению структурно-динамических моделей данного класса биомолекул.

Обоснованием достоверности результатов, представленных в работах [1–9], служило хорошее совпадение с экспериментальными данными по положению интенсивных полос в ИК и КР спектрах для конкретного исследуемого молекулярного объекта. Системный анализ молекулярных параметров, характеризующих общие закономерности в колебательных спектрах замещенных урацила, в цитируемых работах не просматривается. Отметим, что в реальных условиях урациловые основания ДНК находятся в конденсированных состояниях, образуя димеры с сильными водородными связями.

Цель данной работы состоит в анализе характера проявления параметров адиабатического потенциала 5X-замещенных урацила (X = F, Cl, CH₃, NH₂) в ИК и КР спектрах, выявления признаков спектральной идентификации димеров соединений.

Исследования осуществлены в рамках ангармонической модели теории молекулярных колебаний. Оценка положения полос осуществлялась в рамках известного соотношения:

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

Для ангармонических констант χ_{sr} использовались выражения из публикаций [10–12]:



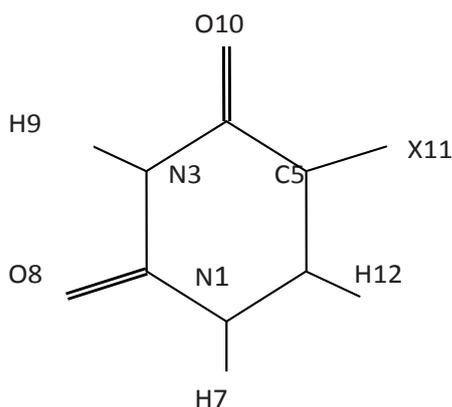
$$\chi_{ss} = 1/16F_{ssss} - 5/48(F_{sss})^2/v_s + 1/32(F_{ssr})^2(\Omega(s;s;-r) - \Omega(s;s;r) - 12\Omega(r;r;r)) (1-\delta_{sr}), \quad (2)$$

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

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

Модельные расчеты колебательных спектров и их обсуждение

Оптимизация исходной геометрии 5X- замещенных урацила (рисунок) осуществлена в предположении плоской исходной структуры (симметрия Cs) мономеров соединений.



Молекулярная диаграмма 5X-замещенных урацилов

Приведенные в табл. 1 данные позволяют судить о влиянии заместителя на геометрию урацилового кольца. Значения длин валентных связей CX согласуются с экспериментом из монографии [13]. Для остальных валентных связей и валентных углов отклонение от соответствующих параметров в молекуле урацила [9] является величиной $\sim 0.1 \text{ \AA}$ и 2° соответственно.

Образование димеров приводит к изменению длин валентных связей C=O и NH, участвующих в образовании водородных связей на величину $\sim 0.2 \text{ \AA}$. Изменения остальных геометрических параметров по сравнению с мономерами укладываются в указанные выше интервалы отклонений для длин валентных связей и валентных углов урацилового остова.

Длины водородных связей для димеров H7---O8, H9---O10, H9---O8 оценены значениями 1.8, 1.85, 1.89 \AA соответственно. Эти димеры принадлежат группе симметрии C_{2h} . Для них имеет место альтернативное правило отбора для интенсивностей в спектрах ИК и КР. Для смешанных димеров (симметрия Cs) значения оценки длин водородных связей приведены в работах [7–9].

Интерпретация фундаментальных колебаний мономеров и симметричных димеров 5X-замещенных урацилов, основанная на результатах квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала в рамках метода DFT/b3LYP/6-311G**

Таблица 1

Оптимизированные значения геометрических параметров 5X-урацилов

Связи, \AA	X=H	CH ₃	NH ₂	F	Cl	Углы, $^\circ$	H	CH ₃	NH ₂	F	Cl
R(1,2)	1.39	1.39	1.36	1.39	1.39	A(2,1,6)	123.7	123.9	124.0	123.9	123.9
R(1,6)	1.37	1.38	1.39	1.38	1.37	A(2,1,7)	115	115.1	115.7	115.3	115.3
R(1,7)	1.01	1.01	1.03	1.01	1.01	A(1,2,3)	112.7	112.4	113.4	112.6	112.5
R(2,3)	1.38	1.39	1.38	1.39	1.39	A(1,2,8)	122.8	123.3	123.3	123.2	123.1
R(2,8)	1.21	1.21	1.23	1.21	1.21	A(2,3,4)	128.4	128.3	127.2	128.9	129.1
R(3,4)	1.41	1.41	1.40	1.41	1.41	A(2,3,9)	115.5	115.6	116.0	115.3	115.4
R(3,9)	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01	A(3,4,5)	113.3	114.5	115.4	112	112.4
R(4,5)	1.46	1.47	1.47	1.46	1.47	A(3,4,10)	120.5	120.5	122.0	122.1	121.1
R(4,10)	1.21	1.22	1.22	1.21	1.21	A(4,5,6)	120	118.2	118.3	121.6	120.5
R(5,6)	1.35	1.35	1.35	1.34	1.35	A(4,5,11)	118	117.8	115.4	117.1	118.0
R(5,11)	1.08	1.50	1.39	1.34	1.74	A(1,6,5)	122	122.8	121.6	120.8	121.6
R(6,12)	1.08	1.08	1.08	1.08	1.08	A(1,6,12)	115.3	115.0	115.4	117.2	116.2



[14], представлена в табл. 2, 3. Из рассмотрения исключены полосы низкой интенсивности как не представляющие интерес для задачи спектральной идентификации соединений. Отметим, что использование базисов 6-311+G** и 6-311++G**,

учитывающих диффузионные свойства атомных орбиталей [14], принципиального значения для задачи теоретической интерпретации колебательных спектров соединений урацилового ряда, как показано в публикациях [7–9], не имеет.

Таблица 2

Интерпретация фундаментальных колебаний мономера и димеров 5X-урацилов

Форма колебаний	$\nu_{\text{эксп}}$ [1]	Мономер			7---8			$\nu_{\text{анг}}$	8---9		9---10	
		$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР		ИК	КР	ИК	КР
5-фторурацил												
Q, β	1686	1682	35	33	1658	68	61	1664	119	66	85	74
β_{NH}	1472	1459	37	7.5	1507	11	91	1459	82	13	72	21
Q, β , γ	1400	1385	49	2.7	1418	157	4.9	1429	8.8	41	28	60
β_{NH}	1367	1367	27	1.7	1366	5.6	7.9	1386	186	5.8	119	5.7
β ,Q	1333	1319	18	26	1319	15	92	1310	16	44	60	69
Q _{CF} ,Q, γ	1247	1230	263	4.5	1235	509	9.9	1229	502	4.9	522	10
Q, β , β_{NH}	1184	1159	78	2.9	1179	92	3.4	1162	159	3.8	38	17
Q, γ , $\beta_{\text{C=O}}$	1147	1122	19	2.8	1126	110	10	1127	19	3.4	58	3.5
Q, γ	959	950	16	1.9	966	47	9.0	954	21	3.2	71	16
γ	806	802	33	4.7	797	226	6.5	800	176	9.0	68	9.9
Q, γ	–	722	11	13	731	21	35	733	59	42	35	39
$\beta_{\text{C=O}}$	–	625	2.3	6.0	624	2.4	22	622	12	12	16	10
γ	532	529	6.9	4.9	538	33	21	525	41	8.4	57	8.0
γ	451	449	7.3	3.3	456	92	5.6	453	14	7.3	30	7.0
$\beta_{\text{C=O}}$	–	389	18	1.5	395	41	3.3	394	76	2.2	76	2.7
ρ	877	885	31	3.0	882	35	6.9	861	18	3.0	21	3.9
$\rho_{\text{C=O}}$, χ	754	763	86	2.0	756	92	2.9	742	28	0.7	34	0.6
χ , ρ_{CC}	–	379	11	2.0	388	12	2.9	383	9.5	3.9	17	4.7
5-хлорурацил												
Q, β_{NH} , β	1631	1635	68	52	1619	149	92	1622	112	91	158	85
β_{NH}	1460	1448	58	14	1507	42	144	1456	113	28	86	34
β_{NH}	1392	1372	11	3.0	1395	243	4.2	1437	1.5	52	69	47
Q, $\beta_{\text{C=O}}$	1387	1365	110	1.7	1367	4.8	10	1371	363	2.0	198	3.8
β ,Q	1332	1319	144	29	1314	15	85	1308	4.3	35	44	59
β_{NH} , β ,	1186	1163	117	1.4	1200	220	6.3	1174	180	3.9	140	7.3
Q, γ	1166	1124	7.9	2.9	1135	1.5	5.5	1142	66	3.1	84	5.3
Q _{CCl} , γ	1073	1057	75	0.7	1045	124	2.8	1051	99	0.2	128	1.3
β ,Q, β	964	954	17	3.2	966	62	10	958	21	4.4	69	18
γ	762	756	7.2	19	766	88	40	765	36	47	6.7	46
γ	652	649	46	2.9	652	195	5.0	641	243	10	109	7.6
$\beta_{\text{C=O}}$, β_{CCl}	600	602	0.3	6.3	604	3.6	26	599	0.4	11	6.6	10
γ	532	531	8.5	4.7	538	59	24	532	28	7.4	63	6.3
$\beta_{\text{C=O}}$	396	402	16	4.7	416	89	8.4	410	58	9.7	96	6.4
$\beta_{\text{C=O}}$	344	359	5.7	2.6	359	6.5	5.4	363	24	5.9	9.1	5.7
ρ	895	896	15	1.3	907	8.8	3.6	890	80	3.3	0.6	2.4
$\rho_{\text{C=O}}$, χ	758	763	86	0.4	765	119	1.3	746	33	2.5	41	2.0
χ , ρ_{Cl}	384	384	23	0.7	398	19	1.9	387	29	3.2	35	4.1



Окончание табл. 2.

Форма колебаний	$\nu_{\text{эксп}}$ [2]	Мономер			7---8			$\nu_{\text{анг}}$	8---9		9---10	
		$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР		ИК	КР	ИК	КР
Тимин (5-метилурацил)												
Q, β	1667	1663	46	35	1644	152	83	1646	58	72	11	50
Q, β_{NH}	1458	1457	88	54	1512	44	127	1459	165	54	157	39
Q, β_{NH},γ	1387	1381	97	3.3	1412	264	6.1	1432	5.5	37	68	49
β_{NH}	1366	1369	20	1.5	1363	8.0	9.0	1384	351	3.0	186	28
β, Q	1357	1345	13	24	1339	6.6	86	1332	2.8	39	50	58
Q _{CC} , Q, γ	1234	1192	29	2.2	1203	249	2.1	1193	6.3	2.9	124	7.4
Q, β, β_{NH}	1170	1168	117	0.5	1198	2.4	4.3	1175	253	0.3	105	5.7
Q, γ	1140	1118	6.0	2.5	1117	31	9.7	1135	1.8	3.2	28	4.3
Q, γ	945	936	11	4.3	954	53	25	949	7.7	8.3	44	21
γ	808	787	4.5	5.3	790	94	8.9	790	49	14	8.1	12
Q, γ	717	720	4.7	13	723	6.2	30	724	45	43	26	37
$\beta_{\text{C=O}}$	621	603	1.2	5.3	602	0.4	22	599	7.2	9.0	13	8.3
γ	541	539	7.6	4.1	547	32	20	538	46	7.0	60	6.8
γ	–	460	18	4.5	460	133	8.1	458	43	10	41	9.4
$\beta_{\text{C=O}}$	391	389	19	1.2	399	40	2.7	400	91	1.9	92	1.7
ρ	885	897	16	2.0	900	9.5	4.3	885	1.6	4.1	14	1.3
$\rho_{\text{C=O}}, \chi$	764	766	67	2.1	769	97	2.8	750	26	4.1	34	3.2
$\chi, \rho_{\text{NH}}, \rho_{\text{CC}}$	391	398	19	1.7	406	12	2.2	395	23	3.6	30	4.5
5-аминоурацил												
Q, β	1670	1653	61	76	1650	153	195	1655	280	177	123	96
β_{NH}	1450	1459	47	15	1507	1.4	150	1463	115	34	109	26
Q, β, γ	1420	1392	42	9.3	1436	153	12	1432	13	63	31	74
β_{NH}	1365	1371	24	1.6	1374	23	51	1396	176	19	97	17
β, Q	–	1353	15	22	1360	4.2	45	1362	8.4	36	87	58
Q _{CN} , Q, γ	1240	1245	168	7.4	1252	297	24	1252	299	12	308	13
Q, $\gamma, \beta_{\text{C=O}}$	–	1176	4.6	18	1195	147	18	1196	38	20	0.6	49
Q, β, β_{NH}	–	1164	69	1.9	1183	50	46	1166	86	13	117	11
Q, γ	–	948	8.0	2.5	966	31	11	967	7.9	4.1	52	16
γ	–	807	11	2.3	834	85	11	817	87	7.9	64	10
Q, γ	–	725	4.7	17	734	2.1	41	734	22	58	26	48
$\beta_{\text{C=O}}$	–	609	27	8.0	615	174	32	611	135	13	43	12
γ	555	532	8.9	4.2	546	43	20	539	190	0.5	67	7.3
γ	485	458	9.7	3.9	467	93	6.2	465	27	8.5	21	8.7
$\beta_{\text{C=O}}$	380	386	17	1.2	404	43	3.0	406	90	1.9	94	1.9
β_{CN}	310	307	7.1	0.5	306	9.6	1.1	315	14	1.0	26	2.0
ρ	840	819	48	5.4	813	79	3.4	804	63	8.3	21	3.5
$\rho_{\text{C=O}}, \chi$	765	764	21	1.7	764	58	3.4	759	3.8	3.2	3.0	2.6
$\rho_{\text{C=O}}, \chi$	740	741	42	0.2	731	14	0.7	729	32	0.1	22	0.1
ρ_{N3H}	–	670	139	2.0	–	–	–	387	19	1.6	25	2.8
ρ_{N1H}	–	526	68	1.1	–	–	–	343	27	3.5	17	2.9
ρ_{CN}	380	380	15	0.8	386	26	1.6	1655	280	177	123	96
χ, ρ_{CC}	–	340	12	1.8	360	8.6	2.6	1459	115	34	109	26

Примечание. Усредненные значения частот колебаний в см^{-1} , интенсивности в спектрах КР в км/моль , в спектрах КР в $\text{Å}^4/\text{а.е.м.}$



Таблица 3

Интерпретация валентных и крутильных колебаний связей NH в 5X-урацилах

Форма колебаний	v _{эксп} [1, 2]	Мономер			7---8			8---9			9---10		
		v _{анг}	ИК	КР	v _{анг}	ИК	КР	v _{анг}	ИК	КР	v _{анг}	ИК	КР
5-Фторурацил													
Q _{NH}	3476	3479	108	93	3422	136	139	3464	214	167	3464	224	245
Q _{NH}	3424	3432	70	72	3113	3241	–	3182	1921	–	3161	2191	–
Q _{NH}	–	–	–	–	3065	–	869	3152	–	553	3127	–	596
P _{NH}	–	–	–	–	851	207	–	889	223	–	901	203	–
P _{NH}	660	658	61	2.3	667	78	5.1	–	–	–	–	–	–
P _{NH}	536	536	61	1.0	–	–	–	543	150	1.5	549	150	1.6
5-Хлорурацил													
Q _{NH}	3417	3458	114	109	3421	140	158	3466	224	190	3458	232	267
Q _{NH}	–	3438	72	81	3109	3679	–	3189	2096	–	3155	2326	–
Q _{NH}	3108	–	–	–	3064	–	1149	3161	–	733	3122	–	687
P _{NH}	–	–	–	–	855	199	–	890	138	–	902	199	–
P _{NH}	656	658	62	1.1	668	73	5.3	–	–	–	–	–	–
P _{NH}	545	538	59	0.1	–	–	–	559	154	1.3	568	152	1.4
5-Метилурацил (Тимин)													
Q _{NH}	3485	3478	96	107	3425	117	162	3463	188	190	3462	195	269
Q _{NH}	–	3426	61	87	3124	3365	–	3188	1987	–	3153	2298	–
Q _{NH}	3130	–	–	–	3080	–	1005	3160	–	665	3119	–	679
P _{NH}	–	–	–	–	858	195	–	892	207	–	909	175	–
P _{NH}	662	668	71	2.2	672	82	4.9	–	–	–	–	–	–
P _{NH}	551	556	58	1.1	–	–	–	558	155	1.6	564	153	1.7
5-Аминоурацил													
Q _{NH}	–	3470	97	105	3428	121	149	3469	208	191	3468	196	268
Q _{NH}	–	3427	64	80	3116	3344	–	3156	2275	–	3166	2212	–
Q _{NH}	–	–	–	–	3068	–	967	3125	0.2	708	3133	0.1	648
P _{NH}	–	–	–	–	853	179	–	899	195	–	905	190	–
P _{NH}	–	670	139	2.0	810	5.2	1.8	871	0.6	0.3	876	–	0.1
P _{NH}	–	526	68	1.1	671	174	4.8	533	10	8.1	535	143	2.3

Весь набор фундаментальных колебаний можно разделить на две группы. Первая касается колебаний урацилового остова (см. табл. 2), вторая связана с характером поведения полос, интерпретированных как валентные и неплоские деформационные колебания связей NH (см. табл. 3). При образовании димеров смещение полос указанных колебаний достигает величины ~ 300 см⁻¹.

Согласно данным, приведенным в табл. 3, валентные и неплоские деформационные колебания связей NH следует считать характеристическими по частоте, форме колебаний и интенсивности для каждого типа димера. Различия в положении полос, которое может достигать величины ~ 100 см⁻¹, следует использовать для спектраль-

ной идентификации конкретного типа димера. Использование для этих же целей результатов модельных расчетов интенсивностей полос представляется нам затруднительным.

Отметим, что расхождение в положении полос валентных и деформационных колебаний связей NH для димеров 7---8 5X-урацила и соответствующего димера урацила является величиной ~10 см⁻¹. Для димеров типа 8---9 и 9---10 расхождение составляет величину ~ 20 см⁻¹. Характер поведения интенсивностей полос сохраняется. Этот факт дает основание утверждать, что влияние заместителя в 5X-урацилах на силовое поле азациклического кольца носит локальный характер.



Сделанный вывод подтверждают результаты модельных расчетов фундаментальных колебаний урацилового остова, приведенные в табл. 2. Кроме полос, интерпретированных как валентные колебания связей CX , смещение остальных полос оценивается величиной $\sim 30 \text{ см}^{-1}$. Исключение составляют полосы в диапазоне $800\text{--}750 \text{ см}^{-1}$, интерпретированные как колебания валентных углов шестичленного цикла (γ), примыкающие к заместителю. Здесь сказывается кинематический эффект, когда увеличение массы заместителя приводит к уменьшению значения частоты указанного колебания.

Предлагаемая в табл. 2 интерпретация колебаний позволяет сделать вывод о характеристичности полос в димерах 5X-урацилов по частоте и форме колебаний, а для ряда полос имеет место характеристичность и по интенсивности (в рамках качественной оценки этих параметров).

Смещение полос ($\sim 30\text{--}50 \text{ см}^{-1}$) при димеризации соединений касается диапазона выше 1300 см^{-1} , однако использовать этот факт для задачи спектральной идентификации затруднительно. В этих целях следует ориентироваться на значения интенсивностей полос в указанном диапазоне, отличие которых для димеров различного типа может достигать порядка величины. Отметим и тот факт, что положение соответствующих полос в димерах типа 8---9 и 9---10, согласно модельным расчетам, различаются на величину $\sim 20 \text{ см}^{-1}$, поэтому в табл. 2 для этих димеров приведены усредненные значения частот. Для спектральной идентификации указанных димеров можно использовать лишь значения интенсивностей полос в диапазоне выше 1000 см^{-1} .

Согласно модельным расчетам димеризация приводит к смещению полос, интерпретированных как валентные колебания связей $C=O$ ($\sim 1770 \text{ см}^{-1}$) в длинноволновый диапазон на величину $\sim 30\text{--}70 \text{ см}^{-1}$. Полосы очень интенсивны в ИК спектрах. В КР спектрах их интенсивность может различаться в разы. Если учесть контур указанных полос в реальном эксперименте, то использование их в качестве признаков спектральной идентификации димеров вызывает затруднение.

Заключение

Сопоставление экспериментальных данных по колебательным спектрам рассмотренных 5X-замещенных урацилов с результатами теоретического анализа фундаментальных колебаний

дает основание утверждать следующее. Для данного класса замещенных урацила имеет место характеристичность колебаний по частоте и форме колебаний. Исключение составляет диапазон $750\text{--}800 \text{ см}^{-1}$, а также полосы, интерпретированные как валентные и деформационные колебания связей заместителя. Влиянием заместителя на параметры полос, интерпретированных как валентные и деформационные колебания связей NH , можно пренебречь. В качестве признаков спектральной идентификации типа димера следует использовать интенсивности полос. Метод функционала плотности позволяет получать достоверные оценки параметров адиабатического потенциала урацила и его замещенных.

Список литературы

1. *Dobrowolski J. Cz., Rode J. E., Kobos R., Jamroz M., Bajdor K., Mazurik A. R.* Ar-matrix IR spectra of 5-halogenuracil interpreted by DFT calculation // *J. Phys. Chem. A* 2005. Vol. 109. P. 2167–2182.
2. *Zhi-Guo Shang, Dor N. T., Wong Y. T., Tan Y. C., Ying B., Mo Y. J.* A study of DFT and surface enhanced Raman scattering in silver colloids for thymine // *J. Mol. Structure*. 2007. Vol. 826. P. 64–67.
3. *Rastogi V. K., Palafox N. A., Guerrero-Martinez A., Tardajos G., Valts J. K., Kostova I., Shlukcer S., Kiefer W.* FT-IR and Raman spectra, ab initio and density functional computations of the vibrational spectra, molecular geometry, atomic charges and some molecular properties of biomolecule 5-iodouracil // *J. Mol. Structure*. 2010. Vol. 940. P. 29–44.
4. *Prasad O., Sinha L., Kumar N.* Theretical Raman and IR spectra of tegafur and comparison of molecular electrostatic potential surface, polarizability and hyper polarizability of tegafur with 5-fluoro-uracil by density functional theory // *J. At. Mol. Sci.* 2010. Vol. 1, № 3. P. 201–214.
5. *Singh J. S.* Rtir and Raman spectra and fundamental frequencies of 5-halosubstituted uracils // *Spectrochim. Acta*. 2012. Vol. 87A, № 2. P. 106–111.
6. *Sing J. S.* Laser Raman and infra-red spectra of biomolecules : 5-aminouracil // *Pram. J. of Physics*. 2008. Vol. 70, № 3. P. 479–486.
7. *Элькин М. Д., Джалмухамбетова Е. А., Гречухина О. Н.* Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила // *Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика*. 2008. Т. 8, вып. 2. С. 25–29.
8. *Эрман Е. А., Элькин М. Д., Равчеева Н. А., Лихтер А. М., Джалмухамбетова Е. А., Алыкова О. М.* Структурно-динамические модели и колебательные спектры димеров хлорурацила // *Естественные науки*. 2012. № 2(39). С. 220–226.
9. *Элькин П. М., Эрман М. А., Карташов В. М.* Математическое моделирование структуры и динамики димеров урацила и азаурацилов // *Изв. Волгоград. гос. техн. ун-та*. 2012. № 10(97). С. 55–62.



10. Эрман Е. А., Элькин П. М., Смирнов А. П. Математические модели и компьютерные технологии в молекулярном моделировании // Прикаспийский журнал : управление и высокие технологии. 2010. № 3(18). С. 126–130.
11. Элькин М. Д., Пулин В. Ф., Осин А. Б. Математические модели в молекулярном моделировании // Изв. Саратов. гос. техн. ун-та. 2010. № 4(49). С. 36–39.
12. Элькин М. Д., Бабков Л. М. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2011. Т. 11, вып. 1. С. 20–25.
13. Пулин В. Ф., Элькин М. Д., Березин В. И. Исследование динамики молекулярных соединений различных классов. Саратов : Изд-во Саратов. гос. техн. ун-та, 2002. 436 с.
14. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 03. Revision B.03 / Gaussian Inc. Pittsburgh, 2003. 302 p.