

## Новые технологии

УДК 539.194.01

### Компьютерная интерпретация инфракрасных спектров высокотоксичных соединений

**Б. Ф. Мясоедов, А. И. Павлючко, И. В. Рыбальченко, В. Н. Суворкин, Т. В. Дуброва**

*БОРИС ФЕДОРОВИЧ МЯСОЕДОВ — доктор химических наук, профессор, академик РАН, научный руководитель Межведомственного центра аналитических исследований в области физики, химии и биологии при Президиуме РАН (МЦАИ РАН). Область научных интересов: радиохимия, аналитическая химия.*

*АНАТОЛИЙ ИВАНОВИЧ ПАВЛЮЧКО — доктор химических наук, профессор Волгоградского государственного технического университета. Область научных интересов: молекулярная спектроскопия, квантовая химия.*

*ИГОРЬ ВЛАДИМИРОВИЧ РЫБАЛЬЧЕНКО — доктор химических наук, профессор Военной академии радиационной, химической и биологической (РХБ) защиты. Область научных интересов: аналитическая химия высокотоксичных соединений.*

*ВЛАДИМИР НИКОЛАЕВИЧ СУВОРКИН — кандидат химических наук, старший научный сотрудник Военной академии РХБ защиты. Область научных интересов: аналитическая хроматография, масс- и ИК-спектрометрия.*

*ТАТЬЯНА ВЛАДИМИРОВНА ДУБРОВА — старший научный сотрудник МЦАИ РАН. Область научных интересов: аналитическая хроматография.*

117333 Москва, ул. Вавилова, 44, МЦАИ РАН, тел./факс (495) 135-20-58, E-mail [mzairan@ipiran.ru](mailto:mzairan@ipiran.ru)

#### Введение

В 1993 г. введена в действие международная Конвенция «О запрещении разработки, производства, накопления и применения химического оружия и о его уничтожении» [1], однако применение высокотоксичных соединений в террористических целях продолжает оставаться реальной угрозой. В связи с этим сохраняется необходимость пристального внимания к методам достоверного выявления, идентификации и нейтрализации такого рода веществ.

К группе наиболее опасных супертоксикантов [2] относятся О-алкил-алкилфторфосфонаты  $RP(O)F(OR')$ . Один из представителей этой группы — О-изопропилметилфторфосфонат (зарин) был дважды использован террористами в Японии. Первый инцидент, произошедший в Мацумото в июне 1994 г., привел к 200 жертвам среди мирных жителей, включая 7 человек с летальным исходом. Второй инцидент в токийском метро 20 марта 1995 г. потребовал медицинской помощи для 5150 человек, из них 20% были госпитализированы, 12 человек погибли.

Одной из первых в ряду мер по ликвидации последствий химического теракта является идентификация использованного токсичного соединения с точностью до молекулярной структуры.

Для распознавания органических соединений по их молекулярным спектрам, в частности по ИК спектру

— своеобразным «отпечаткам пальцев» конкретного вещества, требуется знание спектров всех «подозреваемых» соединений. В настоящее время доступные спектральные библиотеки ведущих зарубежных фирм содержат порядка нескольких десятков тысяч ИК спектров, реальные же потребности для исследовательских и аналитических целей оцениваются миллионами соединений.

Системы библиотечного поиска в сочетании со специализированными базами спектральных данных до настоящего времени остаются наиболее надежным инструментом для достоверной идентификации соединений различных классов. Работы по созданию таких структур стимулируются не только широким использованием во многих областях науки и техники измерительно-вычислительных комплексов «хроматограф-спектрометр-ЭВМ», доступностью средств ведения персональных баз данных, но и потребностями аналитической практики. Сопоставление зарегистрированного пользователем ИК спектра поглощения исследуемой пробы после ее хроматографического разделения на индивидуальные компоненты с эталонными ИК спектрами стало распространенным приемом установления состава и строения вещества. Информативность ИК спектра настолько высока, что при полном совпадении спектра индивидуального соединения с одним из эталонных спектров можно с уве-

ренностью утверждать, что соединение идентифицировано. Именно это обстоятельство и привело к созданию больших коллекций ИК спектральных данных. Разнообразные коллекции спектральных данных (атласы спектров, картотеки, каталоги на микрофишах и др.) в сочетании с известными спектроструктурными корреляциями и в «докомпьютерный» период оказывали помощь химикам и спектроскопистам в интерпретации спектров [3–5]. Эти коллекции и сегодня продолжают пополняться спектральными данными по вновь появившимся соединениям [6].

Внедрение вычислительной техники в аналитическую химию позволило оптимально использовать спектральные данные: хранить их на электронных носителях и осуществлять автоматизированную обработку данных. Современные базы данных по масс- и ИК-спектromетрии наряду с обширным массивом спектральных данных содержат информацию о структурных формулах индивидуальных соединений и ряд других сведений, относящихся к соединению. Наличие в базах данных информации о структурной формуле соединения и его регистрационного номера не только обеспечивает оперативное предоставление эксперту-аналитику необходимой справочной информации, но и дает возможность проверки эффективности самих поисковых алгоритмов, новых теоретических описаний структур и изучения взаимосвязи свойств и строения молекул.

Поддержка, пополнение существующих баз данных и расширение доступа к ним, несомненно, остаются актуальной задачей, но ее решение затрудняют определенные сложности [7]: большая себестоимость и трудоемкость работы по пополнению баз данных и сложность хранения и обработки информации из-за ее большого объема.

Таким образом, создание крупных специализированных баз по ИК-спектromетрии и их расширение — чрезвычайно ресурсоемкая задача, связанная с необходимостью синтеза каждого вещества, спектральные характеристики которого предполагается включить в базу данных [8]. В случае высокотоксичных соединений эффективность такого подхода представляется проблематичной. В частности, ряд *O*-алкил-( $\leq C_{10}$ , включая циклоалкил)алкил(Мe, Et, *n*-Pr или *изо*-Pr)-фторфосфонатов входит в ограничительный Список 1 Конвенции о запрещении химического оружия и включает 24956 наименований потенциально опасных соединений. На сегодняшний день зарегистрированы и включены в базы данных ИК спектры конденсированной и паровой фаз лишь около ста соединений из этого списка, так что требуются новые подходы к формированию спектральных библиотек.

#### Фрагментарные неэмпирические квантовохимические вычисления ИК спектров *O*-алкил-алкилфторфосфонатов

Предсказание спектра соединения — одна из самых сложных задач молекулярной спектроскопии. Это вызвано тем, что рассчитать ИК спектр — значит воспользоваться моделью молекулы и определить все уровни колебательной энергии для соответствующей квантовой системы и вероятности переходов между уровнями. Это эквивалентно решению уравнения Шрёдингера для данной молекулярной системы. Не-

возможность его точного решения заставляет прибегать к последующим приближениям. Расчет осложнен тем обстоятельством, что в подавляющем числе случаев неизвестны потенциальные и электрооптические функции основных структурных групп, входящих в молекулу, и, кроме того, ограничена возможность их распространения на весь ряд соединений с использованием традиционных подходов.

Нами предложен метод расчета колебательных ИК спектров паровой фазы ряда *O*-алкил-алкилфторфосфонатов, основанный на фрагментарном способе нахождения потенциальной и электрооптической функций молекулы из функций более простых молекул [9, 10]. Главным достоинством метода является малое время предсказания ИК спектра. Применительно к *O*-алкил-алкилфторфосфонатам этот метод представляется наиболее приемлемым, так как в данном случае молекула состоит из двух больших фрагментов (*O*-алкила и алкилфторфосфоната), слабо влияющих друг на друга. Подробно предложенный метод расчета описан в статье, опубликованной ранее [11].

Рассчитанные по данному методу значения интегральной интенсивности поглощения *O*-алкильного и алкилфторфосфонатного фрагментов для ряда *O*-алкил-алкилфторфосфонатов в области  $650\text{—}3100\text{ см}^{-1}$  представлены в табл. 1. На основе этих данных были найдены эмпирические потенциальные и электрооптические функции алкилфторфосфонатных фрагментов (метилфторфосфонат, этилфторфосфонат, изопропилфторфосфонат и пропилфторфосфонат), а также *O*-алкильных фрагментов (*O*-метил, *O*-этил, *O*-изопропил, *O*-пропил, *O*-изобутил, *O*-бутил и *O*-циклогексил). Полученные эмпирические потенциальные и электрооптические функции этих фрагментов, без какой-либо дополнительной корректировки, обеспечивают хорошее соответствие рассчитанных и экспериментальных ИК спектров молекул *O*-алкил-алкилфторфосфонатов. В области  $800\text{—}4000\text{ см}^{-1}$  среднее расхождение между рассчитанными и экспериментальными частотами полос поглощения составляет  $5\text{ см}^{-1}$ , а среднее расхождение между рассчитанными и экспериментальными интенсивностями полос поглощения — 5%. Таким образом, рассчитанные ИК спектры в этой области могут быть использованы для идентификации молекул.

Один из вариантов последовательности операций по идентификации *O*-алкил-алкилфторфосфонатов может быть следующим.

1. Проводится сравнение экспериментального ИК спектра изучаемого соединения с ИК спектрами, имеющимися в базе данных [12]. Если соединение не идентифицировано, то переходят к следующим шагам алгоритма.

2. Экспериментальный ИК спектр в области  $600\text{—}1350\text{ см}^{-1}$  сравнивается с ИК спектрами молекул *O*-алкил-алкилфторфосфонатов среднего размера, например *O*-пентил-метилфторфосфоната, *O*-пентил-этилфторфосфоната, *O*-пентил-изопропилфторфосфоната и *O*-пентил-пропилфторфосфоната. Сопоставление ИК спектров в этой области позволяет установить, входит ли изучаемое соединение в ряд *O*-алкил-метилфторфосфонатов, *O*-алкил-этилфторфосфонатов, *O*-алкил-изопропилфторфосфонатов или *O*-алкил-пропилфторфосфонатов.

Таблица 1

Рассчитанная интегральная интенсивность полос поглощения О-алкильного и алкилфторфосфонатного фрагментов в ряду О-алкил-алкилфторфосфонатов

Молекула	Фрагмент	Спектральный диапазон, см <sup>-1</sup>							
		650—800	800—900	900—1000	1000—1100	1100—1250	1250—1350	1350—1500	2800—3100
		Интегральная интенсивность поглощения в 10 <sup>-8</sup> см <sup>2</sup> /(моль · с)							
o1-p1	P	9,9	103,5	85,0	400,1	0,0	140,4	3,3	0,9
	A	0,0	0,0	0,0	0,0	10,2	0,0	3,0	21,6
o3i-p1	P	25,3	72,1	37,0	599,2	0,0	151,2	5,9	0,8
	A	0,0	0,5	19,8	7,3	12,9	0,4	15,2	64,2
o3n-p1	P	24,6	94,0	57,9	452,8	0,0	150,4	3,1	0,9
	A	0,3	1,2	0,0	2,5	0,0	0,1	17,8	127,0
обс-p1	P	39,2	78,1	87,7	599,6	0,0	138,5	3,1	0,8
	A	0,4	12,2	3,3	15,1	35,5	20,5	22,1	188,4
o1-p2	P	12,1	200,0	1,3	514,6	7,4	130,0	5,1	22,0
	A	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	3,0	22,0
o3n-p2	P	28,3	163,4	5,1	524,9	1,2	135,4	5,1	22,0
	A	0,4	0,0	0,0	2,9	0,0	6,8	17,2	128,3
o4n-p2	P	26,8	144,1	4,9	527,6	1,2	130,6	5,4	22,0
	A	0,6	3,8	11,8	0,0	11,3	4,2	15,4	147,6
обс-p2	P	45,9	153,7	8,1	677,2	1,3	127,6	3,7	22,3
	A	0,6	36,5	5,3	6,3	34,1	22,0	23,9	187,9
o1-p3i	P	16,4	177,9	2,0	356,8	5,6	110,3	12,6	43,1
	A	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	6,1	21,6
o4i-p3i	P	37,6	125,5	2,1	521,7	0,9	120,4	13,3	42,8
	A	4,6	7,2	18,1	12,6	0,3	7,5	19,4	104,3
o4n-p3i	P	32,8	126,0	2,0	439,5	1,3	117,5	13,7	42,8
	A	1,0	2,1	9,5	0,0	13,9	2,8	16,4	153,0
обс-p3i	P	59,2	152,8	1,9	579,7	27,1	107,8	9,7	42,8
	A	1,0	17,9	6,5	11,5	13,1	31,8	29,9	189,3
o1-p3n	P	11,0	137,3	0,0	374,0	19,5	99,3	8,6	45,4
	A	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	3,0	11,0
o3i-p3n	P	24,6	84,8	23,4	603,9	18,9	114,0	8,6	45,5
	A	0,0	0,3	3,7	5,7	10,6	2,1	19,8	65,3
o4i-p3n	P	18,8	91,9	13,4	565,0	16,5	105,4	8,5	56,2
	A	3,2	13,3	21,9	9,0	0,2	7,0	19,2	98,1
o4n-p3n	P	16,1	86,4	14,0	486,3	13,2	101,6	8,5	45,6
	A	0,9	11,2	8,6	0,0	10,6	4,4	16,2	156,7

Принятые обозначения:

o1 — О-метил, o2 — О-этил, o3i — О-изопропил, o3n — О-пропил, o4i — О-изобутил, o4n — О-бутил, обс — О-циклогексил, p1 — метилфторфосфонат, p2 — этилфторфосфонат, p3i — изопропилфторфосфонат, p3n — пропилфторфосфонат.

A — О-алкильный фрагмент, P — алкилфторфосфонатный фрагмент.

3. Если предыдущий шаг показал, что изучаемое соединение входит в ряд О-алкил-алкилфторфосфонатов, то по интенсивностям полос поглощения в областях 1350—1500 см<sup>-1</sup> и 2800—3100 см<sup>-1</sup> устанавливается предполагаемая величина О-алкильного фрагмента. Для определения интенсивностей полос поглощения в качестве внутреннего стандарта использу-

ется полоса поглощения в области 1250—1350 см<sup>-1</sup>, соответствующей валентным колебаниям связи Р=О.

4. Путем сравнения ИК спектров изучаемого соединения с суммой ИК спектров спиртов, имеющихся в базе данных, и соответствующего О-пентил-алкилфторфосфоната устанавливается вероятное

строение О-алкильного фрагмента в О-алкил-алкилфторфосфонате.

### Алгоритмы идентификации и создания банка данных расчетных ИК спектров О-алкил-алкилфторфосфонатов

В аналитической спектроскопии наиболее часто осуществляется автоматизированная интерпретация экспериментальных спектров с использованием информационно-поисковой системы [13]. Информационно-поисковая система по заложенным в нее алгоритмам вычисляет степень совпадения оцениваемого спектра со спектрами, содержащимися в банке данных (библиотеке). Для компьютерной идентификации О-алкил-алкилфторфосфонатов в качестве банка данных предлагается использовать ИК спектры, рассчитанные по указанному выше методу [11]. Алгоритм идентификации и создания банка данных ИК спектров можно представить в виде блок-схемы, показанной на рис. 1.

Источником исходных данных для постановки задачи идентификации высокотоксичных веществ, выбора начальных условий и учета ограничений по перечню классов и числу контролируемых соединений является ограничительный Список (приложение к Конвенции), в котором содержится описание как классов, так и индивидуальных токсичных соединений. На основе составленного описания токсичных соединений несложно сформировать полный перечень всех возможных структур, подлежащих идентификации. Существует серия алгоритмов и соответствующих программных продуктов, так называемых генераторов химических структурных формул, позволяющих выде-

лать структуры по заданным априорно ограничениям [14, 15]. Для всех возможных структур из сформированного перечня рассчитываются ИК спектры и из них создается банк спектральных данных. При интерпретации экспериментального спектра идентифицируемого соединения инструментом для сравнения экспериментального и библиотечных спектров может служить любая доступная для пользователя информационно-поисковая система.

Целью нашего эксперимента являлось, с одной стороны, оценка возможности применения массива расчетных ИК спектров в качестве банка данных для информационно-поисковых систем, а с другой — не-визуальная (машинная) оценка схожести расчетных и экспериментальных спектров.

В качестве информационно-поисковой системы использовался программный пакет GRAMS/386 v.2.00F [16]. Эта программа позволяет производить сравнительную оценку двух спектров как по наличию определенных спектральных полос в режиме прямого и обратного поиска, так и поточечное сравнение двух спектральных кривых с использованием одной из математических характеристик, позволяющих выявить близость двух точек спектральной кривой в двумерном пространстве признаков. Возможно также смешанное использование двух подходов к сравнению спектров (рис. 2).

В нашем эксперименте информационно-поисковой системе предоставлялись экспериментальные ИК спектры О-алкил-алкилфторфосфонатов. Банком данных информационно-поисковой системы служила библиотека рассчитанных ИК спектров. Успешным результатом идентификации считался тот, когда система правильно распознавала соединение, т.е. ставила в соответствие его экспериментальному ИК спектру расчетный библиотечный спектр, отвечающий этому же соединению, с лучшим качеством совпадения. При этом качество совпадения оценивалось суммой квадратов отклонений точек экспериментальной и расчетной спектральных кривых. Пример результата интерпретации ИК спектра О-изопропил-метилфторфосфоната показан на рис. 3.

Результаты идентификации по 22 соединениям представлены в табл. 2. Из таблицы видно, что использование библиотеки расчетных спектров позволяет достоверно идентифицировать практически все соединения. Количество идентифицированных и неидентифицированных соединений зависит от используемого алгоритма поиска. Судя по результатам идентификации, наиболее предпочтительным выглядит алгоритм поточечного сравнения спектральных кривых, осуществляемый по принципу поиска минимального значения функции абсолютного расстояния между точками (Absolute Value). Процент нераспознанных соединений, рассчитанный относительно суммы результатов, полученных по всем алгоритмам библиотечного поиска, составляет в среднем 13%. Оказалось, что сложнее всего информационно-поисковой системе интерпретировать спектры О-метил-этилфторфосфоната, О-бутил-этилфторфосфоната, О-бутил-изопропилфторфосфоната.

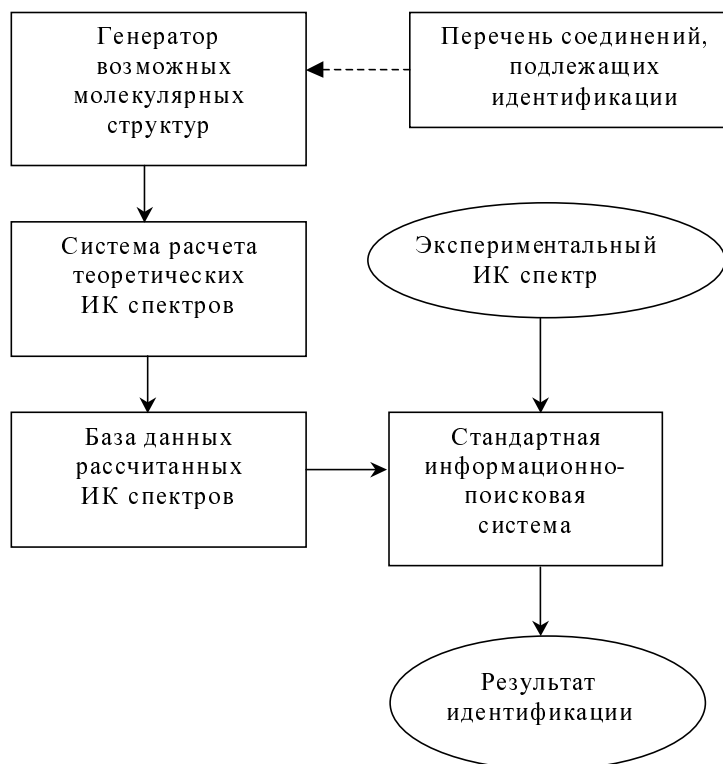


Рис. 1. Блок-схема алгоритма идентификации соединений с использованием банка данных расчетных ИК спектров

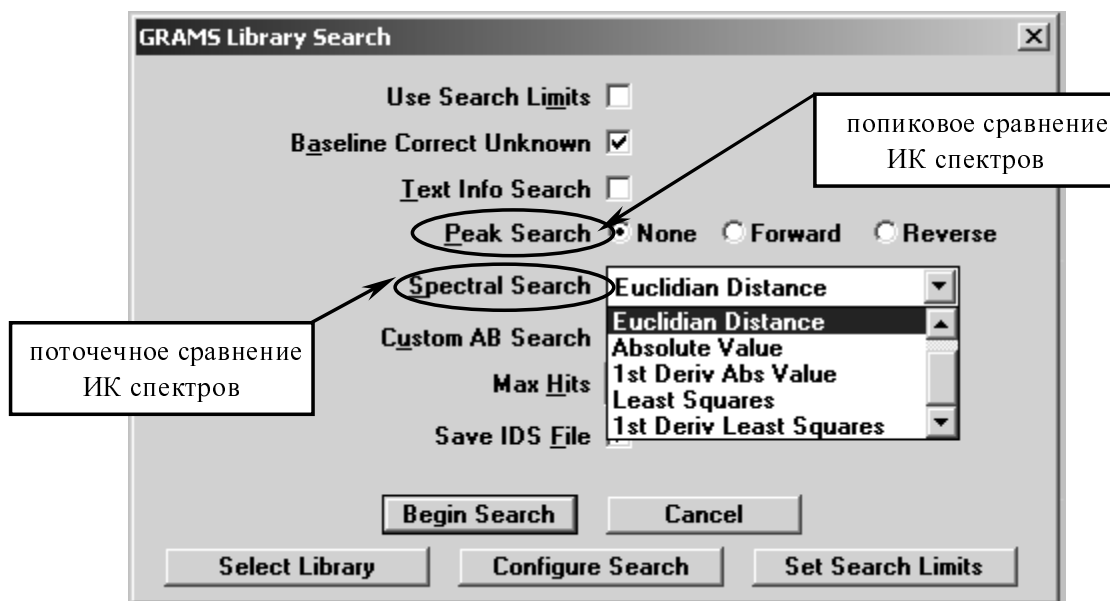


Рис. 2. Диалоговое окно конфигурации библиотечного поиска программного пакета GRAMS/386 v.2.00F

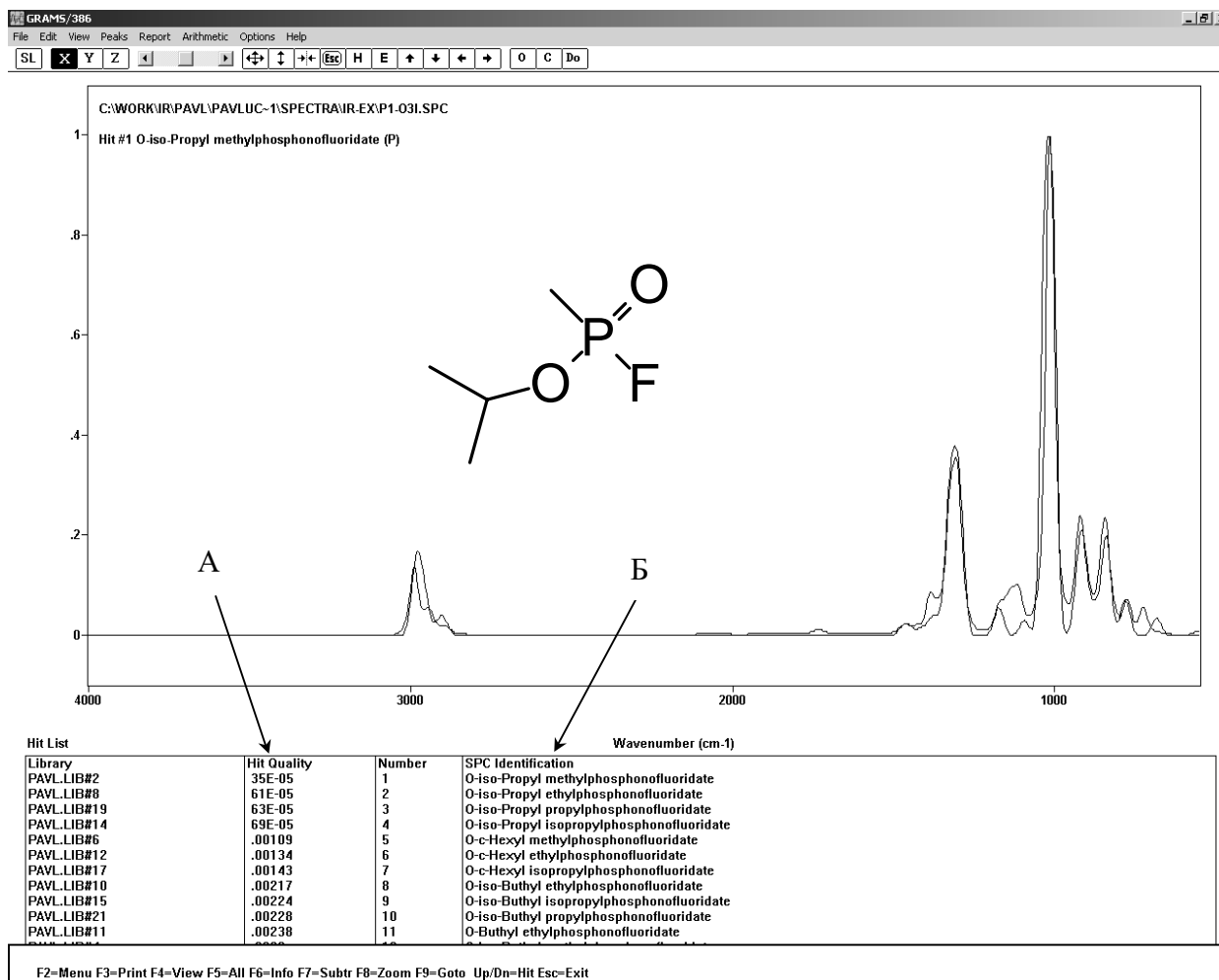


Рис. 3. Пример результата интерпретации экспериментального ИК спектра О-изопрпил-метилфторфосфоната с использованием библиотеки расчетных спектров в программном пакете GRAMS/386 v.2.00F.

А — качество совпадения экспериментального и расчетного ИК спектров, Б — результат интерпретации экспериментального ИК спектра

Таблица 2

Результаты идентификации О-алкил-алкилфторфосфонатов по экспериментальным спектрам с использованием библиотеки расчетных спектров

Соединение	NONE		Euclidian Distance			Absolute Value			1st Deriv Abs Value			Least Squares			1st Deriv Least Squares		
	F	R	N	F	R	N	F	R	N	F	R	N	F	R	N	F	R
О-Метил-метилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Изопропил-метилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Пропил-метилфторфосфонат	—	—	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Изобутил-метилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Бутил-метилфторфосфонат	да	да	—	—	—	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Циклогексил-метилфторфосфонат	—	—	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Метил-этилфторфосфонат	да	да	—	—	—	да	да	да	да	да	да	—	—	—	—	—	—
О-Изопропил-этилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Пропил-этилфторфосфонат	—	—	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Изобутил-этилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Бутил-этилфторфосфонат	да	да	—	—	—	да	да	да	—	—	—	—	—	—	да	да	да
О-Циклогексил-этилфторфосфонат	да	да	—	—	—	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Метил-изопропилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Изопропил-изопропилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Изобутил-изопропилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	—	—	—	—	—	—
О-Бутил-изопропилфторфосфонат	да	да	—	—	—	да	да	да	да	да	да	—	—	—	—	—	—
О-Циклогексил-изопропилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Метил-пропилфторфосфонат	да	да	да	—	—	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Изопропил-пропилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Пропил-пропилфторфосфонат	—	—	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Изобутил-пропилфторфосфонат	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да
О-Бутил-пропилфторфосфонат	да	да	—	—	—	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да	да

Условные обозначения:

**NONE** — алгоритм поточечного сравнения спектральных кривых отключен.

Алгоритмы поточечного сравнения спектральных кривых по принципу:

**Euclidian Distance** — поиск минимального значения функции эвклидова расстояния между точками;

**Absolute Value** — поиск минимального значения функции абсолютного расстояния между точками;

**1st Deriv Abs Value** — поиск минимального значения первой производной от функции абсолютного расстояния между точками;

**Least Squares** — поиск минимального значения функции наименьших квадратов расстояния между точками;

**1st Deriv Least Squares** — поиск минимального значения первой производной от функции наименьших квадратов расстояния между точками.

Алгоритмы попикового сравнения спектральных кривых:

**N** — алгоритм отключен; **F** — прямой алгоритм; **R** — обратный алгоритм.

да — экспериментальный спектр распознан по библиотеке расчетных спектров.

«—» — экспериментальный спектр не распознан по библиотеке расчетных спектров.

Прежде всего это связано с завышением относительной интенсивности полос поглощения в области валентных колебаний СН-связей в О-алкильном и алкилфторфосфонатном фрагментах молекулы ( $2700\text{--}3100\text{см}^{-1}$ ) в расчетных спектрах. Кроме того, необходимо отметить несколько более низкое разрешение пиков в расчетных ИК спектрах, что связано с завышенной шириной спектральных полос, принятой при построении расчетных спектров, что также могло повлиять на общие результаты интерпретации. Эти трудности, однако, успешно преодолеваются при использовании алгоритма Absolute Value.

### Заключение

Предложен подход к интерпретации экспериментальных ИК спектров высокотоксичных соединений структурного типа О-алкил-алкилфторфосфонатов, основанный на использовании библиотеки расчетных спектров в качестве банка данных информационно-поисковой системы. Данный подход обеспечивает возможность достоверного получения спектральных характеристик. Расчет спектров осуществляется путем фрагментарных вычислений неэмпирическими квантовохимическими методами. Использование сформированных таким образом банков ИК спектров при проведении химико-аналитического контроля позволяет решить задачу достоверной идентификации токсичных соединений.

\* \* \*

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 04-03-08074.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Конвенция о запрещении разработки, производства, накопления и применения химического оружия и о его уничтожении. GE.92-619266, Париж, 1993 г.
2. Франке З. Химия отравляющих веществ. Том 1. М.: Химия, 1973, 437 с.
3. Guelachvili G., Rao K.N. Handbook of Infrared Standards. London: Academic Press Inc., 1986, 852 p.
4. Dolphin D., Wich A. Tabulation of Infrared Spectral Data. New-York: Wiley & Sons, 1977, 549 p.
5. Socrates G. Infrared Characteristic Group Frequencies. Tables and Charts. New-York: Wiley & Sons. 1994, 59 p.
6. Вершинин В.И., Дерендяев Б.Г., Лебедев К.С. Компьютерная идентификация органических соединений. М.: Наука, 2002.
7. Heller S.R. Chem. Int., 1985, v. 13, № 6, p. 224–231.
8. Эляшберг М.Е. Успехи химии, 1999, т. 69, № 7, с. 579–604.
9. Грибов Л.А., Дементьев В.А. Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул. М.: Наука, 1981, 356 с.
10. Грибов Л.А., Дементьев В.А., Тодоровский А.Т. Интерпретированные колебательные спектры алканов, алкенов и производных бензола. М.: Наука, 1986, 496 с.
11. Мясоедов Б.Ф., Грибов Л.А., Павлючко А.И., Рыбальченко И.В. и др. Фрагментарные методы расчета ИК спектров фосфорорганических соединений. Ж. структурной химии, (в печати).
12. OPCW Central Analytical Database, PDF-OCAD v. 8, e-OCAD v. 6, Technical Secretariat of the Organisation for the Prohibition of Chemical Weapons, December 2004.
13. Recommended operating procedures for sampling and analysis in the verification of chemical disarmament. 1994 Edition. Ed. Marjatta Rautio. ISBN 951-724-008-2 Helsinki, 1994.
14. Benecke C., Grund R., Kerber A., Laue R., Wieland T. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 1995, v. 72, p. 404.
15. Molodtsov S.G. Commun. Math. Chem. (MATCH), 1998, v. 37, p. 157.
16. Grams 386. Operation Manual. Hewlett Packard. 1994, 365 p.