



2. Kell A. J., Donkers R. L., Workentin M. Core Size Effects on the Reactivity of Organic Substrates as Monolayers on Gold Nanoparticles // *Langmuir*. 2005. Vol. 21, № 2. P. 735.
3. Connor E. E., Mwamuka J., Gole A., Murphy C. J., Wyatt M. D. Gold nanoparticles are taken up by human cells but do not cause acute cytotoxicity // *Small*. 2005. Vol. 1, № 1. P. 325 – 327.
4. Goodman C. M., McCusker C. D., Yilmaz T., Rotello V. M. Toxicity of gold nanoparticles functionalized with cationic and anionic side chains // *Bioconjug Chem*. 2004. Vol. 15, № 4. P. 897–900.
5. Moghimi S. M., Hunter A. C., Murray J. C. Nanomedicine : current status and future prospects // *FASEB J*. 2005. Vol. 19. P. 311–330.
6. Brayden D. J. Controlled release technologies for drug delivery // *Drug Discov Today*. 2003. Vol. 8, № 21. P. 976–978.
7. Seaton A. Nanotechnology and the occupational physician : introduction // *Occupational Medicine*. 2006. Vol. 56. P. 312–316.
8. Lam C. W., James J. T., McCluskey R., Hunter R. L. Pulmonary Toxicity of Single-Wall Carbon Nanotubes in Mice 7 and 90 Days after Intratracheal Instillation // *Toxicol Sci*. 2003. Vol. 77, № 1. P. 126–134.

УДК 539.193/194;535/33.34

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

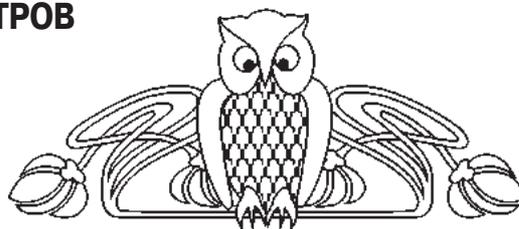
П. М. Элькин, И. М. Уманский<sup>1</sup>, Е. А. Джалмухамбетова<sup>2</sup>

Саратовский государственный технический университет

E-mail: pashaelkin@yandex.ru

<sup>1</sup>Саратовский государственный социально-экономический университет

<sup>2</sup>Астраханский государственный университет



На основании модельных неэмпирических квантовых расчетов геометрической и электронной структуры ряда изомеров замещенных бензойной кислоты исследованы закономерности в поведении параметров адиабатического потенциала карбоксильного фрагмента.

**Ключевые слова:** бензойная кислота, адиабатический потенциал, межмолекулярное взаимодействие, колебательные спектры.

### Modelling Calculations of Vibrational Spectra for Substituted Benzoic Acid

P. M. Elkin, I. M. Umansky, E. A. Djalmuhambetova

On the base of modeling calculations of geometric and electronic structure for substituted benzoic acid the parameters of adiabatic potential are investigated.

**Key words:** vibrational spectra, benzoic acid, adiabatic potential, intermolecular interaction.

### Введение

Производные бензойной кислоты известны как надежные индикаторы загрязнения окружающей среды отходами нефтепродуктов, ингредиенты при производстве пестицидов, фармакологических препаратов, красителей текстильных производств [1, 2].

Исследование структуры и спектров указанных представителей ароматических бензойных

кислот является одним из этапов изучения физико-химических свойств лигандов (бензойной и салициловой кислот) с металлами. Теоретической основой таких исследований стали неэмпирические методы квантовой механики молекулярных систем.

Замещенные бензойной кислоты, как и остальные представители класса карбоновых кислот, легко образуют димеры с сильными водородными связями. Межмолекулярное взаимодействие между мономерами проявляется в высокочастотном (2500–3500 см<sup>-1</sup>) диапазоне спектра. Спектр димеров в этой области имеет сложную структуру. Предлагаемая в периодической литературе теоретическая интерпретация полос противоречива. Достаточно сослаться на публикации [3–7]. Если следовать представленным в них результатам, то свойство характеристичности полос фундаментальных колебаний, имеющее место для карбоксильного фрагмента (КФ) в мономерах карбоновых кислот, кардинально нарушается при образовании димеров соединений. Отметим, что в указанный высокочастотный диапазон попадают полосы, связанные с валентными колебаниями связей СН бензольного остова и связей ОН КФ, обертоны деформационных колебаний указанных связей.



При интерпретации колебательных спектров замещенных бензойной кислоты для корректировки результатов модельных расчетов в гармоническом приближении теории молекулярных колебаний принято использовать процедуру масштабирования гармонического силового поля и частот [8]. Однако, как показано в работах [9,10], полученные при таком подходе результаты (для диапазона 2500–3500 см<sup>-1</sup>) существенно расходятся с данными, полученными при решении задачи в ангармоническом приближении. В публикациях [9,10] указаны причины такого расхождения и предложена методика оценки ангармонического сдвига полос. Методика апробирована на известных представителях класса карбоновых кислот [11,12], в числе которых бензойная и изоникотиновая кислоты.

Цель данной публикации – оценка параметров адиабатического потенциала КФ для орто-, мета-, параизомеров [13] в различных замещенных бензойной кислоты, моделирование их колебательных спектров.

### Математическая модель ангармонического сдвига колебательных состояний

Для описания колебательных состояний воспользуемся известным соотношением

$$E^n = \nu_s(n_s + 1/2) + \chi_{sr}(n_s + 1/2)(n_r + 1/2) \quad (1)$$

как решением модельного уравнения для описания молекулярных колебаний в рамках адиабатической теории возмущения [14]:

$$2H = \nu_s(P_s^2 + (Q^s)^2)/2 + \mu^{1/4} P_\alpha \mu^{-1/2} P_\beta \mu^{1/4} + 1/3 F_{rst} Q^r Q^s Q^t + 1/12 F_{rstu} Q^r Q^s Q^t Q^u. \quad (2)$$

Выражения для ангармонических констант  $\chi_{sr}$  предложены в публикациях [9,10]

$$\chi_{ss} = 1/16 F_{ssss} - 5/48 (F_{sss})^2 / \nu_s + 1/32 (F_{ssr})^2 (1/(2\nu_s - \nu_r) - 1/(2\nu_s + \nu_r) - 4/\nu_r) (1 - \delta_{sr}), \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \chi_{sr} = & 1/16 F_{ssr} - 1/8 (F_{ssr})^2 (1/(2\nu_s - \nu_r) + \\ & + 1/(2\nu_s + \nu_r)) (1 - \delta_{sr}) + 3/8 (F_{srt})^2 (1/(\nu_s + \nu_r + \nu_t) + \\ & + 1/(\nu_t - \nu_r - \nu_s) + 1/(\nu_s + \nu_t - \nu_r) + \\ & + 1/(\nu_t + \nu_r - \nu_s)) (1 - \delta_{sr})(1 - \delta_{st})(1 - \delta_{rt}) + \\ & + L(a; sr)^2 / (1/(\nu_s + \nu_r) + 1/(\nu_s - \nu_r)) / 2. \quad (4) \end{aligned}$$

В соотношениях (1)–(4)  $\nu_s$  – частоты гармонических колебаний, см<sup>-1</sup>,  $n_s$  – квантовые числа рассматриваемого колебательного состояния;  $P_\alpha = L(\alpha; sr) Q^s P_r$ ;  $L(\alpha; sr)$  – постоянные Кориолиса;  $Q^s$  – безразмерные нормальные колебательные координаты, линейно связанные с декартовыми

смещениями атомов;  $F_{srt}$  и  $F_{srtu}$  – кубические и квартичные силовые постоянные (параметры адиабатического потенциала молекулы).

Использование соотношений (3) и (4) предполагает наличие данных по ангармоническим (кубическим  $F_{rst}$  и квартичным  $F_{ssrr}$ ) силовым постоянным. Получить такие данные в рамках метода функционала плотности позволяет известная компьютерная технология «Gaussian» [15], возможности которой для построения структурно-динамических моделей кислородосодержащих соединений исследованы, к примеру, в публикации [16].

### Обсуждение результатов модельных расчетов колебательных состояний

Набор фундаментальных колебаний монозамещенных бензойной кислоты (C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>COOHX) можно разделить на две части. Первая часть относится к колебаниям бензольного остова (C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>). Полученные результаты полностью согласуются с выводами монографии [13] относительно свойств характеристичности колебаний пара-, мета- и ортозамещенных бензола. Как показано в работе [17], выбор базиса квантового расчета влияет на предсказательные значения вычисленных в гармоническом приближении частот валентных и крутильных колебаний связи ОН КФ. Предпочтение здесь следует отдать базисам 6-311G\*\*, 311+G\*\*, 311+G\*\* [15], использование которых позволяет достичь лучшего согласия модельных расчетов с имеющимися экспериментальными данными. Учет диффузионных параметров базиса (+,++) сдвигает лишь частоту крутильного колебания связи ОН в низкочастотную область спектра на величину ~ 30 см<sup>-1</sup>. Качественная оценка интенсивностей полос в спектрах ИК и КР сохраняется.

Результаты моделирования колебательных состояний КФ для хлор-, циано-, гидроксид- и карбоксизамещенных бензойной кислоты (базис 6-311+G\*\*) представлены в табл. 1–6.

Характеристичным по частоте, форме колебаний и интенсивности в спектрах ИК и КР является валентное колебание связи ОН (Q<sub>ОН</sub>), для которого практически отсутствует дублетное расщепление в дикарбоксибензолах. Характеристичным по частоте и интенсивности следует признать и колебание связи С=О (Q<sub>С=О</sub>). Для остальных колебаний положение полос и их интенсивность зависят (в разной степени) от взаимного расположения заместителя и КФ.

В паразамещенных бензойной кислоты влияние заместителя сказывается на положении полос,



интерпретированных как деформационное колебание валентного угла  $\text{COC}$  ( $\nu_{\text{COC}}$ ) карбоксильного фрагмента (диапазон значений  $600\text{--}720\text{ см}^{-1}$ ). Значительно различаются оценки интенсивностей полос в ИК спектре. Остальные колебания можно считать характеристическими по частоте. Такой характер поведения фундаментальных частот по

сравнению с бензойной кислотой ( $X=\text{H}$ ) связан с пространственной удаленностью заместителя от КФ ( $>7\text{ \AA}$ ). Интенсивность полос определяется электронным строением заместителя. Идентификация изомеров гидрокси- ( $\text{OH}$ ) и карбокси- ( $\text{COOH}$ ) паразамененных бензойной кислоты затруднена (табл. 1).

Таблица 1

**Интерпретация колебаний карбоксильного фрагмента паразамененных бензойной кислоты ( $\text{C}_6\text{H}_4\text{COOH}_X$ )**

X=	$\nu_{\text{эксп}}$	$\nu_{\Gamma}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{эксп}}$	$\nu_{\Gamma}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
	$Q_{\text{OH}}$					$\beta_{\text{OH}}, Q_{\text{CO}}$				
Cl	3581	3771	3571	111	146	1358	1365	1345	136	24
CN	–	3769	3580	107	174	1334	1378	1336	129	20
OH_1	3570	3774	3584	91	152	1325	1370	1328	127	11
OH_2	3570	3774	3584	92	152	–	1380	1338	147	18
COOH_1	–	3768	3579	224	322	–	1365	1324	243	35
COOH_2	–	3770	3580	224	323	–	1364	1324	240	32
X=	$Q_{\text{C=O}}$					$Q_{\text{CO}}, \beta_{\text{OH}}$				
Cl	1698	1786	1753	418	147	1095	1102	1075	222	12
CN	1710	1808	1747	331	93	–	1110	1079	133	2.8
OH_1	1775	1797	1737	357	88	–	1100	1070	132	1.1
OH_2	–	1796	1735	355	83	–	1106	1075	192	2.1
COOH_1	–	1789	1727	800	260	–	1104	1073	359	12
COOH_2	–	1790	1730	774	264	–	1103	1072	336	7.2
X=	$\gamma_{\text{COC}}$					$\rho_{\text{OH}}$				
Cl	–	677	668	14	0.7	549	577	571	59	3.1
CN	691	705	687	41	1.3	588	605	591	28	3.2
OH_1	630	603	589	58	0.5	560	591	577	49	6.9
OH_2	–	602	588	62	0.4	–	572	578	48	7.1
COOH_1	–	720	701	102	0	–	591	577	134	00
	–	646	630	0	7.5	–	570	557	0	5.5
COOH_2	–	719	701	92	1.6	–	589	575	134	0.2
	–	646	630	0.7	8.6	–	570	557	0	5.4

Примечание. Частоты колебаний приведены в  $\text{см}^{-1}$ , интенсивности в спектрах ИК – в  $\text{км/моль}$ , в спектрах КР – в  $\text{\AA}^4/\text{а.е.м.}$

В метазамененных бензойной кислоты возможны два изомера для заместителей  $X=\text{Cl}$ ,  $\text{CN}$  (табл. 2), четыре изомера, если  $X=\text{OH}$  (табл. 3), три изомера для  $X=\text{COOH}$  (табл. 4).

Согласно данным, приведенным в табл. 2, для таких заместителей, как  $\text{Cl}$  и  $\text{CN}$ , спектральная идентификация изомеров в пара- и ортоположениях затруднена, что связано опять же с удаленностью атомов заместителя  $X$  от атомов карбоксильного фрагмента ( $>5\text{ \AA}$  для метазаменения и  $3.9\text{ \AA}$  для паразаменения).

Затруднена спектральная идентификация изомеров метагидроксизамещенной бензойной кислоты (см. табл. 3). Частотный сдвиг, согласно модельным расчетам, не превышает величины  $\sim 20\text{ см}^{-1}$ , качественная оценка интенсивностей сохраняется. Расстояние между атомом водорода гидроксильного фрагмента и атомами кислорода карбоксильного фрагмента превышает величину в  $4.7\text{ \AA}$ .

Для изомеров метадикарбоксибензола (см. табл. 4) имеет место дублетное расщепление по-



Таблица 2

**Интерпретация колебаний карбоксильного фрагмента мета- и ортозамещенных бензойной кислоты (C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>COOH\_X. X=Cl, CN)**

Форма колебаний	X=	Метазамещение						Ортозамещение					
		ν <sub>Г</sub>	ν <sub>анг</sub>	Изомер 1		Изомер 2		ν <sub>Г</sub>	ν <sub>анг</sub>	Изомер 1		Изомер 2	
				ИК	КР	ИК	КР			ИК	КР	ИК	КР
Q <sub>OH</sub>	Cl	3742	3556	64	166	65	175	3725	3539	55	164	65	152
	CN	3770	3581	103	157	104	167	3766	3577	104	144	104	147
Q <sub>C=O</sub>	Cl	1808	1747	333	57	310	55	1788	1728	344	41	298	52
	CN	1810	1749	333	54	296	54	1799	1768	316	51	254	45
β <sub>OH</sub> , Q <sub>CO</sub>	Cl	1383	1341	105	8.8	89	7.6	1396	1353	87	10	57	6.5
	CN	1381	1339	128	16	95	14	1381	1340	124	13	95	9.9
Q <sub>CO</sub> , β <sub>OH</sub>	Cl	1096	1066	98	1.7	19	7.2	1126	1095	96	0.5	68	2.9
	CN	1098	1088	99	1.2	52	2.8	1137	1105	119	1.3	85	0.9
γ <sub>OCO</sub>	Cl	647	631	41.8	0.1	46	2.4	642	627	41	3.4	45	0.2
	CN	652	636	42	0.2	52	2.4	642	627	39	2.7	40	0.2
ρ <sub>OH</sub>	Cl	627	612	104	6.1	108	5.5	631	616	57	6.7	76	7.4
	CN	623	608	91	6.4	89	7.8	595	581	72	5.1	57	4.2

Таблица 3

**Интерпретация колебаний карбоксильного фрагмента метагидроксизамещенной бензойной кислоты**

Форма колебаний	Изомер 1			Изомер 2			Изомер 3			Изомер 4		
	ν <sub>анг</sub>	ИК	КР									
q <sub>OHg</sub>	3638	63	123	3636	59	101	3635	61	99	3637	63	122
Q <sub>OH</sub>	3583	88	154	3582	88	151	3581	90	153	3581	88	155
Q <sub>C=O</sub>	1742	308	57	1743	318	59	1738	316	59	1743	314	56
β <sub>COH</sub> , Q <sub>CO</sub>	1337	131	16	1336	123	19	1340	109	14	1335	172	13
Q, β, β <sub>OH</sub>	1321	21	0.6	1324	28	2.1	1325	38	1.8	1321	14	0.5
q <sub>CO</sub> , β <sub>OH</sub>	1251	51	17	1253	69	17	1249	83	14	1250	36	15
Q <sub>CO</sub> , β	1058	87	1.1	1054	84	1.2	1084	99	0.7	1075	44	0.9
β <sub>OCO</sub> , γ	633	44	0.1	634	42	0.2	629	45	2.6	628	48	2.2
χ <sub>OH</sub>	597	96	5.4	596	89	5.5	601	87	5.2	601	96	5.2
χ <sub>OHg</sub>	326	108	3.1	349	109	2.5	356	112	2.5	326	107	3.1

Таблица 4

**Интерпретация колебаний карбоксильного фрагмента метадикарбоксибензола**

Форма колебаний	Тип сим	Изомер 1			Тип сим	Изомер 2			Изомер 3		
		ν <sub>анг</sub>	ИК	КР		ν <sub>анг</sub>	ИК	КР	ν <sub>анг</sub>	ИК	КР
q <sub>OH</sub>	A'	3580	88	171	A1	3581	22	282	3582	83	190
q <sub>OH</sub>	A'	3580	128	127	B2	3581	193	22	3582	132	99
Q <sub>C=O</sub>	A'	1730	343	98	A1	1739	697	124	1732	119	174
Q <sub>C=O</sub>	A'	1727	434	83	B2	1728	16	49	1725	712	12
β <sub>COH</sub> , Q <sub>CO</sub>	A'	1334	67	24	A1	1327	3.4	24	1339	199	24
β <sub>COH</sub> , Q <sub>CO</sub>	A'	1315	78	5.1	B2	1318	86	1.5	1317	61	0.1
Q <sub>CO</sub> , β <sub>COH</sub>	A'	1092	112	0.4	A1	1089	0.1	1.6	1107	125	0.5
Q <sub>CO</sub> , β <sub>COH</sub>	A'	1063	131	1.2	A1	1077	46	1.5	1059	232	1.1
γ <sub>OCO</sub>	A'	629	51	0.6	A1	626	1.5	4.6	630	42	1.1
γ <sub>OCO</sub>	A'	626	71	2.7	B2	627	132	0.6	629	57	0.1
ρ <sub>OH</sub> , ρ <sub>CO</sub>	A''	729	154	0.1	B1	728	152	0.1	730	154	0.2
ρ <sub>OH</sub>	A''	577	0.7	3.3	A2	579	0	4.1	576	0	2.6
ρ <sub>OH</sub>	A''	555	164	1.1	B1	552	170	0.5	555	160	1.8



лосы, интерпретируемой как деформационное колебание валентного угла  $\beta_{\text{COH}}$  КФ ( $\sim 20 \text{ см}^{-1}$ ). Существенно различаются значения интенсивностей в ИК спектре изомеров для этой полосы. Возможна идентификация изомера по интенсивности полосы, интерпретированной как валентное колебание связи  $\text{C}=\text{O}$ .

Изомеры ортогидроксизамещенной бензойной кислоты (табл. 5) можно идентифицировать как по положению полос ( $\Delta \sim 50 \text{ см}^{-1}$ ), интерпретированных как деформационное колебание валентного угла  $\beta_{\text{COH}}$  и валентное колебание связи  $\text{CO}$  КФ, так и по интенсивностям в спектрах ИК

и КР. Изомеры 2 и 3 легко идентифицируются по полосе, интерпретируемой как валентное колебание связи  $\text{OH}$  гидроксильного фрагмента ( $\nu_{\text{OHg}}$ ). Сдвиг этой полосы в низкочастотную область на величину  $\sim 120 \text{ см}^{-1}$  для изомера 2 и  $\sim 300 \text{ см}^{-1}$  для изомера 3 связан с наличием внутримолекулярного взаимодействия между атомом кислорода связей  $\text{C}=\text{O}$  и  $\text{CO}$  соответственно карбоксильной группы и атомом водорода гидроксильного фрагмента ( $R_{\text{OH}} \sim 1.75 \text{ \AA}$ ). Есть основание полагать, что механизмом такого взаимодействия является внутримолекулярная водородная связь.

Таблица 5

Интерпретация колебаний карбоксильного фрагмента ортогидроксизамещенной бензойной кислоты

Форма колебаний	Изомер 1			Изомер 2			Изомер 3			Изомер 4		
	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР									
$\nu_{\text{OHg}}$	3627	61	114	3507	286	91	3188	306	65	3623	58	123
$\nu_{\text{OH}}$	3569	76	158	3581	76	142	3570	106	144	3588	85	148
$\nu_{\text{C=O}}$	1721	356	44	1750	391	61	1683	392	57	1749	362	61
$\beta_{\text{COH}}$	1341	85	7.5	1371	44	5.4	1393	169	16	1331	89	4.1
$\beta, \beta_{\text{COH}}$	1324	49	2.1	1315	41	8.9	1358	76	6.7	1319	35	4.9
$\nu_{\text{CO}} \cdot \nu$	1246	47	9.9	1240	125	3.2	1267	61	2.1	1260	22	6.6
$\nu_{\text{CO}}$	1102	182	1.4	1054	97	8.6	1064	59	1.3	1114	97	0.1
$\beta_{\text{OCO}} \cdot \gamma$	627	45	2.7	622	41	2.3	639	52	0.4	631	44	0.1
$\chi_{\text{CO}} \cdot \chi$	586	64	6.5	547	152	5.7	573	81	6.4	572	82	7.0

Представляются интересными результаты моделирования адиабатического потенциала ортодикарбоксибензола (табл. 6). Крутильные низкочастотные колебания карбоксильных фрагментов воспроизводятся лишь для исходной неплоской конфигурации соединения (угол между плоскостями карбоксильных фрагментов  $\sim 53^\circ$ , угол между карбоксильным фрагментом и пло-

скостью бензольного кольца  $\sim 38^\circ$ ). Оптимизация геометрии указывает на наличие одного изомера симметрии  $\text{C}_2$ . Дублетное расщепление существенно лишь для полосы, интерпретированной как валентное колебание связи  $\text{CO}$ . Для диапазона ниже  $1700 \text{ см}^{-1}$  в спектре ИК наиболее интенсивны антисимметричные колебания, в спектре КР – симметричные.

Таблица 6

Интерпретация колебательных состояний ортодикарбоксибензола

Форма колебаний	$\nu_{\text{эксп}}$ [18]	$\nu_{\Gamma}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{эксп}}$ [18]	$\nu_{\Gamma}$	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
	Тип симметрии А					Тип симметрии В				
$\nu_{\text{OH}}$	3570	3761	3573	98	198	–	3761	3572	88	110
$\nu_{\text{C=O}}$	1760	1814	1753	358	68	–	1794	1734	310	28
$\beta_{\text{COH}}$	1325	1363	1322	69	11	1306	1359	1318	126	3.1
$\nu_{\text{CO}} \cdot \beta_{\text{COH}}$	1070	1114	1082	23	2.8	1051	1065	1036	202	0.4
$\gamma_{\text{OCO}}$	630	641	625	25	2.9	–	639	624	65	0.5
$\rho_{\text{OH}}$	570	598	584	24	2.1	–	602	588	116	2.3



## Заклучение

Представленные результаты модельных расчетов колебательных состояний монозамещенных бензойной кислоты с различными электронодонорными свойствами заместителя, их сопоставление с имеющимися экспериментальными данными позволяют утверждать, что в рамках метода функционала плотности *DFT/b3LYP* можно осуществлять достоверные предсказательные расчеты электронной структуры исследуемого класса соединений и использовать их для построения структурно-динамических моделей.

## Список литературы

1. Mukherjee V., Singha N. P., Yadav R. A. Experimental and calculation aspects of vibrational spectra and optimized geometry of 2,3,4-tri-fluoro-benzoic acid dimer // *Spectrochimica Acta Part A : Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2009. Vol. 74, № 5. P. 1107–1114.
2. Mukherjee V., Singha N. P., Yadav R. A. FTIR and Raman spectra and optimized geometry of 2,3,6-tri-fluorobenzoic acid dimer : A DFT and SQMFF study // *Spectrochimica Acta*. 2010. Vol. 77A, № 4. P. 787–794.
3. Florio G. M., Zwier T. S., Myshakin E. M., Jordan K. D., Sibert E. L. Theoretical modeling of the OH stretch infrared spectrum of carboxylic acid dimers on first-principles anharmonic coupling // *J. Chem. Phys.* 2003. Vol. 118, № 4. P. 1735–1746.
4. Antony J., Helden G., Meijer G., Schmidt B. Anharmonic midinfrared vibrational spectra of benzoic acid monomer and dimer // *J. Chem. Phys.* 2005. Vol. 123, 014305. P. 1–11.
5. Matanovic L. Theoretical modeling of formic acid dimer infrared spectrum. Shaping the O-H stretch bond // *J. Chem. Phys.* 2007. Vol. 338. P. 121–126.
6. Olbert-Majrat A. Raman spectroscopy of formic acid and its dimers isolated in low temperature argon matrices // *Chem. Phys. Letters*. 2009. Vol. 468. P. 176–183.
7. Durlak P. Can-Parinello molecular dynamics and density functional Theory simulation of infrared spectra for acetic acid monomers and cyclic dimers // *Chem. Phys. Letters*. 2009. Vol. 477. P. 249–264.
8. Краснощеков С. В., Степанов Н. Ф. Масштабирующие множители как эффективные параметры для коррекции неэмпирического силового поля // *Журн. физ. химии*. 2007. Т. 81, № 4. С. 680–689.
9. Эрман Е. А., Элькин М. Д., Джалмухамбетова Е. А. Модельные оценки ангармонического смещения полос в колебательных спектрах димеров карбоновых кислот // *Прикаспийский журнал : управление и высокие технологии*. 2010. № 4(12). С. 53–58.
10. Элькин М. Д., Пулин В. Ф., Осин А. Б. Математические модели в молекулярном моделировании // *Вестн. Саратов. гос. техн. ун-та*. 2010. № 4(49). С. 36–39.
11. Элькин М. Д., Шальнова Т. А., Пулин В. Ф. Моделирование адиабатических потенциалов карбоновых кислот // *Вестн. Саратов. гос. техн. ун-та*. 2009. № 1(37). С. 109–114.
12. Элькин М. Д., Нуралиева Д. М., Гордеев И. И. Структурно-динамические модели димеров бензойной и изоникотиновой кислот // *Прикаспийский журнал : управление и высокие технологии*. 2011. № 1(13). С. 35–42.
13. Свердлов Л. М., Ковнер М. А., Крайнов Е. П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М. : Наука, 1970. 550 с.
14. Hoy A. R., Mills I. M., Strey G. Anharmonic force constants calculation // *J. Mol. Phys.* 1972. Vol. 21, № 6. P. 1265–1290.
15. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 03, Revision B.03 / Gaussian Inc. Pittsburg PA, 2003.
16. Эрман Е. А., Элькин П. М., Гречухина О. Н. Информационная технология «Gaussian» и структурно-динамические модели кислородосодержащих соединений // *Вестн. Саратов. гос. техн. ун-та*. 2009. № 2(39). С. 108–114.
17. Эрман Е. А., Элькин М. Д., Гречухина О. Н., Лихтер А. М. Моделирование структуры и спектров замещенных бензойной кислоты // *Естественные науки*. 2011. № 1(34). С. 206–212.
18. Sanchez E., Nariez J. L., Martinez F. Vibrational spectra of some o-substituted benzoic acid derivatives // *J. Mol. Structure*. 1986. Vol. 142. P. 45–48.