

УДК 535.34

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНФРАКРАСНЫХ СПЕКТРОВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

А.А. Карпова^а, А.С. Шерстобитова^а

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

Адрес для переписки: va7059va@yandex.ru

Информация о статье

Поступила в редакцию 14.06.17, принята к печати 05.08.17

doi: 10.17586/2226-1494-2017-17-5-820-825

Язык статьи – русский

Ссылка для цитирования: Карпова А.А., Шерстобитова А.С. Моделирование инфракрасных спектров лекарственных веществ квантово-механическими методами // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2017. Т. 17. № 5. С. 820–825. doi: 10.17586/2226-1494-2017-17-5-820-825

Аннотация

Предмет исследования. Предложен метод моделирования инфракрасных спектров наиболее распространенных лекарственных веществ (водорода пероксид, глицин, пиразинамид, натрия оксибутират, галотан). Поставлена задача выявить возможность замены экспериментальных методов измерения спектров лекарственных веществ их квантово-механическими моделями. **Метод.** В работе использована группа методов, относящихся к квантово-механическим: полуэмпирические методы, ограниченный метод Хартри–Фока, метод теории функционала плотности. Оценка точности результатов проведена по базе данных Spectral Database for Organic Compounds (SDBS). **Основные результаты.** Проведен расчет спектров образцов из перечня жизненно необходимых и важнейших лекарственных препаратов. Полученные результаты продемонстрировали возможность использования методов компьютерного моделирования наряду с экспериментальными исследованиями. Показано, что реальную картину спектра в исследуемой области инфракрасных частот (от 500 до 4000 см⁻¹) можно получить как композицию спектров, рассчитанных различными методами. Наиболее близкие значения к экспериментальным результатам показали полуэмпирические методы и метод теории функционала плотности. **Практическая ценность.** Полученные данные представляют интерес для специалистов фармацевтической промышленности при дополнительной оценке качества выпускаемых препаратов.

Ключевые слова

квантово-механический метод, теория функционала плотности, ограниченный метод Хартри–Фока, полуэмпирический метод, лекарственное вещество, инфракрасный спектр

SIMULATION OF INFRARED SPECTRA OF MEDICAL SUBSTANCES BY DIFFERENT QUANTUM MECHANICAL METHODS

А.А. Karpova^а, А.С. Sherstobitova^а

^а ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

Corresponding author: va7059va@yandex.ru

Article info

Received 14.06.17, accepted 05.08.17

doi: 10.17586/2226-1494-2017-17-5-820-825

Article in Russian

For citation: Karpova A.A., Sherstobitova A.S. Simulation of infrared spectra of medical substances by different quantum mechanical methods. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2017, vol. 17, no. 5, pp. 820–825 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2017-17-5-820-825

Abstract

Subject of Research. We propose the method for simulation of infrared spectra of the most widespread medical substances (hydrogen peroxide, glycine, pyrazinamide, sodium oxybate, halothane). The aim of the study is to find out the possibility for replacement of experimental methods of medical substances spectra measurement with their quantum mechanical simulation. **Method.** Several quantum mechanical methods are used in the study: semi-empirical methods, the restricted Hartree-Fock method, the Density Functional Theory method. The accuracy estimation of the results is carried out with the use of the Spectral Database for Organic Compounds (SDBS). **Main Results.** The spectra simulation of samples taken from the Vital and essential medicines notitia is carried out. The received results demonstrate the possibility of application of computer simulation methods together with experimental research. It is shown that the real spectrum in the examined infrared spectral region (from 500 to 4000 cm⁻¹) can be received as a composition of spectra calculated with the use of different methods. The

data, calculated with the use of semi-empirical method and the Density Functional Theory method, were more approximate to the experimental data. **Practical Relevance.** Obtained data may be of interest to specialists of pharmaceutical industry for the additional quality estimation of the produced medical substances.

Keywords

quantum mechanical method, Density Functional Theory, restricted Hartrey-Fock method, semi-empirical method, medicinal substance, infrared spectrum

Введение

Стабильно развивающаяся отрасль медицины – фармацевтика – предлагает потребителям широкий ассортимент лекарственных препаратов. Однако качество произведенной продукции как отечественных, так и зарубежных фирм, вызывает беспокойство со стороны контролирующих эту отрасль организаций, врачей лечебных заведений и обычных потребителей.

Различные научные методы широко используются при изучении фармакологически активных соединений и их воздействия на человеческий организм. Ведущую роль здесь играют спектральные методы и средства, посредством которых осуществляется проверка соответствия лекарственных препаратов государственным стандартным образцам (ГСО). Однако в последнее время наряду с экспериментальными исследованиями образцов в фармацевтике все чаще применяются методы компьютерного моделирования. Компьютерные расчеты при условии их правильного проведения могут дать результаты, совершенно независимые от практических измерений, т.е. влияние на них каких-либо внешних факторов исключено, а человеческий фактор минимизирован.

Цель настоящей работы заключалась в установлении возможности замены экспериментальных методов измерения спектров лекарственных веществ на их квантово-механическое моделирование, что позволило бы облегчить оценку качества фармацевтической продукции.

Методика проведения расчетов

Для проведения расчетов были выбраны пять лекарственных средств из перечня жизненно необходимых и важнейших лекарственных препаратов (ЖНВЛП), утвержденного на 2017 год [1]:

1. водорода пероксид H_2O_2 (код D08AX);
2. глицин $C_2H_5NO_2$ (код N06BX);
3. пиразинамид $C_5H_5N_3O$ (код J04AK);
4. натрия оксибутират $C_4H_7O_3Na$ (код N01AX);
5. галотан $C_2HBrClF_3$ (код N01AB).

Важным условием при выборе данных веществ была особенность их молекулярного строения: число атомов в каждой из молекул, наличие различных функциональных групп (карбоксильной, гидроксильной, аминогрупп) и др.

Оптимизация геометрии и расчет инфракрасных спектров (ИК-спектров) осуществлялись в программном пакете Gaussian [2], а также с помощью вспомогательной программы GaussView [3]. Для каждого вещества проводилась произвольная серия из не менее чем 8 расчетов. Использовались полуэмпирические методы (Austin Model 1 (AM1) [4], Parameterized Model 3 (PM3) [5], Parameterized Model 6 (PM6) [6]), ограниченный метод Хартри–Фока (restricted Hartrey-Fock (restricted HF)) [7, 8], метод теории функционала плотности (the Density Functional Theory (DFT)) [9–13] с базисными наборами Попла 3-21G, 6-31G [14, 15], STO-3G [16] и возможным добавлением диффузионных и поляризационных функций, а также с базисным набором Даннинга cc-pVDZ [17]. STO- n G: каждая атомная орбиталь состоит из суммы n гауссовых функций. Коэффициенты гауссовых функций подобраны так, чтобы их линейные комбинации приближенно описывали поведение орбиталей слейтеровского типа (STO – Slater-type orbital). STO-3G – каждая атомная орбиталь состоит из суммы трех гауссовых функций. $k-nlm$ G: число k обозначает, сколько примитивов используется для представления остоновых орбиталей. Числа nlm после дефиса обозначают число функций, на которые расщепляются валентные орбитали, и количество гауссовых функций, которые используются для их представления. 3-21G (6-31G) – для описания остоновых орбиталей используются три (шесть), а для описания валентных орбиталей – две (три) и одна гауссовы функции. 6-31G – для описания остоновых орбиталей используются шесть, а для описания валентных орбиталей – три, одна и одна гауссовы функции. cc-pVNZ: correlation-consistent polarized N -zeta basis set, $N = D, T, Q, 5, 6, 7, 8$. cc-pVDZ – корреляционно-согласованный поляризационный валентно-расщепленный набор 2-zeta качества. cc-pVQZ – корреляционно-согласованный поляризационный валентно-расщепленный набор 4-zeta качества. aug-cc-pVNZ: augmented correlation-consistent polarized N -zeta basis set. Приставка aug- означает добавление к базисному набору Даннинга (диффузных функций).

Выбор оптимального метода предполагал анализ следующих факторов: число расчетных частот, не присутствующих в экспериментальном спектре; отклонение полученных частот от действительного значения; число частот, значения которых были бы максимально близки к экспериментальным с заданной точностью, и др.

После выполнения моделирования спектров проводилась их визуализация. Значение полуширины спектральной линии на уровне полувысоты (IR – peak half-width at half height) устанавливалось в меню параметров отображения спектра (30 cm^{-1}). Программа GaussView позволяла представить результаты расчетов в графическом виде. Данные из программы GaussView сохранялись в формате «txt» для диапазона частот $500\text{--}4000 \text{ cm}^{-1}$ с шагом 5 cm^{-1} , затем проводилась их нормировка. Для обработки полученных результатов использовался программный пакет OriginPro [18].

Сравнение расчетных спектров проводилось с экспериментальными данными базы SDBS (Spectral Database for Organic Compounds) [19]. По результатам моделирования для каждого лекарственного средства были выбраны 3 спектра, наиболее близкие к экспериментальному по положению линий на оси частот (cm^{-1}).

Результаты и их обсуждение

Для водорода пероксида (H_2O_2) была проведена серия из 13 расчетов ИК-спектра полуэмпирическими методами AM1, PM3, PM6, методом HF с базисными наборами STO-3G, 3-21G, 3-21+G*, 6-31G, методом DFT с функционалом B3LYP (Becke, three-parameter, Lee-Yang-Parr exchange-correlation functional) с базисными наборами 6-31G, 6-311G, 6-31+G(d), 6-31+G(d,p), aug-cc-pVDZ, aug-cc-pVQZ (+ – добавление диффузных функций на тяжелые (неводородные) атомы. ++ – добавление диффузных функций на тяжелые атомы и диффузных функций на атомы водорода. * или (d) – добавление поляризационных функций на тяжелые атомы. ** или (d,p) – добавление поляризационных функций на тяжелые атомы и поляризационных функций на атомы водорода. Лучшие результаты показали методы PM3, HF 3-21+G*, DFT B3LYP 6-31G (таблица).

Экспериментальные данные по базе SDBS [19], cm^{-1}	Метод		
	PM3, cm^{-1}	HF 3-21*G+, cm^{-1}	DFT B3LYP 6-31G, cm^{-1}
3608	3983,56	3815,90	3615,82
3599	3980,81	3811,65	3597,96
1402	1606,57	1590,48	1490,34
1266	1407,94	1230,06	1161,98
877	801,33	1110,14	878,97
371	262,69	107,85	109,41

Таблица. Результаты расчета характерных спектральных линий водорода пероксида H_2O_2

Расчет ИК-спектра пропускания глицина ($\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$) производился 8 методами: AM1, PM3, PM6, HF STO-3G*, HF 3-21+G, DFT B3LYP STO-3G*, DFT B3LYP 3-21G. Результаты моделирования ИК-спектров глицина 3 методами и экспериментальные данные базы SDBS [19] представлены на рис. 1 в виде зависимости коэффициента пропускания T от частоты.

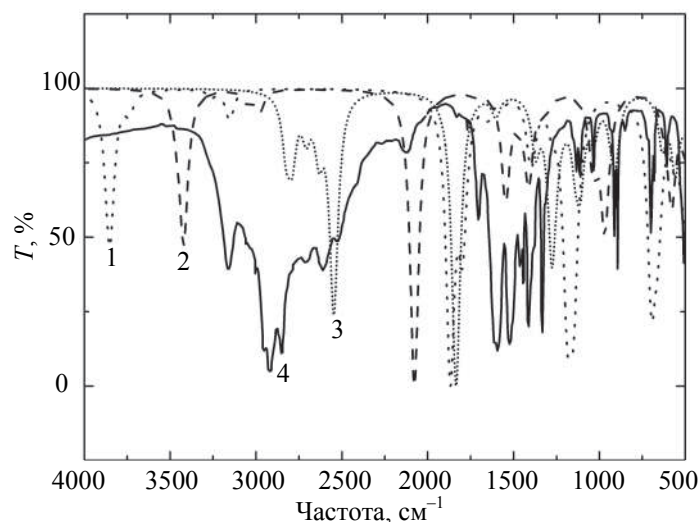


Рис. 1. ИК-спектры пропускания глицина, полученные различными методами: 1 – HF 3-21+G; 2 – AM1; 3 – PM6; 4 – экспериментальные данные из базы SDBS [19]

На рис. 1 видно, что значение частоты интенсивной линии 3000 cm^{-1} , наблюдаемой на экспериментальном спектре, завышено в расчетах методами AM1 и HF 3-21+G. В спектре, рассчитанном методом PM6, эта линия отсутствует. Также можно сделать предположение, что рассчитанные спектральные ли-

нии в диапазоне частот $1050\text{--}2050\text{ см}^{-1}$ соответствуют на экспериментальном спектре линиям около значения 1500 см^{-1} . Таким образом, снова наблюдается завышение значений частот. При этом метод PM6 более точен по сравнению AM1 и HF 3-21+G.

Для пиразинамида ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N}_3\text{O}$) была проведена серия из 8 расчетов методами AM1, PM3, HF 3-21G, DFT B3LYP 3-21G, HF 6-31G, DFT B3LYP 6-31+G(d), DFT B3LYP STO-3G, DFT B3LYP cc-pVDZ. Лучшие результаты моделирования ИК-спектра пиразинамида были получены посредством методов AM1, PM3 и DFT B3LYP 3-21G. Результаты моделирования ИК-спектров пиразинамида 3 методами и экспериментальные данные базы SDBS [19] представлены на рис. 2.

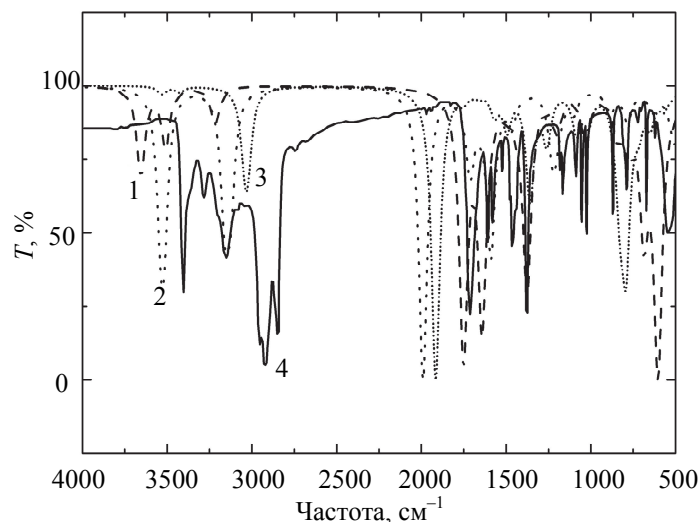


Рис. 2. ИК-спектры пропускания пиразинамида, полученные различными методами: 1 – DFT B3LYP 3-21G; 2 – AM1; 3 – PM3; 4 – экспериментальные данные из базы SDBS [19]

Значения частот характерных спектральных линий в диапазоне $500\text{--}1000\text{ см}^{-1}$ были рассчитаны с наибольшей точностью методом PM3, в диапазоне $1000\text{--}3500\text{ см}^{-1}$ – методом DFT B3LYP 3-21G. Значения частот в спектральном диапазоне $3000\text{--}4000\text{ см}^{-1}$, максимально близкие к экспериментальным, были определены методом AM1.

При моделировании ИК-спектра пропускания натрия оксибутирата ($\text{C}_4\text{H}_7\text{O}_3\text{Na}$) использовались методы AM1, PM6, HF 3-21G, DFT B3LYP 3-21G, HF 6-31+G(d), DFT B3LYP 6-31+G(d), HF cc-pVDZ, HF 6-311++G(d,p), DFT B3LYP cc-pVDZ. Наиболее точные результаты показали методы AM1, PM6 и DFT B3LYP cc-pVDZ. Результаты моделирования ИК-спектров оксибутирата натрия 3 методами и экспериментальные данные базы SDBS [19] представлены на рис. 3.

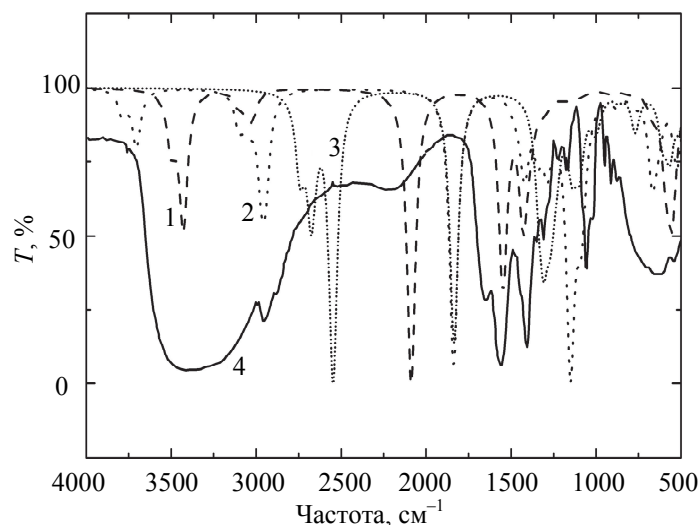


Рис. 3. ИК-спектры пропускания оксибутирата натрия, полученные различными методами: 1 – AM1; 2 – DFT B3LYP cc-pVDZ; 3 – PM6; 4 – экспериментальные данные из базы SDBS [19]

Положение спектральных линий в диапазоне частот $500\text{--}1000\text{ см}^{-1}$, рассчитанное методом PM6, было максимально близко к экспериментальным данным базы SDBS. В то же время этот метод давал за-

ниженные значения частот в диапазоне $1000\text{--}4000\text{ см}^{-1}$. Характерная линия, соответствующая на экспериментальном спектре значению 3500 см^{-1} , была определена с допустимой точностью методом AM1. Лучшие результаты моделирования ИК-спектра $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_3$ в диапазоне частот $3000\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ показал метод DFT B3LYP cc-pVDZ.

ИК-спектр пропускания галотана ($\text{C}_2\text{HBrClF}_3$) был рассчитан посредством методов AM1, PM3, HF 3-21G, DFT B3LYP 3-21G, HF 6-31+G(d), DFT B3LYP 6-31+G(d), HF cc-pVDZ, DFT B3LYP cc-pVDZ. Результаты моделирования ИК-спектров галотана 3 методами и экспериментальные данные базы SDBS [19] представлены на рис. 4.

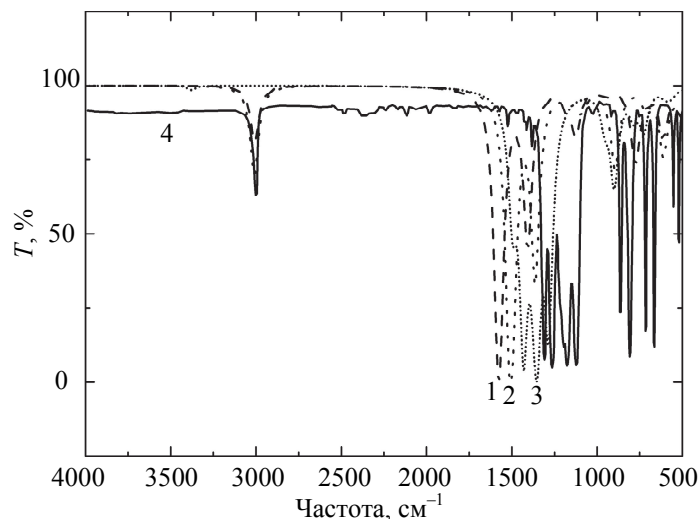


Рис. 4. ИК-спектры пропускания галотана, полученные различными методами: 1 – PM3, 2 – AM1, 3 – HF 6-31+G(d); 4 – экспериментальные данные из базы SDBS [19]

Наиболее точные результаты моделирования в диапазоне частот $500\text{--}1500\text{ см}^{-1}$ показал метод HF 6-31+G(d). Но положение характерной спектральной линии вблизи значения 3000 см^{-1} с большой точностью было рассчитано только полуэмпирическими методами AM1 и PM3.

Анализ полученных данных позволяет утверждать, что провести моделирование всего ИК-спектра пропускания одного и того же вещества с допустимой точностью можно только с использованием нескольких квантово-химических методов. Результаты расчетов одним выбранным методом не предоставляют точной информации обо всем ИК-спектре, но лишь об отдельных его участках (при этом возможно присутствие или отсутствие спектральных линий, их смещение в спектре и др.).

Заключение

В настоящей работе было проведено моделирование инфракрасных (ИК) спектров пропускания лекарственных средств (водорода пероксид, глицин, пиразинамид, натрия оксибутират, галотан) квантово-механическими методами. Наиболее точно ИК-спектры были рассчитаны для водорода пероксида. Для каждого из остальных выбранных лекарственных веществ (глицин, пиразинамид, натрия оксибутират, галотан) максимально близкий к экспериментальным данным ИК-спектр мог быть представлен как композиция спектров, рассчитанных несколькими квантово-химическими методами (лучшие результаты показали полуэмпирические методы и метод теории функционала плотности). Полученные результаты не позволяют сделать однозначный вывод о возможности полного замещения экспериментальных исследований методами компьютерного моделирования. Целесообразным здесь является применение обоих методов исследования (экспериментальных и компьютерных) как дополняющих друг друга.

Литература

1. Об утверждении перечня жизненно необходимых и важнейших лекарственных препаратов для медицинского применения на 2017 год: распоряжение Правительства РФ от 28 декабря 2016 г. № 2885-р [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://government.ru/docs/25924/>, свободный. Яз. рус.
2. Gaussian. Expanding the Limits of Computational Chemistry [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://gaussian.com/>, свободный. Яз. англ.
3. Roothaan C.C.J. New development in molecular orbital theory // *Reviews of Modern Physics*. 1951. V. 23. N 2. P. 69–89. doi: 10.1103/RevModPhys.23.69

References

1. *On the approval of the list of vital and essential medicines for medical use at 2017. Order of the Government of the Russian Federation no. 2885-r*, 28.12.2016. Available at: <http://government.ru/docs/25924> (accessed 10.09.2017).
2. Gaussian. *Expanding the Limits of Computational Chemistry*. Available at: <http://gaussian.com> (accessed 10.09.2017).
3. Roothaan C.C.J. New development in molecular orbital theory. *Reviews of Modern Physics*, 1951, vol. 23, no. 2, pp. 69–89. doi: 10.1103/RevModPhys.23.69
4. Dewar M.J.S., Zerbisch E.G., Healy E.F., Stewart J.J.P. Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: a new general purpose quantum mechanical

4. Dewar M.J.S., Zoebisch E.G., Healy E.F., Stewart J.J.P. Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: a new general purpose quantum mechanical molecular model // *Journal of the American Chemical Society*. 1985. V. 107. N 13. P. 3902–3909. doi: 10.1021/ja00299a024
5. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method // *Journal of Computational Chemistry*. 1989. V. 10. N 2. P. 209–220. doi: 10.1002/jcc.540100208
6. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods V: Modification of NDDO approximations and application to 70 elements // *The Journal of Molecular Modeling*. 2007. V. 13. N 12. P. 1173–1213. doi: 10.1007/s00894-007-0233-4
7. Pople J.A., Nesbet R.K. Self-consistent orbitals for radicals // *Journal of Chemical Physics*. 1954. V. 22. N 3. P. 571–572. doi: 10.1063/1.1740120
8. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // *Physical Review*. 1964. V. 136. N 3B. P. B864–B871. doi: 10.1103/PhysRev.136.B864
9. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // *Physical Review*. 1965. V. 140. N 4A. P. A1133–A1138. doi: 10.1103/PhysRev.140.A1133
10. Hehre W.J., Ditchfield R., Pople J.A. Self-consistent molecular orbital methods. 12. Further extensions of Gaussian-type basis sets for use in molecular-orbital studies of organic-molecules // *The Journal of Chemical Physics*. 1972. V. 56. N 5. P. 2257–2261. doi: 10.1063/1.1677527
11. Henre W.J., Stewart R.F., Pople J.A. Self-consistent molecular-orbital method. I. Use of Gaussian expansions of Slater-type atomic orbitals // *The Journal of Chemical Physics*. 1969. V. 51. N 6. P. 2657–2664. doi: 10.1063/1.1672392
12. Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // *The Journal of Chemical Physics*. 1993. V. 98. N 7. P. 5648–5652. doi: 10.1063/1.464913
13. Lee C., Yang W., Parr R.G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // *Physical Review B*. 1988. V. 37. N 2. P. 785–789. doi: 10.1103/PhysRevB.37.785
14. Binkley J.S., Pople J.A., Hehre W.J. Self-consistent molecular-orbital method. 21. Small split-valence basis sets for first-row elements // *Journal of the American Chemical Society*. 1980. V. 102. N 3. P. 939–947. doi: 10.1021/ja00523a008
15. Thom H., Dunning Jr. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen // *The Journal of Chemical Physics*. 1989. V. 90. N 2. P. 1007–1023. doi: 10.1063/1.456153
16. Shimanouchi T. Tables of molecular vibrational frequencies. Consolidated volume II // *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 1977. V. 6. N 3. P. 993–1102. doi: 10.1063/1.555560
17. Huber K.P., Herzberg G.. Constants of diatomic molecules. In: *Molecular Spectra and Molecular Structure*. NY: Van Nostrand Reinhold, 1979. P. 8–689. doi: 10.1007/978-1-4757-0961-2_2
18. OriginLab – Data Analysis and Graphing Software. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.originlab.com/>, свободный. Яз. англ.
19. Spectral Database for Organic Compounds SDBS [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://sdb.sdb.aist.go.jp>, свободный. Яз. англ.
- molecular model. *Journal of the American Chemical Society*, 1985, vol. 107, no. 13, pp. 3902–3909. doi: 10.1021/ja00299a024
5. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method. *Journal of Computational Chemistry*, 1989, vol. 10, no. 2, pp. 209–220. doi: 10.1002/jcc.540100208
6. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods V: Modification of NDDO approximations and application to 70 elements. *The Journal of Molecular Modeling*, 2007, vol. 13, no. 12, pp. 1173–1213. doi: 10.1007/s00894-007-0233-4
7. Pople J.A., Nesbet R.K. Self-consistent orbitals for radicals. *Journal of Chemical Physics*, 1954, vol. 22, no. 3, pp. 571–572. doi: 10.1063/1.1740120
8. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 1964, vol. 136, no. 3B, pp. B864–B871. doi: 10.1103/PhysRev.136.B864
9. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 1965, vol. 140, no. 4A, pp. A1133–A1138. doi: 10.1103/PhysRev.140.A1133
10. Hehre W.J., Ditchfield R., Pople J.A. Self-consistent molecular orbital methods. 12. Further extensions of Gaussian-type basis sets for use in molecular-orbital studies of organic-molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 1972, vol. 56, no. 5, pp. 2257–2261. doi: 10.1063/1.1677527
11. Henre W.J., Stewart R.F., Pople J.A. Self-consistent molecular-orbital method. I. Use of Gaussian expansions of Slater-type atomic orbitals. *The Journal of Chemical Physics*, 1969, vol. 51, no. 6, pp. 2657–2664. doi: 10.1063/1.1672392
12. Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of Chemical Physics*, 1993, vol. 98, no. 7, pp. 5648–5652. doi: 10.1063/1.464913
13. Lee C., Yang W., Parr R.G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 1988, vol. 37, no. 2, pp. 785–789. doi: 10.1103/PhysRevB.37.785
14. Binkley J.S., Pople J.A., Hehre W.J. Self-consistent molecular-orbital method. 21. Small split-valence basis sets for first-row elements. *Journal of the American Chemical Society*, 1980, vol. 102, no. 3, pp. 939–947. doi: 10.1021/ja00523a008
15. Thom H., Dunning Jr. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen. *The Journal of Chemical Physics*, 1989, vol. 90, no. 2, pp. 1007–1023. doi: 10.1063/1.456153
16. Shimanouchi T. Tables of molecular vibrational frequencies. Consolidated volume II. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1977, vol. 6, no. 3, pp. 993–1102. doi: 10.1063/1.555560
17. Huber K.P., Herzberg G.. Constants of diatomic molecules. In: *Molecular Spectra and Molecular Structure*. NY, Van Nostrand Reinhold, 1979, pp. 8–689. doi: 10.1007/978-1-4757-0961-2_2
18. *OriginLab – Data Analysis and Graphing Software*. Available at: <http://www.originlab.com> (accessed 10.09.2017).
19. *Spectral Database for Organic Compounds SDBS*. Available at: <http://sdb.sdb.aist.go.jp> (accessed 10.09.2017).

Авторы

Карпова Анастасия Андреевна – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, va7059va@yandex.ru

Шерстобитова Александра Сергеевна – кандидат технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, ashev87@mail.ru

Authors

Anastasiya A. Karpova – student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, va7059va@yandex.ru

Alexandra S. Sherstobitova – PhD, Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, ashev87@mail.ru