

ИЗ РАБОЧЕЙ ТЕТРАДИ
ИССЛЕДОВАТЕЛЯ

В статье рассматривается возможность использования молекулярных систем в качестве элементов компьютеров. Автор доказывает, что такие элементы, хотя и могут послужить основой для перехода от двоичной арифметики к более сложной, однако вряд ли приведут к созданию счетно-решающих устройств, конкурентных с кристаллическими. Тем не менее молекулярные системы могут оказаться чрезвычайно эффективными, когда необходимо переработать информацию, заведомо вводимую нечетким образом.

МОЛЕКУЛЫ КАК ИНФОРМАЦИОННЫЕ
ПРИЕМНО-ПРЕОБРАЗУЮЩИЕ СИСТЕМЫ

Л. А. Грибов

В последние десятилетия в литературе активно обсуждаются возможности использования в качестве элементной базы для построения компьютеров не кристаллических систем, а молекулярных [1]. Причина интереса к молекулярным объектам понятна. Известно, например, что молекулы обладают способностью к структурной изомеризации, которая стимулируется резонансным фотовоздействием. Предположим, что существует три такие изомерные формы. Тогда в одной и той же ячейке (в одном месте пространства) может быть записано три сигнала: 0 (первая изомерная форма), 1 (вторая) и 2 или -1 (третья). Поскольку все изомерные формы существенно различаются, например, по своему ИК- Или КР-спектру, то записанная информация может быть прочитана. Получаем устройство, способное оперировать не двоичным, а троичным кодом. На преимущества компьютеров, оперирующих с троичным кодом, указывал еще А.Д. Сахаров [2], более того, в 50-е годы прошлого века троичный код использовался в ЭВМ "Сетунь".

Казалось бы, надо думать о том, как создать компьютеры с молекулярной элементной базой. Однако традиционные компьютеры используют движения электронов, перемещающиеся во много раз быстрее, чем тяжелые ядра при соверше-

нии изомер-изомерных структурных преобразований. Поэтому весьма сомнительно, что даже на основе многомерной арифметики удалось бы создать компьютерную базу, по своему быстродействию конкурентную с современной кристаллической. Существуют ли преимущества у "молекулярных" компьютеров и какие?

Молекулы и нечеткая информация. Обратимся вначале к некоторым особенностям биологического растительного или животного мира. Он непрерывно в разной форме получает из внешней среды информацию и преобразует ее так, что в организме происходят нужные весьма разнообразные реакции. В живых организмах нет ни проводов, ни кристаллических образований, подобных тем, что имеются в компьютерах, и хотя постоянно говорят об аналогиях в работе мозга человека и компьютера, забывают о том, что человек плохо и медленно вычисляет, однако мгновенно справляется с образными задачами. У компьютера же все наоборот.

Обратим внимание еще на одну важнейшую особенность - на детерминированность. Она не абсолютна, а как бы размазана в очень малых пределах. Природа не терпит абсолютного порядка, а человек, создавая компьютер, как раз к такому порядку стремится. Даже очень небольшой разброс в конструкции и свойствах чипов приведет к тому, что компьютер не будет работать, а молекулярная преобразующая информация система функционирует, и весьма эффективно. Более того, как мы увидим ниже, именно небольшой беспорядок необходим для того, чтобы молекулярные приемно-преобразующие устройства действовали эффективно. В чем же дело? Попробуем ответить на этот вопрос.

Вспомним прежде всего, что в математике имеются лишь два типа множеств (понятий): четкие и нечеткие. В свою очередь, и входная информация поставляется либо в четком, либо нечет-

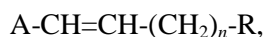


ГРИБОВ Лев Александрович - член-корреспондент РАН, заместитель директора Института геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского.

ком виде. Все традиционные компьютеры воспринимают и перерабатывают только четкую информацию. Даже в тех случаях, когда решаются задачи с использованием нечеткой логики, все равно нечеткость характеризуется определенно заданной функцией. Живые же организмы имеют дело с нечетко вводимой информацией. Это может быть меняющаяся в течение дня освещенность, соленость воды, pH среды, концентрация элементов в почве и др. Заранее охарактеризовать подобную информацию численно невозможно. При этом требуется, чтобы реакция системы была одной и той же вне зависимости от неопределенности и вариации исходного сигнала. Молекулярные приемно-преобразующие системы лучше всего приспособлены для решения подобных задач.

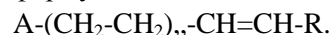
В качестве примера, поясняющего высказанную мысль, воспользуемся молекулярной структурой, преобразующей достаточно неопределенный световой сигнал в химический. Эта система состоит из акцептора световой энергии (светоколлектора), линии передачи энергии в реакционный центр на конце цепи и концевой атомной группы, способной к разложению и выделению свободной молекулы. Цепь содержит одну мигрирующую кратную (для определенности, двойную) связь. Система может существовать в виде многих изомерных форм, где одна отличается от другой расположением двойной связи в цепи. Каждой изомерной форме соответствует своя потенциальная "яма". Предположим, что нулевой колебательный уровень первого электронно-возбужденного состояния исходной изомерной формы по энергии равен высоковозбужденному обертоному колебательному уровню также первого электронно-возбужденного состояния второй формы. Допустим, что система в исходной изомерной форме поглотила квант световой энергии, достаточный для заселения нулевого уровня первого электронно-возбужденного состояния. В результате безызлучательного изомер-изомерного перехода будут возбуждены колебания большой амплитуды во втором изомере. Возбужденный уровень второго изомера может резонировать с уровнем третьего и т. д. Тогда колебания большой амплитуды будут передаваться от одного изомера к другому, что и обеспечивает миграцию двойной связи и энергии по цепи от поглощающего элемента системы А к концевой группе цепи. Переданный в конец цепи избыток энергии способен привести к реакции разложения.

Для наглядности (но не более того) примем следующую систему:



где А - светоакцепторная группа, R=COOH - кетонная группа.

Эта система за счет последовательного перемещения двойной связи C=C может перейти в изомерную форму:



В дальнейшем будем обозначать всю цепь в промежутке от светоакцептора А до кетонной группы R символом В. Светоакцепторной обычно является крупная плоская атомная группировка с сильно развитым сопряжением связей, например, порфириновая.

Представления о ходе реакции изомеризации и бимолекулярных реакций изложены детально в монографии [3]. Там доказано, что состояния, отвечающие всем изомерным формам молекулярной системы, включая и состояния первой стадии реакции разложения, когда, например, переносы протонов за счет колебаний большой амплитуды приводят к таким перераспределениям электронной плотности, при которых предельно ослабляются одни химические связи и образуются другие, могут быть математически объединены в общую энергетическую матрицу H. Объединяющими величинами являются недиагональные элементы матрицы H.

Если на такую "объединенную" систему с квазивырожденной парой уровней наложить зависящее от времени возмущение общего вида (от простой ступеньки до практически произвольного) и считать, что в начальный момент времени система находилась в состоянии $\Psi_{ev}^{(k)}$, то возникнут периодические переходы из состояния с функцией $\Psi_{ev}^{(k)}$ в состояние с функцией $\Psi_{ev}^{(n)}$. Эти переходы, совершаемые без изменения энергии ("вдоль вырожденного уровня") и являются изомер-изомерными или реакционными.

Миграция кратной связи возможна за счет больших колебаний (высокие обертоны) атомов скелетов цепей и переносов протонов в результате таких колебаний. В рассматриваемой модельной системе колебания большой амплитуды в цепи могут возбуждаться только тогда, когда нулевой колебательный уровень первого электронно-возбужденного состояния исходного изомера (ABR)^{*⁽¹⁾} резонирует с очень близким по энергии высоким колебательным уровнем электронно-возбужденного состояния другой изомерной формы, причем величина недиагонального матричного элемента достаточно велика, чтобы обеспечить быстрый процесс изомеризации. Причем изомер-изомерные переходы всегда локальны и являются электронно-колебательными и неадиабатическими.

Математическое моделирование показало: для того, чтобы исходная изомерная форма полностью "очистилась", а последняя (напомним, что это может быть и состояние первой фазы реакции разложения) заселилась, необходимо, чтобы

конечная "яма" была намного глубже исходной. Процесс идет в направлении уменьшения энергии. Наиболее глубокая конечная "яма" получится, очевидно, как раз для реакции разложения. Поэтому самым выгодным процессом передачи энергии является тот, который заканчивается такой реакцией. Значительная доля энергии затрачена при этом на отделение продуктов разложения от цепи.

Очень важно, что результат не зависит от длины цепи: полное заселение переносится на конец цепи. Время прохождения процесса зависит от длины цепи. Зависит оно и от вероятностей переходов из одной "ямы" в другую, в частности, от соотношения их глубин.

Для возвращения системы к исходному состоянию надо, чтобы на конце ее после реакции разложения произошла реакция присоединения. В рассмотренном нами примере $A-(CH=CH)-(CH_2)_n-R$, ($R=COOH$) возможна реакция декарбоксилирования с выделением CO_2 . Ее механизм рассмотрен в [3].

В результате на конце цепи образуется группа $-CH=CH_2$. Если теперь принять, что эта группа соединена с резервуаром, содержащим молекулы H_2O , O_2 , CO , то вполне может произойти восстановление концевой структуры $-CH=CH-COOH$.

В случае, когда при реакции разложения общая энергия системы резко падает (на языке потенциальных ям это означает, что система переходит в состояние с очень глубокой ямой), процесс всегда развивается в одном направлении и первоначальная заселенность соответствующего уровня энергии первого изомера целиком переходит в заселенность состояния реакции с выделением CO_2 . При этом необязательно "ямам" промежуточных изомерных форм идти в порядке увеличения глубин. Они могут "прыгать". Важно, чтобы различия были не очень сильными, это наблюдается в изомерах с неодинаковым расположением двойной связи в цепи. Необходимо также, выполнение следующего условия: исходная "яма" первого изомера должна быть значительно менее глубокой, чем "яма" реакционного состояния.

На рис. 1 показана последовательность отвечающих разным изомерам "ям", а на рис. 2 демонстрируется процесс "перекачки" заселенностей в цепи из десяти изомерных форм, включая состояние реакции. Хорошо видно, что в результате вся исходная заселенность, а следовательно, и полученный запас энергии, переходят в конечную (реакционную) форму.

Таким образом, рассматриваемая модельная система способна принять сигнал в виде светового кванта, передать его в форме электронно-колебательного неадиабатического возмущения (вибронный механизм) на некоторое расстояние и преобразовать в химический сигнал с выделени-

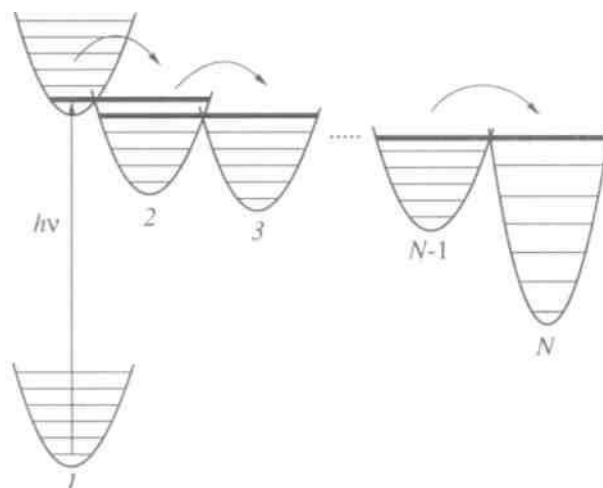


Рис. 1. Последовательность отвечающих изомерным структурам (1, 2, 3, ..., $N = 1$) потенциальных "ям" N -ая "яма" соответствует реакции разложения; нижняя "яма" слева относится к основному состоянию исходной структуры; все остальные – к электронно-возбужденным состояниям; — — резонирующие уровни; \rightarrow — последовательность изомерных преобразований

ем молекулы, ранее в системе отсутствовавшей. Происходит не просто перекодировка информации, а ее принципиальное изменение.

Даже достаточно крупная молекула в отсутствие межмолекулярных взаимодействий обладает ярко выраженным тонкоструктурным спектром, например, порфириновая группировка. Если бы была создана молекулярная система, содержащая большую совокупность абсолютно одинаковых молекул, то такая система поглощала бы свет

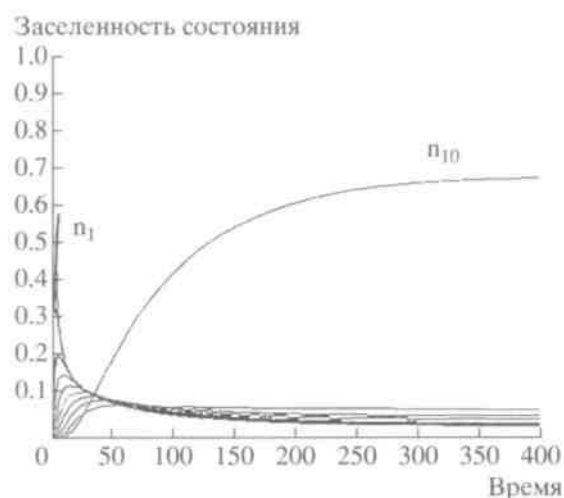


Рис. 2. Результаты решения модельной задачи для девяти "ям" примерно одинаковой глубины и "провалом" для десятой

Заселенность состояний вначале: $n_1 = 1, n_2, \dots, n_{10} = 0$. В конце процесса $n_{10} = 0.66; n_1 = 0.05$. Время переноса сигнала 400 у.е.



Рис. 3. Схема молекулярного приемно-преобразующего элемента

только в нескольких узких интервалах спектрального диапазона. КПД такой системы был бы низок. Представим себе, что все молекулы немного отличаются друг от друга: их структуры "размазаны". Такую совокупность молекул можно получить, если поместить их в жидкую среду. В этом случае поглощение будет наблюдаться уже в широком интервале: спектр имеет вид бесструктурных полос.

Если межмолекулярное взаимодействие слабо меняет структуру молекулы, то какой бы квант света или группа квантов с энергиями достаточно широкого диапазона ни попали бы в систему, она все равно отреагирует единственным образом - выделит молекулу CO_2 . Другими словами, рассматриваемая система будет реагировать на световой сигнал с произвольным заранее не определенным спектральным распределением, лишь бы это распределение хотя бы частично перекрывало область собственного поглощения молекулярной системы. Это означает, что система приобретает способность воспринимать нечеткую информацию, выдавая единственный четкий сигнал о поступлении данной информации.

Вернемся к сделанному выше замечанию о том, что природные биологические объекты, с одной стороны, детерминированы, а, с другой, слегка "размазаны". Единого порядка нет. Если обратиться к молекулярным объектам, то детерминированность будет определяться молекулярной структурой системы, а "размазанность" - возможностью при сравнительно слабом воздействии менять эту структуру. Для осуществления

такой размазанности нужны достаточно мягкие" упругие объекты. Ими и являются молекулы. Кристаллические структуры к данному случаю не подходят.

Итак, молекулярные системы обладают свойствами, во-первых, принимать внешнюю информацию в разнообразной форме, во-вторых, передавать ее, предварительно преобразовав, в другую область пространства, в-третьих, благодаря своей способности при межмолекулярном воздействии находиться в несколько разных состояниях, системы могут воспринимать нечеткую информацию. Общую схему молекулярного приемно-преобразующего устройства можно представить следующим образом (см. рис. 3). Такой элемент может постоянно работать в условиях открытой системы, то есть при постоянной подаче регенерирующего реагента, восстанавливающего в результате химической реакции структуру концевой группировки.

Подводя итог, можно сделать вывод: генеральным направлением создания компьютеров на молекулах вряд ли может явиться повторение принципов, отработанных в существующих "кристаллических" машинах. Преимущества "молекулярных" компьютеров заключается в способности их к восприятию и переработке нечеткой информации, и именно в этом направлении целесообразно вести поиски. Причем создать универсальные устройства, по-видимому, не удастся. Как и в природе, они, скорее всего, будут узко специализированными, но очень полезными для решения некоторых конкретных проблем.

Внутримолекулярные процессы и логические преобразования. Внутримолекулярные процессы могут быть интерпретированы в терминах логических уравнений разного вида, вводимых в булевой алгебре. В качестве примера рассмотрим фотохимические реакции изомеризации, когда входным сигналом служит электромагнитное облучение, или любые другие действия в форме химических реакций присоединения, замещения и др. Просто "фотохимическая картина" более наглядна.

Чтобы все дальнейшие рассуждения были понятными, напомним, что в существующих построениях на базе кристаллических элементов элементарной преобразующей сигнал ячейкой является комбинация двух транзисторов. Она может менять свое состояние под действием одиночного импульса напряжения. Таких состояний может быть только два, условно обозначаемых 0 и 1. Переход элемента из одного состояния в другое совершается при наложении входного импульса. В терминах формальной логики можно сказать, что входной импульс имплицитно подразумевает переход элементарной ячейки из состояния 0 в состояние 1.

Любая молекула обладает значительно большими возможностями. Например, она может по-

глощать свет при многих длинах волн. Поглощение легко регистрировать. Оно выражается в снижении уровня регистрируемого всеволновым приемником излучения сигнала при воздействии на расположенную перед ним кювету с веществом электромагнитной волной подходящей длины. Предположим, что облучающий сигнал содержит волны с частотами $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ и ω_4 (все или часть), при действии каждой из которых происходит поглощение энергии молекулой и, следовательно, появление одного и того же отклика (А), размещенного за поглощающим объектом приемника.

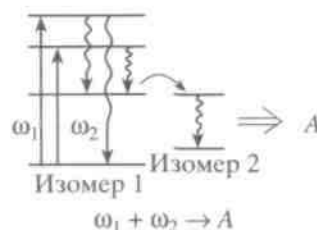
Если никакого диспергирующего устройства нет, то наблюдаемые результаты могут быть записаны в форме логических уравнений, имеющих вид:

$$\begin{aligned} \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 &\longrightarrow A \\ \omega_i + \omega_j + \omega_k &\longrightarrow A \text{ (8 уравнений)} \\ \omega_i + \omega_j &\longrightarrow A \text{ (6 уравнений)} \\ \omega_i &\longrightarrow A \text{ (4 уравнения)} \end{aligned}$$

Здесь знак плюс означает логическую операцию дизъюнкции, а стрелка – операцию импликации. Допустим, что возможно поглощение только четырех длин волн, тогда получим, что поглощающая совокупность молекул может отреагировать одинаковым образом (приемник показывает снижение падающего на него светового потока) на 19 различных по составу сигналов. Разнообразие воспринимаемых сигналов молекулярными приемниками информации резко увеличивается по сравнению с кристаллической ячейкой. В этом громадное преимущество первых. Но, к сожалению, описанный способ получения и преобразования информации не является селективным и не отличает состав одного сигнала от другого. Кроме того, невозможны прием и запись информации в рамках одной и той же системы, так как после поглощения света система немедленно возвращается к исходному состоянию. Молекулярный объект может, однако, не только принимать и преобразовывать информацию, но и записывать ее, когда он способен к структурной фотоизомеризации.

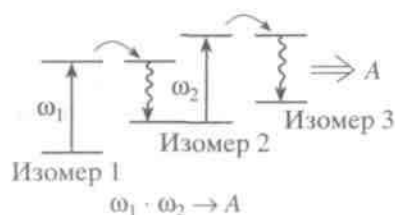
Рассмотрим в качестве примера систему, обладающую пятью уровнями энергии (рис. 4, а). Пусть возможны переходы с поглощением электромагнитных волн с частотами ω_1, ω_2 и ω_3 . В результате “высвечивания” заполняемых при поглощении возбужденных уровней энергии заселяется уровень, когда может наблюдаться резонанс с уровнем энергии другого изомера и безызлучательный переход в новое изомерное состояние. Если уровень этого второго изомера будет тоже возбужденным, то система может перейти в устойчивое изомерное состояние второго изомера. Результат воздействия внешнего сигнала будет “записан”.

а
Дизъюнкция (логическое сложение) и импликация



$\omega_1 + \omega_2 \rightarrow A$
Сигнал А возникает при действии волн с частотами ω_1 , или ω_2 , или обеих вместе

б
Конъюнкция (логическое умножение) и импликация



$\omega_1 \cdot \omega_2 \rightarrow A$
Сигнал А возникает при действии обязательно пары волн с частотами ω_1 и ω_2

Рис. 4. Схематическое изображение фотопроцессов в молекуле, отвечающих логическим операциям

а – ↑ – переходы между уровнями; ~~~ – пути диссипации возбужденного уровня; ~~~ – пути диссипации возбужденного уровня; ~~~ – безызлучательный переход с образованием нового изомера; б – молекула при резонансном поглощении электромагнитной волны с частотой ω_1 переходит безызлучательно в состояние изомера № 2, а затем за счет резонансного поглощения волны с частотой $\omega_2 \neq \omega_1$ преобразуется в изомер № 3

Данный процесс отвечает логическому уравнению:

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 \longrightarrow A_2.$$

Символ A_2 означает появление устойчивого изомера № 2, что может быть обнаружено оптическим путем по характерному поглощению света.

Рассмотрим теперь систему, где за счет поглощения света с длиной волны ω_1 происходит заселение уровня энергии, при котором возможен безызлучательный переход изомера № 1 в изомерное состояние № 2. Предположим, что новое изомерное состояние за счет характерного поглощения электромагнитного излучения с частотой ω_2 перейдет в состояние № 3 (рис. 4, б), тогда логическая операция будет иметь следующий вид: $\omega_1 \omega_2 \rightarrow A_3$.

Точкой между символами ω_1 и ω_2 обозначается операция конъюнкции.

Допустим, что существует такая молекула, которая при поглощении электромагнитного излучения с длиной волны ω_1 способна перейти в изомерное состояние № 2, а при поглощении волны с

частотой ω_2 – в изомерное состояние № 3. При этом изомер № 2 не может поглотить излучение с частотой ω_1 , а изомер № 3 – с частотой ω_2 . Тогда после поглощения и фотоизомеризации система окажется нечувствительной либо к сигналу ω_1 , либо к ω_2 . Это отвечает высказыванию: “Входной сигнал содержит либо волну с частотой ω_1 , либо волну с частотой ω_2 ”, что описывается разделительной дизъюнкцией.

Продолжая рассуждения, можно убедиться, что любые одно- и многоступенчатые фотохимические процессы в молекулярных системах, способных к изомеризации и более сложным фотохимическим превращениям (реакции разложения), можно записать в терминах логических уравнений.

Мы рассмотрели поведение отдельных молекул. Если же собрать более сложную систему из нескольких решающих отдельные логические задачи элементарных молекулярных ячеек, то ее реакция на сложный входной сигнал описывается системой логических уравнений:

$$T(A, \omega) \longrightarrow \{R(A) \longrightarrow f(\omega)\},$$

где ω – множество составляющих входного сигнала, а A – множество ответов каждой элементарной молекулярной ячейки. Символом $T(A, \omega)$ обозначена булева функция, описывающая все взаимосвязи между частотами ω_i и ответами A_k . Комбинация ответов A_k представляется булевой функцией $R(A)$. Искомая функция обозначена как $f(\omega)$. Как известно, эффективным методом решения логических уравнений является метод изображающих чисел [4], который и применяется для решения соответствующих задач на обычных ЭВМ.

Примем во внимание, что с появлением конечных для описываемых выше процессов изомерных форм полная последовательность изомеризации может не заканчиваться. При фотовозбуждении молекулы часть полученной ею энергии может перейти в форму распространяющейся вдоль по одномерной цепи, входящей в состав молекулы, квазичастицы – виброна (электронно-колебательного возбуждения). С химической точки зрения, это процесс переноса вдоль цепи кратной связи или, например, атомов водорода. Такой процесс становится направленным, если на конце цепи есть группировка, которая при поглощении энергии виброна способна к разложению с выделением энергии и продуктов реакции в виде молекул. В результате сигнал переносится в область, далекую (по молекулярным меркам) от светопоглощающего центра (светоколлектора).

Если представить далее, что в крупной молекулярной системе есть несколько светоколлекторов и что продукты реакции образуются в одном месте пространства с помощью цепей, то между продуктами снова может произойти реакция. В

результате возникнет сигнал в форме новой молекулы или группы молекул, который и будет означать, что сработали все светоколлекторы. Это действие равносильно совокупному решению системы нескольких логических уравнений.

Для рассмотренных на рис. 4 процессов система логических уравнений может быть записана в виде:



Она имеет следующее решение:

$$f(\omega) = \omega_1 \omega_2 \omega_3 + \omega_1 \omega_2 \bar{\omega}_3.$$

Наблюдаемым событием является результат реакции A_4 . В данном случае он неоднозначен. Можно воспользоваться двумя фотопреобразователями, показанными на рис. 4б и осуществляющими операции:



В этом случае $f(\omega) = \omega_1 \omega_2 \omega_3$ и ответ единствен. Ясно, что и в других случаях подбор фотоустройств приведет к детальному распознаванию сигнала.

Пример фотоприемно-преобразующих молекулярных элементов выбран лишь для наглядности. Возбуждение определенных концевых функциональных групп с последующей сложной изомеризацией может идти не только за счет светопоглощения, но и за счет реакций присоединения. При этом крупная молекула может контактировать с несколькими функциональными группами. Результаты реакций и последующей изомеризации записываются в виде логических соотношений. Такое рассуждение позволяет понять, каким образом идет опознание одной сложной молекулы другой. Известно, что именно опознание лежит в основе всех биологических процессов на молекулярном уровне.

В результате получаем естественное физическое объяснение нескольких общих фактов:

- Разнородность вида входных и выходных сигналов в микромире делает рациональным построение соответствующих приемно-передающих и преобразующих устройств именно на молекулах, что связано с их разнообразием.

- В изучаемых внутримолекулярных процессах, связанных с приемом, передачей и преобразованием информации, определяющую роль должны играть процессы последовательной структурной изомеризации. Это объясняет факт громадного множества структурных изомеров. Изомеризация должна образовывать определенные последовательности, обеспечивающие перенос квазичастиц.

- Молекулярные системы, преобразующие входную информацию, должны содержать много функциональных элементов для восприятия совокупности признаков, характеризующих сложные объекты. Отсюда следует, что способность системы принимать и обрабатывать сложную информацию требует перехода от малых молекулярных систем к крупным - супрамолекулярным.

- Только молекулярные системы способны принимать и перерабатывать информацию, предоставляемую в нечетком виде.

- Чтобы система была способной постоянно принимать и преобразовывать информацию, требуется ее возвращение к исходному состоянию после совершения одного цикла. Это возможно при условии, что система является открытой - в нее постоянно вводятся восстанавливающие химические реагенты. Они обеспечивают легкость прохождения реакций восстановления. Другими словами, супрамолекулярные образования должны быть погружены в жидкости. Присутствие

жидкости необходимо для любых процессов в живой природе. Ясно поэтому, что объяснение сложных, лежащих в основе всех жизненных процессов и явлений на уровне замкнутых молекулярных моделей, не может быть адекватным природе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 01-03-32058).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Жан-Мари Лен.* Супрамолекулярная химия. Новосибирск: Наука, 1998.
2. *Сахаров А.Д.* Научные труды. ОТФ ФИАН. М.: Центрком. 1995.
3. *Грибов Л.А.* От теории спектров к теории химических превращений. М.: УРСС. 2001.
4. *Ледли Р.* Программирование и использование вычислительных машин. М.: Мир, 1966.