



24. Эггинс Б. Химические и биологические сенсоры. М. : Технофера, 2005. 336 с.
25. van Gent Jos, Lambeck P. V., Kreuwel H. M. J., Gerritsma G. J., Sudholter E. J. R., Reinhoudt D. N., Popma Th. J. A. Optimization of a chemo-optical surface plasmon resonance based sensor // *Appl. Opt.* 1990. Vol. 29, № 19. P. 2843–2849.
26. Fontana E., Pantell R. H., Strober S. Surface plasmon immunoassay // *Appl. Opt.* 1990. Vol. 29, № 31. P. 4664–4704.
27. de Breuijn Helene E., Altenburg Bert S. F., Kooyman Rob P. H., Greve J. Determination of thickness and dielectric constant of thin transparent dielectric layers using surface plasmon resonance // *Opt. Commun.* 1991. Vol. 82, № 5, 6. P. 425–432.
28. de Breuijn Helene E., Kooyman Rob P. H., Greve J. Choice of metal and wavelength for surface-plasmon resonance sensors : some considerations // *Appl. Opt.* 1992. Vol. 31, № 4. P. 440–442.
29. Никитин А. К., Тищенко А. А., Черная А. И. Датчики физических величин на основе планарных волноводных структур оптического диапазона // *Зарубежная электроника.* 1990. № 10. С. 14–30.
30. Никитин П. И. Усовершенствованные методы поверхностно-плазмонного резонанса и биологические и химические сенсорные системы на их основе // *Сенсорные системы.* 1998. Т. 12, № 3. С. 69–87.
31. Никитин А. К. Плазменная оптометрия : автореф. дис. ... д-ра техн. наук / Науч.-технол. центр уникального приборостроения ; Рос. Академия наук. М., 2002. 28 с.
32. Войтович И. Д., Корсунский В. М. Интеллектуальные сенсоры : учеб. пособие. М. : Интернет-Университет информационных технологий ; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. 623 с.
33. Leung A., Shankar P. M., Mutharasan R. A review of fiber-optic biosensors // *Sensors and Actuators : Chemical.* 2007. Vol. 125, iss. 2. P. 688–703.
34. Сычев П. Г., Названов В. Ф. Спектры отражения структур металл-диэлектрик (*J*-агрегат) на поверхностных плазмонах (компьютерное моделирование) // *Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами : материалы Всерос. науч. школы-семинара / под ред. Д. А. Усанова. Саратов : Саратов. источник, 2014. С.111–113.*
35. Сычев П. Г., Названов В. Ф. Особенности спектров отражения структур металл–*J*-агрегат с поверхностными плазмонами (компьютерное моделирование) // *Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2014 : материалы Междунар. симпозиума Saratov Fall Meeting 2014 «Оптика и биофотоника-II» / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. Саратов : Новый ветер, 2014. С. 61–64.*

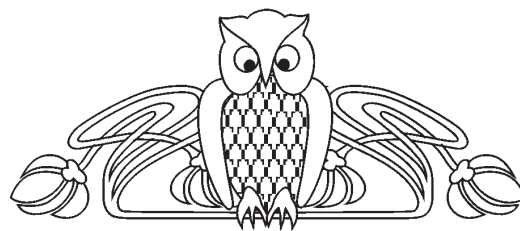
УДК 539.182/184, 519.677

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ ПАРНОЙ АССОЦИАЦИИ В ИК-СПЕКТРАХ ПИРИДИНА МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

К. В. Березин, В. В. Нечаев, О. В. Козлов, А. В. Новоселова, М. Л. Чернавина, В. И. Березин, М. К. Березин, В. В. Новоселов

Саратовский государственный университет  
E-mail: nusena1975@mail.ru

Методом функционала плотности B3LYP/6-311+G(d, p) выполнен расчет структуры, частот нормальных колебаний и интенсивностей полос в ИК-спектрах пяти димеров пиридина с водородной связью. Выполнено моделирование ряда сложных колебательных контуров в ИК-спектре пиридина с учетом межмолекулярного взаимодействия. Показано, что большой вклад в формирование полос спутников, усложняющих структуру колебательных полос мономерного пиридина в матрично-изолированном низкотемпературном ИК-спектре, вносят водородосвязанные парные самоассоциаты. Предложена детальная интерпретация низкотемпературного матрично-изолированного ИК-спектра поглощения пиридина  $H_5$  и  $D_5$ . Вычислены термодинамические характеристики образования комплексов с учетом базисной суперпозиционной ошибки.



**Ключевые слова:** инфракрасная (колебательная) спектроскопия, ИК-спектр, метод матричной изоляции.

### The Manifestation's Research of the Pair Association in the Pyridine's Ir-Spectrums by the Matrix Isolation Technique

K. V. Berezin, V. V. Nechaev, O. V. Kozlov, A. V. Novoselova, M. L. Chernavina, V. I. Berezin, M. K. Berezin, V. V. Novoselov

The calculation of structure, frequencies of normal fluctuations and the strips intensity in IR-spectrums of five dimer of pyridine with hydrogen communication has been performed by the matrix



isolation technique B3LYP/6-311+G (d, p). The number's modeling of the difficult oscillatory contours in the pyridine's IR-spectrum was executed taking into account the intermolecular interaction. It is shown that the hydrogen communications of the pair self-associate the brought the big contribution to formation of strips of the satellites complicating structure of oscillatory strips of monomeric pyridine in the matrix-isolated low-temperature IR-spectrum. The detailed interpretation of the low-temperature matrix isolated IR-spectrum of H<sub>5</sub> D<sub>5</sub> pyridine absorption is offered. Thermodynamic characteristics of complexes formation taking into account a basic peak-a-boo mistake are calculated.

**Key words:** infrared (oscillatory) spectroscopy, IR-spectrum, matrix isolation technique.

### Введение

При взаимодействии молекул положения их энергетических уровней и вероятностей переходов между ними изменяются, что лежит в основе применения колебательной спектроскопии к исследованию межмолекулярных взаимодействий различных типов.

Межмолекулярные взаимодействия условно подразделяют на два типа: специфические, обусловленные наличием водородной связи, и универсальные, называемые взаимодействием Ван-дер-Ваальса. Известно, что они определяют структуру и биологическую активность сложных биомолекул, таких как белки, ДНК и их многообразных комплексов.

Парные ассоциаты ароматических N-гетероциклов можно рассматривать в качестве модельных систем для детального исследования проявлений межмолекулярных взаимодействий в оптических спектрах, а также для построения спектрально-структурных корреляций для анализа конформационной динамики в биополимерах.

Большой объем информации о взаимодействии удается получить путем изоляции молекул и их комплексов в матрицах инертных газов при низкой температуре [1] преимущественно за счет резкого уменьшения ширины полос в спектре. Метод матричной изоляции [2, 3] широко использовался для исследования колебательных состояний нестабильных частиц [4, 5], конформеров [6, 7], комплексов с водородной связью [8, 9], оснований ДНК [10–12], аминокислот [13, 14], порфиринов [15, 16].

Образование водородной связи между алифатическим донором и акцептором протона сопровождается изменением характеристик связей ближайшего окружения, что проявляется в спектрах различных типов [17]. В случае, когда атом, связывающий протон, входит в состав сопряженной системы, возмущение оказывает

влияние на свойства всех связей, входящих в сопряжение, а также на характеристики связей ближайшего окружения. Например, для N-гетероциклических соединений при протонировании атомов N наблюдается гипсохромный сдвиг полосы низкоэнергетического  $n \rightarrow \pi^*$  электронного перехода и сдвиг частот кольцевых колебаний, регистрируемый в ИК- и КР-спектрах.

На практике данный эффект может применяться для доказательства существования водородной связи (Н-связи) и установления отнесенных нормальных колебаний в сложных ароматических соединениях с Н-связями. Недавно эффект повышения колебательных частот наблюдался при протонировании пуринового кольца ацетильного производного аденозина [18]. Следовательно, частотные сдвиги кольцевых мод могут служить в качестве тонкого инструмента для исследования структуры и энергетики комплексов с водородной связью (Н-комплексов) производных пуриновых оснований (аденин, гуанин) с белками [19].

В работе [20] был зарегистрирован спектр ИК-поглощения пиридина в матрице твердого аргона, на основе эмпирического метода атом-атомных потенциалов определена наиболее вероятная структура  $\pi$ -связанных димеров и сделана оценка влияния межмолекулярного взаимодействия на положение полос фундаментальных колебаний. Наряду с  $\pi$ -димерами пиридин может образовывать ряд комплексов с водородной связью.

Использование частотных сдвигов в прикладных задачах подразумевает точную интерпретацию всех нормальных колебаний донора, акцептора и их Н-комплекса. Такая возможность появилась только в последнее время благодаря совершенствованию квантовомеханических методов, учитывающих электронную корреляцию: теория возмущений Меллера–Плессе [21], различные варианты теории функционала плотности [22] и методы конфигурационного взаимодействия [23, 24].

Целью данной работы была теоретическая интерпретация низкотемпературного матрично-изолированного ИК-спектра молекулы пиридина с учетом межмолекулярного взаимодействия на основе квантово-механических расчетов геометрических параметров, силовых полей и интенсивностей полос в ИК-спектре изолированного пиридина и его самоассоциатов методом функционала плотности.



### Методика расчета

Расчет геометрических параметров, дипольных моментов, абсолютных ИК-интенсивностей и частот нормальных колебаний изолированных молекул пиридина и его водородосвязанных димеров был выполнен в приближении B3LYP/6-311+G(d, p) [25, 26] по программе [27]. Для эффективного учета ангармоничности вычисленные колебательные частоты масштабировались по методу [28]. Для интерпретации и разделения колебаний на внутримолекулярные и межмолекулярные использовалась программа визуализации форм колебаний Molekel [29]. Термодинамические характеристики самоассоциатов пиридина вычислялись по методике, описанной в [30].

Молекула пиридина относится к классу ароматических азациклов, легко образующих водородную связь за счет наличия в своем кольце третичного атома азота. ИК-спектр пиридина в матрице твердого азота при  $T = 5\text{K}$  в концентрациях 1/4000 и 1/1500 был зарегистрирован в работе [20] и там же была дана эмпирическая интерпретация наблюдаемых частотных сдвигов на базе предположения о парной ассоциации пиридина. Парные самоассоциаты сэндвичевого типа, или  $\pi$ -комплексы, образование которых в матрице азота предполагалось в [20], стабилизируются преимущественно ван-дер-ваальсовыми силами. Рассмотрение таких взаимодействий лежит за рамками приближения DFT/B3LYP, что в данной работе не рассматривалось.

При моделировании теоретического спектра с учетом образования димеров отношение концентраций изолированных молекул пиридина и димера с самой большой константой равновесия Д3 было выбрано исходя из приближенной оценки отношения интегральных интенсивностей полос, соответствующих колебанию  $\nu_{ba}$ , которое оказалось равным 1:2. Относительная концентрация димеров рассчитывалась исходя из отношения вычисленных констант равновесия. Моделирование ИК-спектра осуществлялось путем сложения контуров индивидуальных полос. Форма контура описывалась функцией Лоренца, нормированной на интегральную интенсивность полосы. Полуширины для всех полос полагались равными  $0.5\text{ см}^{-1}$ .

### Результаты и их обсуждение

#### Структура и термодинамика

Молекула пиридина принадлежит к группе симметрии  $C_{2v}$  и имеет три неэквивалентных положения протона. Таким образом, возможно образование пяти различных водородосвязанных парных самоассоциатов, трех в плоской конфигурации и двух в неплоской, когда пиридиновые кольца имеют угол между собой относительно оси, проходящей через водородную связь. Пространственное строение водородосвязанных димеров (циклического димера Д1) и четырех типов односвязных димеров (Д2, Д2(X), Д3, Д3(X)) показано на рис. 1.

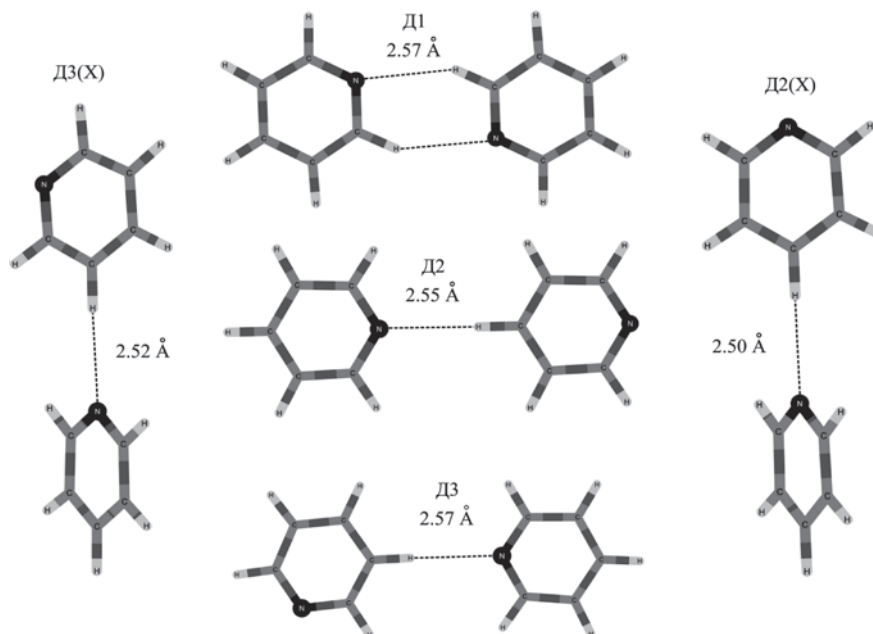


Рис. 1. Пространственное строение водородосвязанных димеров пиридина: Д1 (группа симметрии  $D_{2h}$ ), Д2 (группа симметрии  $C_{2v}$ ), Д3 (группа симметрии  $C_s$ ), Д2(X) и Д3(X) (группа симметрии  $C_1$ ), рассчитанные методом B3LYP/6-311+G(d, p). Цифрами на рисунке указаны значения длин водородных связей



Изменения в структуре донорной и акцепторной молекулы пиридина для этих димеров сосредоточены в области С-Н и СN связей, атомы которых участвуют в образовании водородных связей. Изменение длин этих связей незначительное и не превышает по величине 0.005 ангстрем. Изменение внутренних валентных углов пиридинового кольца также небольшие и не превышает 0.5 градусов, аналогичные по величине изменения претерпевают

и внешние углы при С-Н связях. Длины водородных связей лежат в пределах от 2.5 ангстрем для димера Д2(Х) до 2.57 ангстрем для циклического димера Д1. Как видно из табл.1, температурная энтальпия образования водородосвязанных димеров пиридина находится в интервале от  $-2.88$  до  $-0.48$  кДж/моль. Такие значения длин водородных связей и величины энтальпии характеризуют водородную связь как слабую.

Таблица 1

**Термодинамические характеристики (кДж/моль) образования парной ассоциации пиридина, рассчитанные методом B3LYP/6-311+G(d,p) для водородосвязанных димеров и методом B3LYP/6-311+G(d,p) для ван-дер-ваальсовых при  $T = 298.15$  К**

Комплекс	$\Delta E$	$\Delta ZPE$	$BSSE$	$\Delta H_0$	$\Delta H_{298}$	$T\Delta S$	$\Delta G_{298}$	$K_{298} \times 10^3$
Д1	-9.59	2.36	1.00	-6.23	-2.88	-30.23	27.35	0.016
Д2	-7.30	1.71	0.93	-4.66	-0.89	-23.85	22.96	0.095
Д2(Х)	-8.51	1.55	0.84	-6.12	-2.24	-20.43	18.19	0.650
Д3(Х)	-7.82	1.47	0.81	-5.54	-1.64	-18.26	16.63	1.222
Д3	-6.70	1.48	0.82	-4.40	-0.48	-16.88	16.41	1.334

Наибольшие значения констант равновесия были получены для низкосимметричных односвязанных димеров. Как видно из табл. 1, изменения констант равновесия при переходе от комплекса к комплексу обусловлены в основном изменением энтропийного вклада.

### Колебательный спектр

Экспериментальный и теоретический ИК-спектр пиридина и его изотопомера  $D_5$  в различных частотных областях показан на рис. 2. Результаты моделирования в подавляющем большинстве случаев хорошо согласуются с экспериментом, что позволило интерпретировать 15 из 19 экспериментально наблюдаемых колебательных полос сателлитов.

Отнесение и интерпретация экспериментально наблюдаемых полос в этих частотных областях представлены в табл. 2. Видно, что часто в образование одной колебательной полосы вносят свой вклад в колебания, принадлежащие различным типам димеров, поэтому значения  $\nu_{\text{выч}}$ , приведенные в табл. 2, соответствуют не вычисленным значениям волновых чисел, а положению максимумов полос в теоретическом спектре.

Из данных, приведенных в табл. 2, видно, что рассчитанные значения частотных сдви-

гов хорошо согласуются с экспериментально наблюдаемыми как по знаку, так и по величине. Исходя из этого, а также опираясь на результаты проведенного нами моделирования ИК-спектра поглощения пиридина с учетом образования водородосвязанных димеров, можно заключить, что выбранные нами молекулярные модели являются адекватными для детального описания большинства особенностей низкотемпературного ИК-спектра пиридина в азотной матрице.

Наблюдаемые в ИК-спектре пиридина- $H_5$  полосы  $\nu_{\text{экср}} = 706 \text{ см}^{-1}$  и  $702.2 \text{ см}^{-1}$ , а также полосы  $\nu_{\text{экср}} = 530.5 \text{ см}^{-1}$  и  $527.6 \text{ см}^{-1}$ , наблюдаемые в спектре дейтерированного пиридина, нам не удалось интерпретировать на основании рассмотренных моделей. Данное обстоятельство позволяет сделать предположение, что эти полосы образованы колебаниями ван-дер-ваальсовых димеров пиридина. В дальнейшем авторы статьи предполагают рассмотреть димеры такого типа, рассчитав их спектральные и термодинамические характеристики в рамках теоретического метода WB97XD, который специально адаптирован для такого типа молекулярных систем.

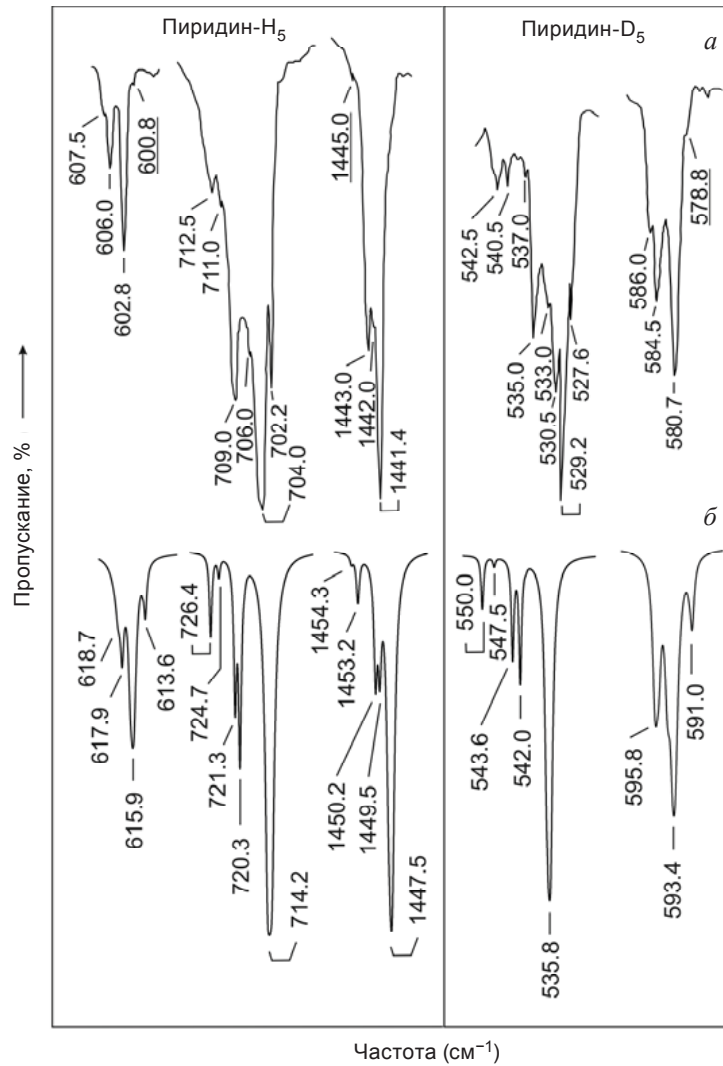


Рис. 2. Экспериментальные ИК-полосы поглощения пиридина –H<sub>5</sub> и –D<sub>5</sub>, зарегистрированные в азотной матрице при температуре ~5 К для молекулярного соотношения пиридин/азот – 1/1500 (а) и теоретические, построенные с учетом образования трех водородосвязанных самоассоциатов (б)

Таблица 2

**Отнесение и интерпретация ряда экспериментально наблюдаемых полос в матрично-изолированном ИК-спектре пиридина –H<sub>5</sub> и пиридина –D<sub>5</sub> при T = 5 К, для молекулярного соотношения пиридин/азот – 1/1500**

Пиридин H <sub>5</sub>				Пиридин D <sub>5</sub>				Интерпретация
$\nu_{\text{эксп}}$ [41]	$\nu_{\text{выч}}$	$\Delta\nu_{\text{эксп}}$ [41]	$\Delta\nu_{\text{выч}}$	$\nu_{\text{эксп}}$ [41]	$\nu_{\text{выч}}$	$\Delta\nu_{\text{эксп}}$ [41]	$\Delta\nu_{\text{выч}}$	
1445.0	1453.2	+3.6	+5.7	–	–	–	–	19b (B <sub>2</sub> ) Д2Х Д2
1443.0	1450.2	+1.6	+2.7	–	–	–	–	19b (A') ДЗ ДЗХ
1442.0	1449.5	+0.6	+2.0	–	–	–	–	19b ДЗ, ДЗХ Д1
1441.4	1447.5	0.0	0.0	–	–	–	–	19b (B <sub>2</sub> ) Пир.
712.5	726.4	+8.5	+12.2	540.5	547.5	+11	+11.7	4 (B <sub>1</sub> ) Д2Х Д2
711.0	721.3	+7.0	+7.1	537.0	543.6	+7.5	+7.8	–ДЗХ



Окончание табл. 2

Пиридин H <sub>5</sub>				Пиридин D <sub>5</sub>				Интерпретация
$\nu_{\text{эксп}}$ [41]	$\nu_{\text{выч}}$	$\Delta\nu_{\text{эксп}}$ [41]	$\Delta\nu_{\text{выч}}$	$\nu_{\text{эксп}}$ [41]	$\nu_{\text{выч}}$	$\Delta\nu_{\text{эксп}}$ [41]	$\Delta\nu_{\text{выч}}$	
709.0	720.3	+5.0	+6.1	535.0	542.0	+5.5	+5.2	4 (A <sub>g</sub> )ДЗ Д1
706.0	–	+2.0	–	530.5	–	+1.0	–	–
704.0	714.2	0.0	0.0	529.5	535.8	0.0	0.0	4 (B <sub>1</sub> ) Пир.
702.2	–	–1.6	–	527.6	–	–1.9	–	–
607.5	618.7	+4.7	+2.8	586.0	–	–	–	6а Д2Х
606.0	617.9	+3.2	+2.0	584.5	595.4	–	–	6аДЗ, ДЗХ, Д2Х
602.8	615.9	0.0	0.0	580.7	593.4	0.0	0.0	6а Пир.
600.8	613.6	–2.0	–2.3	578.8	591.4	–	–	6а ДЗ, Д2Х, ДЗХ

### Выводы

Методом функционала плотности с использованием обменного функционала Бекке и корреляционного функционала Ли–Янга–Парра (B3LYP) с базисным набором 6-311+G(d, p) выполнен расчет структуры, частот нормальных колебаний и интенсивностей полос в ИК-спектрах пяти димеров пиридина. Установлены структуры димеров с водородной связью. Проведен анализ изменения структуры, частот фундаментальных колебаний и абсолютных ИК-интенсивностей пиридина при образовании димеров с водородной связью. Выполнено моделирование ряда сложных колебательных контуров в ИК-спектре пиридина с учетом межмолекулярного взаимодействия. Показано, что большой вклад в формирование полос спутников, усложняющих структуру колебательных полос мономерного пиридина в матрично-изолированном низкотемпературном ИК-спектре, вносят водородосвязанные парные самоассоциаты. Предложена детальная интерпретация низкотемпературного матрично-изолированного ИК-спектра поглощения пиридина H<sub>5</sub> и D<sub>5</sub> в ряде частотных областей. Вычислены термодинамические характеристики образования комплексов в рамках теоретического метода B3LYP/6-311+G(d, p) с учетом базисной суперпозиционной ошибки (BSSE).

### Список литературы

1. Klaboe P., Nielsen C. J. Recent advances in infrared matrix isolation spectroscopy // *Analyst* (Cambridge, United Kingdom). 1992. Vol. 117, № 3. P. 335–341.
2. Пиментел Дж. Колебательная спектроскопия / под ред. А. Барнса и У. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1981. 480 с.
3. Барри Ф. М., Тохадзе К. Г. Водородная связь / под ред. Н. Д. Соколова. М.: Наука, 1981. 286 с.
4. Bürger H., Schneider W., Sommer S., Thiel W., Willner H. Generation of gold ions in the solid state or in fluorosulfuric acid solution and their identification by ESR // *J. Chem. Phys.* 1991. Vol. 95, № 8. P. 5660-9.
5. Shepherd R. A., Graham W. R. M. Formation and Identification of Interstellar Molecule Linear C<sub>5</sub>H from Photolysis of Methane Dispersed in Solid Neon // *J. Chem. Phys.* 1987. Vol. 86. P. 2600–2605.
6. Goodman M. A., Sweany R. L., Flurry R. L. Jr. Infrared spectra of matrix-isolated, crystalline solid, and gas phase C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub> n-alkanes // *J. Phys. Chem.* 1983. Vol. 87, № 10. P. 1753–1757.
7. Engdahl A., Nelander B. Infrared spectrum of cis-glyoxal // *Chem. Phys. Lett.* 1988. Vol. 148, № 2–3. P. 264–275.
8. Шапетько Н. Н., Базов В. П. Проявление туннельных эффектов в инфракрасных спектрах ацетилацетона в матричной изоляции при 14 К // *Журн. физ. химии.* 1989. Т. 63, № 10. С. 2832–2835.
9. Destexhe A., Smets J., Adamowicz L., Maes G. Matrix-Isolation FT-IR Studies and AbInitio Calculations of Hydrogen-Bonded. Complexes of Molecules Modeling Cytosine // *J. Phys. Chem.* 1994. Vol. 98, № 5. P. 1506–1514.
10. Szczesniak M., Nowak M. J., Szczepaniak K., Chin S., Scott I., Person W. B. Matrix isolation studies of nucleic acid constituents-III. 1-Methyluracil, 3-methyluracil and 1,3-dimethyluracil monomers // *Spectrochim. Acta. A.* 1985. Vol. 41, № 1–2. P. 233–236.
11. Степаньян С. Г., Шеина Г. Г., Радченко Е. Д., Благой Ю. П. Инфракрасные спектры и таутомерия изоцитозина в аргонной матрице // *Журн. физ. химии.* 1989. Т. 63, № 11. С. 3008–3014.



12. Nowak M. J., Lapinski L., Kwiatkowski J. S., Leszczyński J. Molecular Structure and Infrared Spectra of Adenine. Experimental Matrix Isolation and Density Functional Theory Study of Adenine (<sup>15</sup>N) Isotopomers // *J. Phys. Chem.* 1996. Vol. 100, № 9. P. 3527–3534.
13. Stepanian S. G., Reva I. D., Radchenko E. D., Adamowicz L. Conformational Behavior of Alanine. Matrix-Isolation Infrared and Theoretical DFT and ab Initio Study // *J. Phys. Chem. A.* 1998. Vol. 102, № 24. P. 4623–4629.
14. Ivanov A. Yu., Sheina G., Blagoi Yu. P. FTIR spectroscopic study of the UV-induced rotamerization of glycine in the low temperature matrices (Kr, Ar, Ne) // *Spectrochim. Acta. A.* 1999. Vol. 55, № 1. P. 219–228.
15. Kincaid J. R., Urban M. W., Watanabe T., Nakamoto K. Infrared Spectra of Matrix-Isolated Metal Complexes of Octaethylporphine // *J. Phys. Chem.* 1983. Vol. 87, № 16. P. 3096–3101.
16. Radziszewski J. G., Nepraš M., Balaji V., Waluk J., Vogel E., Michl J. Polarized Infrared Spectra of Photooriented Matrix-Isolated Free-Base Porphyrin Isotopomers // *J. Phys. Chem.* 1995. Vol. 99. P. 14254–14260.
17. Молекулярные взаимодействия / под ред. Г. Ратайчика, У. Орвилла-Томаса : в 2 т. М. : Мир, 1984. Т. 2. 600 с.
18. Fujimoto N., Toyama A., Takeuchi H. Effect of hydrogen bonding on the UV resonance Raman bands of the adenine ring and its C8-deuterated analog // *J. Mol. Struct.* 1998. Vol. 447, № 1–2. P. 61–69.
19. Efremov R. G., Feofanov A. N., Dzhandzhugazyan K. N., Modyanov N. N., Nabiev I. R. Study of ATP binding in the active site of Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup> ATPase as probed by ultraviolet resonance Raman Spectroscopy // *FEBS Lett.* 1990. Vol. 260, № 2. P. 257–260.
20. Taddei G., Castellucci E., Verderame F. D. Pair Association in Matrix Isolated Pyridine // *J. Chem. Phys.* 1970. Vol. 53, № 6. P. 2407–2411.
21. Moller C., Plesset M. S. Note on an approximation treatment for many – electron system // *Phys. Rev.* 1934. Vol. 46, № 7. P. 618–622.
22. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // *УФН.* 2002. Т. 172, № 3. С. 336–348.
23. Krishnan R., Schlegel H. B., Pople J. A. Self-consistent orbital methods. XX. A basis set for correlated wave functions // *J. Chem. Phys.* 1980. Vol. 72, № 1. P. 650–654.
24. Pople J. A., Head-Gordon M., Raghavachari K. Quadratic configuration interaction. A general technique for determining electron correlation energies // *J. Chem. Phys.* 1987. Vol. 87, № 10. P. 5968–5975.
25. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // *J. Chem. Phys.* 1993. Vol. 98, № 7. P. 5648–5652.
26. Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle-Solvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // *Phys. Rev.* 1988. Vol. 37B, № 2. P. 785–789.
27. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 98 / Gaussian Inc. Pittsburgh, PA, 1998.
28. Yoshida H., Ehara A., Matsuura H. Density functional vibrational analysis using wavenumber-linear scale factors // *Chem. Phys. Lett.* 2000. Vol. 325, № 4. P. 477–483.
29. Portmann S., Fluekiger P.F. URL: <http://www.cscs.ch/molekel/>
30. Березин К. В., Березин В. И., Курносов Н. А., Березин М. К. Учет межмолекулярного взаимодействия в рамках современных квантовомеханических методов расчета структуры и колебательных спектров многоатомных молекул // *Проблемы оптической физики и биофотоники : материалы 12-й Международной молодежной науч. школы по оптике, лазерной физике и биофотонике.* Саратов : Новый ветер, 2009. С. 181–188.