

УДК 539.193+541.62

## МОДЕРНИЗАЦИЯ СТАНДАРТНОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ: ПРОПИЛЕН И ЕГО ГАЛОИДОПРОИЗВОДНЫЕ

П. А. Л. Бачи-Том, В. И. Тюлин, В. К. Матвеев

(кафедра физической химии)

Проведено уточнение геометрической структуры и торсионного потенциала молекул пропилена и четырех его 2-галогидопроизводных с помощью нового варианта стандартного метода решения задачи внутреннего вращения.

При ограниченном числе экспериментальных данных для потенциала типа

$$2V(\varphi) = \sum V_n(1 - \cos n\varphi), \quad (1)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$  и  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , обычно используют так называемое «стандартное» решение, где величины  $V_n$  определяют с помощью решения уравнения Матье [1–5]. Для оценки величин  $V_{2n}$  используется процедура Гершбаха [3]. Однако указанный способ решения обладает рядом существенных недостатков [4, 5]. В работе [6] показано, что задачу поиска стандартного решения можно сформулировать так, чтобы характеристические параметры  $S$  находились не из отдельных торсионных частот  $\omega_{v,\sigma}$  [4, 5, 7], а из отношений для нескольких переходов. При этом значение  $S$  не будет зависеть в явном виде от параметров  $n$  и  $F$ , где  $F = h/8\pi^2 c I_{пр}$  ( $I_{пр}$  – приведенный момент инерции). Показано также, что процедура Гершбаха дает систематическую ошибку на каждом шаге итерации. Таким образом, в работе [6] предложен новый вариант решения задачи, при этом  $n$  заменяется на эффективную величину  $n^*$  через соотношения  $n^* = \gamma \cdot n$ , где коэффициент  $\gamma = \Phi(k = V_{2n}/V_n)$ , может быть вычислен из экспериментальных переходов. Это позволяет определить одновременно величины  $V_n$  и  $V_{2n}$ . Величина  $n^*$  теряет смысл числа симметрии потенциала в формуле (1) и превращает ее в уравнение

$$2V(\varphi) = \sum V_{n^*}(1 - \cos n^*\varphi), \quad (2)$$

где  $n^*$  является параметром. Функция (2) для  $n = 3$  эквивалентна формуле

$$2V(\varphi) = V_3(1 - \cos 3\varphi) + V_6(1 - \cos 6\varphi) \quad (3)$$

В работе [6] выведены соотношения между  $V_3^*$  и  $V_3$ :

$$V_3^* = N^* F S, \text{ где } N^* = (n^*/2)^2 \quad (4)$$

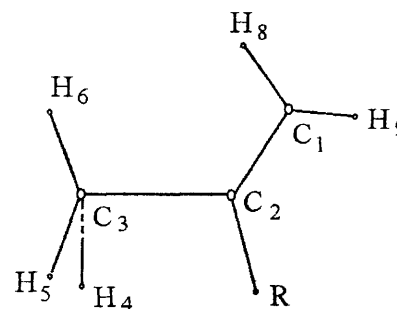
$$\Delta E_{v,\sigma} = N^* F \Delta b_{v,\sigma}, \quad (5)$$

$$V_3 = V_3^* \cdot \gamma^2 \frac{1}{1+4k} = V_3^* \frac{(1+16k)}{(1+4k)^2}, \quad (6)$$

$$\gamma^2 = \frac{(1+16k)}{(1+4k)} \quad (7)$$

Этот метод позволяет устранить многие недостатки «стандартного» метода. В работе [6] были приведены подтверждающие этот вывод расчеты для нескольких тестовых молекул.

Настоящая работа, расширяющая число изучаемых объектов, посвящена 2-галогид замещенным пропилену (рисунок).



Молекула пропилена

Пропилен и его производные исследованы разными экспериментальными методами [8–13], но до сих пор существуют разногласия в отношении определения геометрических параметров молекулы пропилена [8, 14, 15]. Например  $r_s$ -структура, полученная в работе [8], довольно плохо описывает экспериментальные моменты инерции. Кроме того, микроволновый спектр пропилена не исследовался на современном уровне, для него и для большого числа его галогидопроизводных вращательные постоянные вычислены, к сожалению, без учета постоянных центробежного искажения. Поскольку молекула пропилен служит базовой моделью для оптимизации геометрических параметров его галогидопроизводных, мы попытались провести дополнительную оптимизацию

Таблица 1

Экспериментальные и рассчитанные значения  $I_a$ ,  $I_b$ ,  $I_c$  и  $\Delta$  (в ат. ед. массы  $\cdot \text{Å}^2$ ) изотопозамещенных молекул пропилена

Тип изотопа	$I_a$	$I_b$	$I_c$	$\Delta^{**}$	$F$ , $\text{см}^{-1}$	Литература
$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2$	10,97 (10,92) 10,94	54,327 (54,311) 54,312	62,149 (62,131) 62,146	3,148 (3,1) 3,106	7,0109	8 (9) *
$\text{CH}_3^{13}\text{CH}=\text{CH}_2$	10,99 10,99	55,870 55,857	63,742 63,742	3,105 3,120	6,9871	8 *
$^{13}\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2$	11,16 11,14	54,334 54,323	62,356 62,357	3,138 3,106	6,9716	8 *
$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2^{13}\text{C}$	10,95 10,97	55,872 55,870	63,725 63,736	3,097 3,104	7,0105	8 *
$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHD}_{(8)}$	12,57 12,56	55,921 55,959	65,401 65,420	3,090 3,104	6,6806	8 *
$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CDH}_{(9)}$	11,01 11,01	59,140 59,130	67,027 67,039	3,123 3,101	7,0099	8 *
$\text{CD}_{(6)}\text{H}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	12,47 12,47	55,755 55,750	65,096 65,115	3,129 3,105	5,9570	8 *
$\text{CD}_{(4,5)}\text{H}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	11,68 11,67	58,382 58,321	65,499 65,480	4,563 4,515	5,6509	8 *
$\text{CH}_2\text{CD}=\text{CH}_2$	13,25 13,27	54,347 54,331	64,504 64,500	3,093 3,101	6,6432	8 *
$\text{CD}_2\text{CD}=\text{CD}_2$	18,36	70,48	82,64	6,202	3,7729	*

\* Настоящая работа

\*\* $\Delta_{\text{cp}} = I_c - (I_a + I_b) = 3\ 106$  (6), что точнее, чем  $\Delta_{\text{cp}} = 3\ 115$  (22) [8]

Таблица 2

Структурные параметры 2-галогидропроизводных пропилена (Å и град.)

R Параметр	H	F	Cl	Br	I
$\text{C}_2-\text{C}_1$	1,3360	1,3410	1,3440	1,3550	1,3445
$\text{C}_2-\text{C}_3$	1,5075	1,4980	1,5110	1,4858	1,4930
$\text{C}_2-\text{Hal}$	1,0900	1,3270	1,7275	1,8997	2,1100
$\text{C}_3-\text{H}_5$	1,0990	1,0910	1,0920	1,0910	1,0908
$\text{C}_3-\text{H}_6$	1,0990	1,0910	1,0920	1,0850	1,0870
$\text{C}_3-\text{H}_8$	1,0800	1,0900	1,0770	1,0810	1,0850
$\text{C}_3-\text{H}_9$	1,0910	1,0700	1,0860	1,0810	1,0850
$\angle \text{C}_2\text{C}_1\text{C}_3$	124,30	122,75	126,15	126,55	126,50
$\angle \text{C}_2\text{C}_1\text{Hal}$	116,70	117,25	117,35	116,80	117,32
$\angle \text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{4,5}$	109,00	109,60	109,50	109,10	109,10
$\angle \text{C}_1\text{C}_2\text{H}_6$	109,00	109,60	109,50	109,10	109,10
$\angle \text{C}_1\text{C}_3\text{H}_8$	121,50	120,50	119,50	120,50	120,54
$\angle \text{C}_1\text{C}_3\text{H}_9$	120,60	121,50	120,20	121,35	121,50

Таблица 3

Экспериментальные [8–13] и расчетные значения  $I_a$ ,  $I_b$ ,  $I_c$  и  $\Delta$  (в ат. ед. массы  $\cdot \text{Å}^2$ ) 2-галюидпроизводных пропилена

Изотопозамещенные пропилена	$I_a$	$I_b$	$I_c$	$\Delta$	$F$ (см <sup>-1</sup> )	Литература
CH <sub>3</sub> CH=CH <sub>2</sub>	10,970	54,327	62,149	3,150	–	8
	10,920	54,311	62,130	(3,16)	7,100	9
	10,938	54,312	62,146	3,103	7,0109	*
CH <sub>3</sub> CF=CH <sub>2</sub>	49,696	55,964	102,466	3,194	5,6576	*
CH <sub>3</sub> C <sup>35</sup> Cl=CH <sub>2</sub>	54,501	101,403	152,942	2,963	–	10
	54,506	101,404	152,941	2,973	–	11
	54,508	101,402	152,706	3,200	5,5059	*
CH <sub>3</sub> C <sup>37</sup> Cl=CH <sub>2</sub>	54,504	104,191	155,735	2,96	–	10
	54,511	104,192	155,733	2,97	–	11
	54,529	104,155	155,480	3,20	5,5019	*
CH <sub>3</sub> CCl=CHD(9)	59,360	101,659	158,051	2,96	–	11
	59,327	101,477	157 601	3,20	5,4954	*
CD <sub>3</sub> CCl=CH <sub>2</sub>	62,242	110,838	167 617	5,464	–	11
	61,903	112,071	167,572	6,402	2,865	*
CH <sub>3</sub> C <sup>79</sup> Br=CH <sub>2</sub>	54,622	161,100	212,775	2,947	5,6030	12
	54,610	161,169	212,565	3,210	5,4264	*
CH <sub>3</sub> C <sup>80</sup> Br=CH <sub>2</sub>	54,625	162,400	214,079	2,946	–	12
	54,610	161,825	213,220	3,210	5,426	*
CH <sub>3</sub> Cl=CH <sub>2</sub>	–	–	–	–	5,44350	13
	54,452	216,205	267,467	3,190	5,44094	*

\* Настоящая работа

Таблица 4

Сравнение крутильных частот ( $\omega_{\text{эсп}}$  и  $\omega_{\text{расч}}$ ) молекулы CH<sub>3</sub>CH=CH<sub>2</sub>

$\Delta v$	$\sigma$	$\omega_{\text{эсп}}$ [18]	$\omega_{\text{расч}}$	$\Delta\omega$	$\Delta b_{v,\sigma}$	$N^*$	$V_3^*$
0–1	A	191,0	191,35	–0,35	12,46990	2,2428	688,9
0–1	E	191,0	191,22	–0,22	12,13874	2,2443	689,4
1–2	A	169,8	169,56	–0,24	10,76405	2,2500	691,1
1–2	E	171,8	171,84	–0,04	10,90845	2,2464	690,0
2–3	A	158,6	158,32	0,28	10,05015	2,2510	691,4
S = 43,8				0,27		2,2469(5)	690,2(1)

Таблица 5

Сравнение крутильных частот ( $\omega_{\text{эксп}}$  и  $\omega_{\text{расч}}$ ) молекулы  $\text{CH}_3\text{CF}=\text{CH}_2$  ( $\text{см}^{-1}$ )  
при  $F = 5.6576$

$\Delta\nu$	$\sigma$	$\omega_{\text{эксп}}$ [18]	$\omega_{\text{расч}}$	$\Delta\omega$	$\Delta b_{\nu,\sigma}$	$N^*$	$V_3^*$
0-1	A	190,47	190,49	-0,02	15,2260	2,2243	830,90
0-1	E	190,47	190,48	-0,01	15,2253	2,2244	830,93
1-2	A	175,12	175,34	-0,22	14,0154	2,2217	829,92
1-2	E	175,12	175,55	-0,43	14,0320	2,2191	828,93
2-3	A	160,0	159,40	0,6	12,7410	2,2329	834,10
	E	156,6	156,58	0,02	12,5154	2,2249	831(2)
$S = 66,42$				0,32		2,2246(46)	8,309(1,7)

Таблица 6

Сравнение крутильных частот ( $\omega_{\text{эксп}}$  и  $\omega_{\text{расч}}$ ) дейтерозамещенных молекулы  $\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CH}_2$   
при  $F = 5.621$  ( $\text{см}^{-1}$ )

$\Delta\nu$	$\sigma$	$\omega_{\text{эксп}}$	$\omega_{\text{расч}}$	$\Delta\omega$	$\Delta b_{\nu,\sigma}$	$N^*$	$V_3^*$
0-1	A	195,5	195,5	0	18,3571	1,9356	1003,82
0-1	E	195,5	195,50	0	18,3570	1,9356	1003,82
1-2	A	183,2	183,19	0,01	17,2013	1,9357	1003,86
1-2	E	183,2	183,21	0,01	17,2028	1,9355	1003,77
$S = 94,3$				0,006		1,9356	1003,82

Таблица 7

Сравнение крутильных частот ( $\omega_{\text{эксп}}$  и  $\omega_{\text{расч}}$ ) дейтерозамещенных молекулы  $\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CHD}_{(\text{trans})}$  при  $F = 5.484$  ( $\text{см}^{-1}$ )

$\Delta\nu$	$\sigma$	$\omega_{\text{эксп}}$	$\omega_{\text{расч}}$	$\Delta\omega$	$\Delta b_{\nu,\sigma}$	$N^*$	$V_3^*$
0-1	A	196	196,0	0	18,9234	1,8887	1033,85
0-1	E	196	196,0	0	18,9234	1,8887	1033,85
1-2	A	184,1	184,1	0	17,7740	1,8887	1033,87
1-2	E	184,1	184,1	0	17,7749	1,8886	1033,82
$S = 99,8$				0		1,8887	1033,85

Таблица 8

Сравнение крутильных частот ( $\omega_{\text{экс}}$  и  $\omega_{\text{расч}}$ ) дейтерозамещенных молекулы  $\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CHD}_{(\text{cis})}$  при  $F = 5.489 \text{ (см}^{-1}\text{)}$

$\Delta\nu$	$\sigma$	$\omega_{\text{экс}}$	$\omega_{\text{расч}}$	$\Delta\omega$	$\Delta b_{\nu\sigma}$	$N^*$	$V_3^*$
0-1	A	195,5	194,8	0,7	19,5917	1,81795	1063,54
0-1	E	195,5	194,8	0,7	19,5916	1,81795	1063,54
1-2	A	184,1	183,5	0,6	18,4489	1,81798	1063,56
1-2	E	184,1	183,5	0,6	18,4495	1,81793	1063,53
$S = 106,6$				0,65		1,81795	1063,54

Таблица 9

Сравнение крутильных частот ( $\omega_{\text{экс}}$  и  $\omega_{\text{расч}}$ ) дейтерозамещенных молекулы  $\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CD}_2$  при  $F = 5.473 \text{ (см}^{-1}\text{)}$

$\Delta\nu$	$\sigma$	$\omega_{\text{экс}}$	$\omega_{\text{расч}}$	$\Delta\omega$	$\Delta b_{\nu\sigma}$	$N^*$	$V_3^*$
0-1	A	195,4	195,0	0,4	19,150	1,8644	1041,64
0-1	E	195,4	195,0	0,4	19,150	1,8644	1041,64
1-2	A	183,7	183,3	0,4	18,003	1,8644	1041,66
1-2	E	183,7	183,3	0,4	18,004	1,8643	1041,62
$S = 102,1$				0,4		1,8644	1041,64

Таблица 10

Сводка рассчитанных параметров  $S, F, V_3^*, V_3, V_6$  для дейтеропроизводных 2-хлорпропена

Молекула	$S$	$F$	$V_3^*$	$V_3$	$V_6$	$k = V_6/V_3$	$V_3$	$V_6$	Литература
$\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CH}_2$	94,26	5,621	1003,8	903,8	-10,1	-0,011	925	-17	[16]
							868	-	[17]
$\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CHD}_1$	99,82	5,484	1033,8	914,3	-11,6	-0,013	938	-19	[16]
$\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CHD}_c$	106,58	5,489	1063,5	908,8	-13,9	-0,015	943	-23	[16]
$\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CD}_2$	102,08	5,473	1041,6	909,3	-12,4	-0,014	938	-20	[16]
$\text{CD}_3\text{CCl}=\text{CD}_2$	183,02	2,836	997,5	893,6	-10,4	-0,012	849	5	[16]

Таблица 11

Сравнение крутильных частот молекулы  $\text{CH}_3\text{CBr}=\text{CH}_2$  при  $F = 5.2845 \text{ (см}^{-1}\text{)}$

$\Delta\nu$	$\sigma$	$\omega_{\text{экс}}[18]$	$\omega_{\text{расч}}$	$\Delta\omega$	$\Delta b_{\nu\sigma}$	$N^*$	$V_3^*$
0-1	A	197,12	197,03	0,09	17,78768	2,0424	984,3
0-1	E	197,12	197,02	0,1	17,78760	2,0424	984,4
1-2	A	183,90	184,15	-0,25	16,62488	2,0387	982,6
1-2	E	183,90	184,15	-0,25	16,62724	2,0387	982,5
2-3	A	169,90	169,75	0,16	15,32499	2,0433	984,8
2-3	E	169,90	169,30	0,16	15,28458	2,0433	984,8
$S = 88,8$				0,18		2,0418(20)	983,9(1)

Таблица 12

Сравнение крутильных частот молекулы  $\text{CH}_3\text{Cl}=\text{CH}_2$  при  $F = 5.2845$  ( $\text{см}^{-1}$ )

$\Delta \nu$	$\sigma$	$\omega_{\text{эксп}}[18]$	$\omega_{\text{расч}}$	$\Delta\omega$	$\Delta b_{\nu\sigma}$	$N^*$	$V_3^*$
0-1	A	196 84	196 86	-0 02	16 10704	2 2461	901 38
0-1	E	196 84	196 86	-0 02	16 10671	2 2461	901 39
1-2	A	182 38	182 32	0 06	14 91702	2 2471	901 79
1-2	E	182 38	182 42	-0 04	14 92564	2 2458	901 27
2-3	A	166 39	166 42	-0 03	13 61648	2 2459	901 30
2-3	E	164 91	164 87	0 04	13 48915	2 2469	901 72
$S = 73 76$				0 04		2 2463(6)	901 5(2)

Таблица 13

Параметры  $V_3$  и  $V_6$  галоидпроизводных пропилена ( $\text{см}^{-1}$ )

Молекула	$S$	$F$	$n^*$	$V_3^*$	$V_3$	$V_6$	$K$	$V_3$	$V_6$	Лит.
$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2$	43,82	7,0109	2,9979	690,2	689,5	-0,1	-0,0004	689	-	[15]
								692	0	[19]
								694	-14	[20]
								711	-16	[4]
								713	-22	[21]
								721	-35	[22]
								729	-37	[23]
								685	-	[24]
$\text{CH}_3\text{CF}=\text{CH}_2$	66,42	5,6576	2,9740	831	821,4	-1,2	-0,0014	819	-0,9	[18]
								823	-3,1	[18]
								816	-5,5	[25]
								793	-1,9	[18]
$\text{CH}_3\text{CCl}=\text{CH}_2$	94,26	5,621	2,7825	1003,8	903,8	-10,1	-0,011	934	0	[10]
								928	-16	[18]
								925	-17	[16]
								868	-	[17]
$\text{CH}_3\text{CBr}=\text{CH}_2$	88,83	5,2845	2,895	983,9	937,5	-0,2	-0,0056	925(23)	-17	[12]
								928,1	-12	[18,23]
								942,17	-	[17]
$\text{CH}_3\text{Cl}=\text{CH}_2$	73,76	5,441	2,9976	901,5	900,5(2)	-0,1	-0,00014	905	0	[13]
								894	2	[18]

геометрии молекулы пропилена по соответствующим моментам инерции [8]

В табл 1, 2 приведены экспериментальные [8, 9] и рассчитанные значения  $I_a$ ,  $I_b$  и  $I_c$  для некоторых изотопозамещенных пропиленов. Нетрудно видеть, что полученные нами данные находятся в хорошем согласии с экспериментальными, и новая структура значительно лучше описывает их для всех исследованных изотопов молекулы пропилена

Геометрические параметры всех обсуждаемых молекул приведены в табл 2, откуда видно, что существует явная закономерность в их изменении

В табл 3 приведены экспериментальные и рассчитанные моменты инерции для галогенпроизводных пропиленов. Уточнение структурных параметров проводили с учетом максимальных значений производных для каждого из варьируемых параметров. Нами получено лучшее, чем в предыдущих работах, согласие между ними [10–13]

Рассмотрим кратко результаты применения нового метода (табл 4, 5). Для молекулы 2-фторпропена (табл 5) согласие между  $\omega_{\text{экс}}^*$  и  $\omega_{\text{расч}}^*$  весьма точное, и величины  $n^*$  и  $V_3^*$  практически одинаковы для всех переходов. Отметим, что  $V_3^*$  вычисляется без учета  $F$

Молекула 2-хлорпропиленов имеет особое значение среди галогенпроизводных пропиленов, поскольку для нее известны экспериментальные значения нескольких дейтерированных производных [16, 17]. Эти данные позволяют значительно лучше подогнать геометрическую структуру

(табл 2, 3). При этом значения величины  $F$  также будут более точными. Результаты решения задачи для основного изотопического соединения приведены в табл 6. В табл 7–9 приведены результаты решения этой задачи для всех дейтерозамещенных видов этой молекулы. Получается хорошее согласие между  $\omega_{\text{экс}}^*$  [16] и  $\omega_{\text{расч}}^*$ . В табл 10 приведена полная сводка рассчитанных параметров для всех дейтеропроизводных 2-хлорпропиленов

Для молекулы 2-бромпропиленов получена новая структура и приведено новое решение задачи (табл 11). Здесь результаты также более благоприятные, чем в работах [12, 17, 18, 23]. В табл 12 приведены результаты решения для молекулы 2-иодпропиленов (в этом случае экспериментальные частоты воспроизводятся с точностью  $\pm 0,18 \text{ см}^{-1}$  [18])

Рассчитанные по формулам (4) – (6) значения параметров  $V_3$  и  $V_6$  для галогенпроизводных пропиленов приведены в табл 13, из которой видно, что величина  $V_6$ , как правило, имеет отрицательное значение, и  $k = V_6 / V_3$  изменяется в довольно узких пределах. Величина  $V_3$  для дейтерозамещенных молекул совпадает в пределах экспериментальных ошибок. Таким образом, настоящая работа показывает преимущества предложенного метода, главным достоинством которого является простота расчетов при использовании «обобщенных» таблиц уравнения Матъе [26]

Авторы благодарят А. А. Локшина и А. В. Абраменкова за обсуждение результатов и помощь в работе

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Herschbach D R. Tables for internal Rotation // Harvard, 1957
- Internal rotation in molecules / Ed. A. Orville-Thomas L. 1974
- Herschbach D R. // J. Chem. Phys. 1959. **31**. P. 761
- Fateley W G. Miller F A. // Spectrochim. Acta. 1961. **17**. P. 761
- Fateley W G. Miller F A. // Spectrochim. Acta. 1963. **19**. P. 611
- Тюлин В. И. Бачи-Том П. А. Л. Матвеев В. К. // Изв. Акад. наук. 1999. № 2. С. 239
- Lewis J D. Malloy T B. Chao T H. Laane J. // J. Mol. Struct. 1972. **12**. P. 427
- Lide D R. Christensen D. // J. Chem. Phys. 1961. **35**. P. 761
- Hirota E. // J. Chem. Phys. 1966. **45**. P. 761
- Unland M L. Weiss U. Flygare W H. // J. Chem. Phys. 1965. **42**. P. 2138
- Good W. Conan R J Jr. Bauder A. Gunthard H S. // J. Mol. Spectr. 1972. **41**. P. 381
- Benz H P. Bauder A. Gunthard H S. // J. Mol. Spectrosc. 1966. **21**. P. 165
- Groner P. Bauder A. // J. Mol. Spectrosc. 1979. **74**. P. 259
- Ma B. Allinger N L. // J. Mol. Struct. 1997. **414**. P. 395
- Goodman L. Leszczynski J. Kundu T. // J. Am. Chem. Soc. 1993. **115**. P. 11991
- Hunziker H. Gunthard H S. // Spectrochim. Acta. 1965. **21**. P. 51
- London L H. Miller K D. // J. Mol. Struct. 1968. **2**. P. 493
- Bell S. Gurgis G A. Fanning A R. Durig J R. // J. Mol. Struct. 1988. **178**. P. 63
- Lide D R. Mann D E. // J. Chem. Phys. 1958. **27**. P. 868
- Durig J R. Gurgis G A. Bell S. // J. Chem. Phys. 1989. **93**. P. 3487
- Miller K D. De Meo A R. Smith D R. London L H. // J. Chem. Phys. 1967. **47**. P. 2609
- Engeln R. Reuss J. // Chem. Phys. 1991. **156**. P. 215
- Mellor W E. Lee A R. Kalořas T M. // J. Mol. Spectrosc. 1997. **186**. P. 189
- Wiberg B. Martin E. // J. Amer. Chem. Soc. 1985. **107**. P. 5035
- Pierce L. O'Reilly J M. // J. Mol. Spectrosc. 1959. **3**. P. 536
- Тюлин В. И. Абраменков А. В. Бачи-Том П. А. Л. Матвеев В. К. «Обобщенные» Таблицы решения уравнения Матъе. ВИНТИ. 1999
- Gordy W. Cook R. Microwave Molecular Spectra. L., 1970. P. 532

Поступила в редакцию 14.04.98