

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 535.338.41+539.193

ВЫЧИСЛЕНИЕ РАВНОВЕСНОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ  $\text{H}_2\text{O}_2$  И УТОЧНЕНИЕ ЕЕ ТОРСИОННОГО ПОТЕНЦИАЛА

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

(кафедра физической химии)

Приведен критический обзор последних теоретических и экспериментальных работ, посвященных построению потенциальной функции внутреннего вращения (ПФВВ) молекулы  $\text{H}_2\text{O}_2$ . Предложен новый эмпирический подход к расчету равновесной конфигурации молекулы, в результате которого удалось существенно сблизить экспериментальные и расчетные значения уровней энергии и вращательных постоянных. Заново построен потенциал  $V(\varphi)$ ; релаксация геометрических параметров при изменении  $\varphi$  введена как усредненный результат квантовомеханических расчетов, равновесное значение торсионного угла  $\varphi = 115,16^\circ$ .

Молекула перекиси водорода является простейшим представителем молекул, обладающих внутренним вращением. Ее изучению посвящено большое количество как экспериментальных, так и теоретических работ [1 – 12]. Молекулу перекиси водорода изучали методом исследования ИК-спектров [5 – 8], методом электронографии [9] и нейтронографии [10]. Изучены ее микроволновые спектры [3], измерены дипольные моменты [11], проведен рентгено-структурный анализ [12] и т. д. Были определены вращательные постоянные для различных торсионных уровней и ангармонические значения колебательных частот. Потенциальная функция внутреннего вращения (ПФВВ) и приведенный момент

$$V(\varphi) = V_0 + \sum V_n \cos n\varphi, \quad (1)$$

$$\alpha(\varphi) = \alpha_0 + \sum \alpha_n \cos n\varphi, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots, \quad (2)$$

были представлены в виде зависимости от неплоского угла  $\varphi$ , где значение  $\varphi = 0$  соответствует *цис*-изомеру.

Первые обзорные работы, посвященные  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{D}_2\text{O}_2$  [13, 14], были подвергнуты серьезной критике [15, 19]. В [19] был отмечен целый ряд противоречий, прежде всего то, что углы  $\varphi$  для равновесной конфигурации и для минимума потенциальной энергии заметно различаются. В теоретических работах была сделана попытка найти геометрическую структуру, соответствующую минимуму потенциала [11, 12, 15, 17, 20 – 22, 32] (табл. 1). Однако теоретические и экспериментальные данные оказались несовместимыми, так как параметры равновесной структуры экспериментально не были определены.

Наилучшие теоретические расчеты выделить трудно, поскольку искомые квантовомеханические базисы, наиболее точно соответствующие данной молекуле, заранее

неизвестны. В последние годы были получены весьма точные данные как по вращательным постоянным, так и по торсионным уровням энергии для  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{D}_2\text{O}_2$  [23]. Однако главной трудностью остается отсутствие равновесной геометрической структуры, которая должна точно соответствовать вращательным постоянным всех торсионных уровней энергии [6, 15 – 19].

Таким образом, анализ экспериментальных и теоретических данных показывает, что работа по определению ПФВВ молекулы  $\text{H}_2\text{O}_2$  не завершена. По-прежнему существует серьезное противоречие: реальный минимум потенциала неизвестен и в разных работах он заметно различается по углу  $\varphi_{\text{мин}}$ .

Многие авторы [3, 5, 8, 9, 16, 24 – 25] пытались определить наиболее точные параметры равновесной структуры, но до сих пор полную  $r_e$ -структуру получить не удалось. Главная причина заключается в том, что не исследован изотопический образец  $\text{H}_2\text{O}_2$  с  $^{18}\text{O}$ . Тем не менее были сделаны приближенные оценки  $r_e$ - и  $r_s$ -структур [14], показывающие небольшое между ними расхождение. Таким образом, приближенные значения геометрических параметров более или менее известны:  $r_e(\text{O}-\text{O}) \cong 1,463 \pm 0,003 \text{ \AA}$  и  $r_e(\text{O}-\text{H}) \cong 0,964 \pm 0,005 \text{ \AA}$ , что соответствует лучшим расчетным значениям, но не соответствует высокой точности экспериментальных вращательных постоянных.

Хачкурузов с сотр. [1 – 3], пытался оценить равновесные вращательные постоянные  $A_e$ ,  $B_e$  и  $C_e$  с помощью величин  $\alpha_e$ , показывающих изменение вращательных постоянных для разных колебательных частот. Однако, во-первых, оценки величин  $\alpha_e$  оказались неточными и, во-вторых, для крутильной частоты  $\omega_4 \sim 314 \text{ см}^{-1}$  постоянная  $\alpha_e$

Таблица 1

Структурные параметры молекулы  $H_2O_2$  по данным квантовомеханических расчетов

Параметр	$R_{(O-O)}$	$r_{(O-H)}$	$\angle\alpha$	$\angle\phi$	Литер. ссылка
CC-PVDZ	1.4699	0.9714	98.85	117.95	[20]
CC-PVTZ	1.4579	0.9640	99.55	113.9	[20]
GVB+1+2 **	1.456	0.956	99.9	115.0	[15]
GVB+1+2+QC**	1.462	0.9640	99.60	113.4	[19]
4s3p1d/2s1p Basis D	1.390	0.945	102.8	114.9	[11]
RHF/ [4s3p1d/2s1p]	1.392	0.946	102.5	113.7	[22]
CCSD(T)	1.4525	0.9627	99.91	112.46	[17,20]
STO-3G Basis A	1.396 (1.443)*	1.001 (1.027)*	101.1 (98.8)*	125.3 (120.0)*	[32] [11]
3s2p/2s Basis B	1.46 (1.560)*	0.956 (0.988)*	102.3 (97.9)*	120.0 (120.0)*	[15] [11]
3s2p1d/2s Basis C	1.396 (1.466)*	0.946 (0.975)*	102.3 (98.7)*	116.3 (120.6)*	[33] [11]
3s2p1d/2s1p Basis D	1.396 (1.464)*	0.946 (0.967)*	102.3 (98.7)*	116.3 (119.4)*	[11]

\* Структурные параметры  $H_2O_2$  определены при использовании MP2.

\*\* 4s3p2d1f/3s2p (значения R и r даны в Å,  $\angle\alpha$  и  $\angle\phi$  – в градусах).

до сих пор не измерена. Такой подход не очень логичен, так как сложность потенциала  $V(\phi)$  показывает, что обычно применяемые оценки величин  $\alpha_i$  для  $\omega_4$  не дают правильного ответа. В последние годы для этой цели стали применять иные подходы: вращательные постоянные для различных  $v$ , пытались описывать эмпирической зависимостью от среднего значения  $\phi$ , которое определяли как среднее по волновым функциям для конкретного торсионного уровня. Однако эта попытка и не могла дать удовлетворительного результата, потому что параметры самого потенциала точно не известны.

Мы решили подойти к этой проблеме другим путем. Поскольку вращательные постоянные известны, мы попытались построить эти эмпирические зависимости не от угла  $\phi$ , а прямо от торсионных уровней энергии [6]. Построение соответствующих графиков показывает, что не наблюдается плавных зависимостей вращательных постоянных  $A_v$ ,  $B_v$ ,  $C_v$  (это относится ко всем значениям  $E_{n,v}$ ), поскольку из-за сложной формы потенциала  $V(\phi)$  существуют резонансные “выбросы” вращательных постоянных для отдельных расщепленных крутильных уровней (рис. 1 – 3).

Введение отдельных зависимостей для возмущенных подуровней позволило описать эмпирически все три фун-

кции  $A_v$ ,  $B_v$ ,  $C_v$  в зависимости от  $E_v$  с точностью более высокой, чем в работе [6] (табл. 2).

После вычисления  $A_e$ ,  $B_e$ ,  $C_e$  была проведена оптимизация геометрических параметров через производные от соответствующих моментов инерции. Полученные результаты представлены в табл. 3, 4. Расчет приведенных моментов был произведен в двух приближениях: “жесткий волчок” (геометрия не зависит от  $\phi$ ) и “нежесткий волчок” (имеет место зависимость от  $\phi$ ).

Оказалось, что в приближении “жесткий волчок” зависимость  $F(\phi)$  соответствует работам Хачкурузова и др. [1 – 4, 8, 24 – 25], что указывает на их недостаточность. Квантовомеханические (КМ) расчеты ясно показывают, что изменение геометрических параметров в зависимости от  $\phi$  значительно [18 – 22, 24]. В настоящее время ввести эту “нежесткость” довольно легко, поскольку проведены серьезные КМ-расчеты. Заметим, что хотя конкретные геометрические параметры, соответствующие разным  $\phi$ , в различных базисах заметно различаются [13, 17, 18], сами разности в точках “цис”, “транс” и “гош” практически совпадают (табл. 5).

Принимая усредненные разности этих изменений и учитывая работы [18, 19], мы построили соответствующие графики зависимости  $F$  от  $\theta$ .

Т а б л и ц а 2

Вращательные постоянные  $\text{H}_2\text{O}_2$  для различных уровней крутильного колебания (в  $\text{см}^{-1}$ )

Уровень		А			В			С		
$n$	$\tau$	эксперимент [6]	расчет [6]	расчет * (наст. раб.)	эксперимент [6]	расчет [6]	расчет * (наст. раб.)	эксперимент [6]	расчет [6]	расчет * (наст. раб.)
0	1,2	10.06941	10.06986	10.06941	0.873691	0.873626	0.873691	0.837861	0.837937	0.837861
0	3,4	10.05983	10.05897	10.05983	0.872014	0.871997	0.872014	0.840586	0.840553	0.840586
1	1,2	10.04866	10.04840	10.04866	0.876354	0.876285	0.876354	0.828433	0.828487	0.828433
1	3,4	10.00156	10.00246	10.00156	0.869069	0.869328	0.869128	0.838739	0.838508	0.838739
2	1,2	9.96725	9.96631	9.96725	0.86663	0.866870	0.866511	0.839120	0.838910	0.839120
2	3,4	9.92640	9.92730	9.92640	0.86295	0.862510	0.863037	0.84210**	0.842480	0.84210**
3	1,2	9.88970	9.8892	9.88970	0.85842	0.858530	0.858397	0.84475	0.844675	0.84475
3	3,4			(9.85573)			(0.85203)			(0.85257)

\*

А		В		С	
$Y_1 = (ab+cx^d)/(b+cx^d)$	a = 0.97317 b = 0.8213 c = 1.00701 d = -1.9075	$Y_1 = 1/(a+bx+cx^2)$	a = 1.1461 b = 0.0157 c = 0.12430	$Y_1 = (a+bx)/(1+cx+dx^2)$	a = 0.842515 b = -0.227313 c = -0.255258 d = -0.013748
$Y_2 = (ab+cx^d)/(b+cx^d)$	a = 0.98559 b = 2.8946 c = 1.00701 d = -3.8314	$Y_2 = a+bx+cx^2$	a = 0.872523 b = 0.005458 c = 0.008427	$Y_2 = a+bx+cx^2$	a = 0.842515 b = -0.023607 c = -0.022615

\*\*Вращательная структура торсионного уровня  $n = 2$  ( $\tau = 3, 4$ ) возмущена из-за Ферми-резонанса во вращательной структуре.

Таблица 3

Структурные параметры молекулы  $H_2O_2$  по данным экспериментальных исследований

Геометр. параметр	Литературная ссылка				
	[3]	[14]	[16]	[9]	Наст. работа
$R_{(O-O)}$ , Å	1.452 $\pm 0.004$	1.464 $\pm 0.003$	1.4644 $\pm 3.0035$	1.467	1.4629
$r_{(O-H)}$ , Å	0.965 $\pm 0.005$	0.964 $\pm 0.001$	0.965(ass)	0.965 $\pm 0.005$	0.9641
$\angle \alpha$ , град	100 $\pm 1.0$	99.4 $\pm 1.2$	94.44 $\pm 1.9$	98.5 $\pm 1.0$	99.43
$\angle \varphi$ , град	119.1 $\pm 1.8$	120.3 $\pm 0.7$	111.83 $\pm 6.8$	120.0 $\pm 2.0$	115.16

\*Значения  $R_{(O-O)}$  получены также методами нейтрографии [10] (1.47 Å) и рентгеноструктурного анализа [12] (1.49Å).  
Значения  $\angle \varphi$ , приведенные в работах [5] и [31], составляют 111,5 и 119,8° соответственно.

Таблица 4

Расчет вращательных постоянных  $H_2O_2$  по структурным параметрам и экспериментальные значения  $A_e$ ,  $B_e$ ,  $C_e$  ( $cm^{-1}$ )

Вращательная постоянная	Расчет из структурных данных	Расчет по эмпирическим кривым	$\Delta = \times 10^{-5}$
$A_e$	10.070092	10.070100	0.8
$B_e$	0.872519	0.872523	0.4
$C_e$	0.842516	0.842515	-0.1

Таблица 5

Релаксационные изменения геометрических параметров  $H_2O_2$  по данным квантовомеханических расчетов

Принято $\Delta_1$ и $\Delta_2$ от минимума	Геом.	"цис"	$\Delta_1$	минимум	$\Delta_2$	"транс"	Литер. ссылка
	R(O-O)		0.00872		0.01074		[13,17,18]
r(O-H)		0.00038		0.00098			
$\langle \alpha \rangle$		4.378		-1.418			
R(O-O)		1.47162		1.4629		1.47364	Наст. работа
r(O-H)		0.96448		0.9641		0.96508	
$\langle \alpha \rangle$		103.805		99.427		98.009	
$\langle \varphi \rangle$		0		115.16		180	

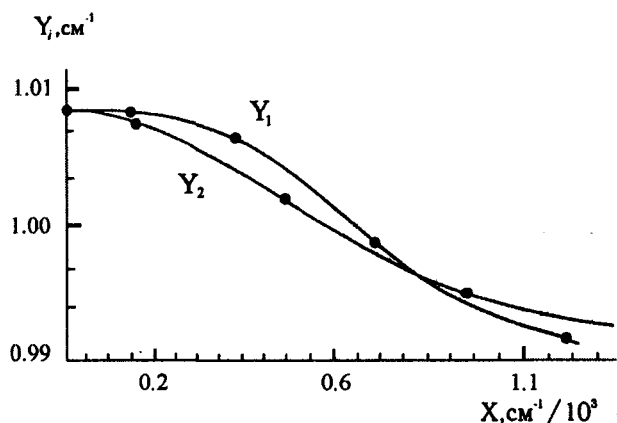


Рис. 1. Зависимость  $Y_i = A_n = \Phi_A(X)$ ,  $X = E_{n,r} + E_0$

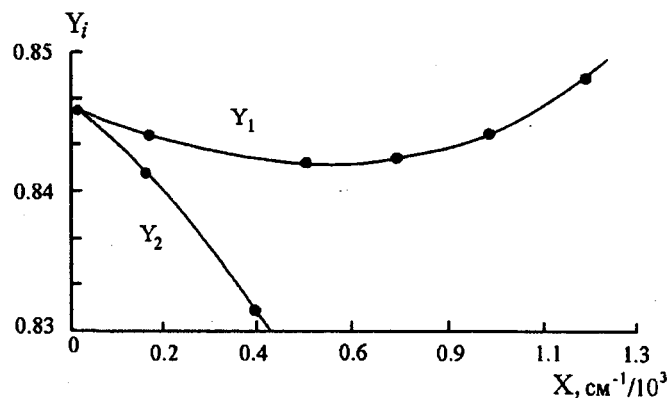


Рис. 3. Зависимость  $Y_i = C = \Phi_C(X)$ ,  $X = E_{n,r} + E_{0,r}$

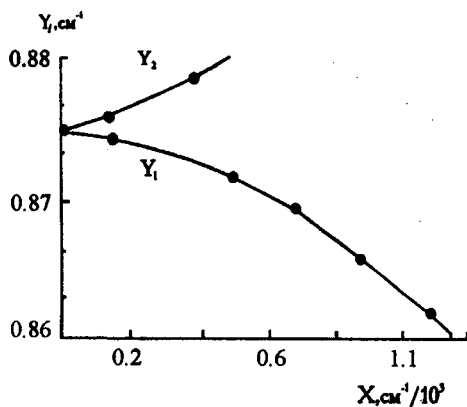


Рис. 2. Зависимость  $Y_i = B_n = \Phi_B(X)$ ,  $X = E_{n,r} + E_{0,0}$

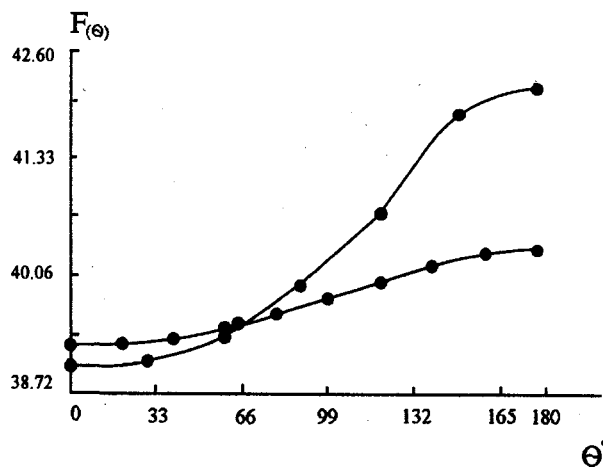


Рис. 4. Зависимость  $F(\theta) = F_0 + \sum F_k \cos \theta$  ( $cm^{-1}$ ): 1 - приближение жесткого волчка, 2 - приближение нежесткого волчка

Таблица 6

Учет релаксации структурных параметров  $\text{H}_2\text{O}_2$  и зависимость:  $F(\varphi) = F_0 + \sum F_k \cos k \varphi$ 

$\varphi$	0	30	60	90	115.16	120	150	180
$\theta$	180	150	120	90	64.84	20	30	0
R (O-O)	1.4721	1.4670	1.4616	1.4605	1.4629	1.4639	1.4699	1.4736
r (O-H)	0.9644	0.9643	0.9650	0.9647	0.9641	0.9639	0.9634	0.9631
$\angle\alpha$	103.807	103.357	101.687	100.327	99.427	99.147	98.287	98.007
$F(\theta)$ нежест.	42.2823	41.9322	40.8141	40.0026	39.5604	39.4702	39.170	39.0971
$F(\theta) = F_0 + \sum F_k \cos k \varphi \theta$								
$F_0$	$F_1$	$F_2$	$F_3$	$F_4$	$F_5$	$F_6$	$F_{\min}$	
40.3551	-1.5546	0.3640	-0.0829	0.0010	0.0449	-0.0205	39.5604	

Таблица 7

Уровни энергии торсионных колебаний молекулы  $\text{H}_2\text{O}_2$  ( $\text{cm}^{-1}$ )

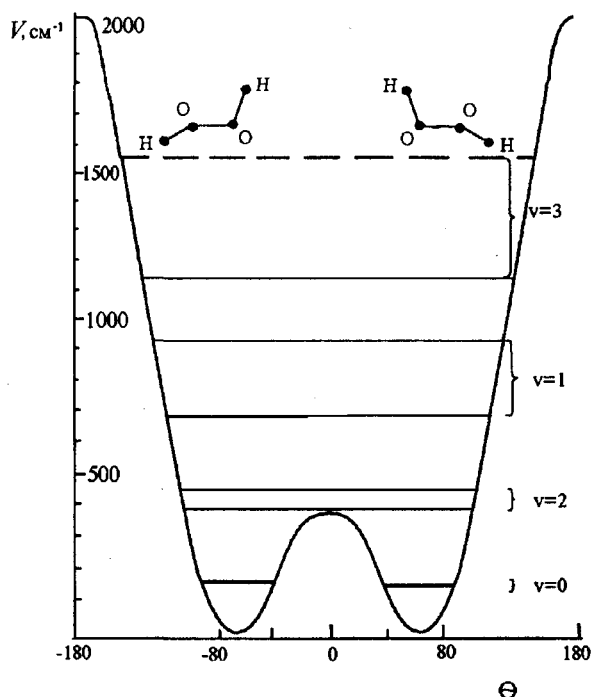
$n \backslash \tau$	0	1	2	3	$V$	Литература
1,2 3,4	172.58 184.017	427.130 543.473	742.323 948.700	1173.480	$V_{\text{транс}} = 387.07$ $V_{\text{инв}} = 2562.8$	[6]
1,2 3,4	169.807 180.869	423.986 540.329	739.179 945.551	1170.318 (1609.51)	$V_{\text{транс}} = 386.9$ $V_{\text{инв}} = 2141.5$	наст. работа

Таблица 8

Сравнение вычисленных и экспериментальных торсионных уровней ( $\text{cm}^{-1}$ )  $2V(\theta) = \sum V n(1 - \cos n \theta)$ 

$n$	$\tau$	$V_{\text{экс}}$	$V_{\text{расч}}$	$\Delta v$
0	1,2	0	0	0
0	3,4	11.437	11.475	0.038
1	1,2	254.550	254.569	-0.019
1	3,4	370.893	370.881	-0.012
2	1,2	569.743	569.701	-0.042
2	3,4	776.115	776.167	0.052
3	1,2	1000.882	1000.865	-0.017

Среднее  $\sigma = 0,033$


 Рис. 5. Зависимость  $V(\theta)$ 

Видно, что “нежесткость” молекулы  $\text{H}_2\text{O}_2$  резко изменяет кривую  $F(\theta)$  для жесткого волчка (рис. 4.):

$$F(\theta) = F_0 + \sum F_n \cos n \theta$$

Заметим, что наиболее близким к равновесной геометрии оказался базис  $\text{GVB} + 1 + 2 + \text{QC}$  [19], хотя и для него имеются еще небольшие различия в значении двугранного угла  $\phi$ .

Ранее ПФВВ была представлена в виде ряда Фурье уравнениями (1) и (2). Эта форма по ряду причин явно недостаточна, в настоящее время общая форма ПФВВ принята в другом виде

$$2V(\theta) = \sum V_n (1 - \cos n \theta), \text{ где } \theta = 180^\circ - \phi. \quad (4)$$

Такая форма потенциала возможна, конечно, только в том случае, когда на кривой потенциальной функции есть хотя бы одна симметричная точка. Здесь таких точек две: “цис” и “транс”. Ранее начальную точку потенциала выбирали в точке “цис” ( $\phi = 0^\circ$ ), от нее обычно отсчитывают неплоский угол. Мы принимаем начальное значение функции (4)  $\theta = 0^\circ$  ( $\phi = 180^\circ$ ), т.е. соответствующее транс-форме. Такой подход более удобен и для других молекул [26]. Дело в том, что нулевая точка  $V(\phi)$  по ряду соображений должна быть ближе к минимуму потенциала, но выбирать ее в самом минимуме для  $\text{H}_2\text{O}_2$  нельзя из-за асимметричной формы потенциальной ямы.

После того как “истинная” зависимость  $F(\phi)$  была найдена, и первые приближения искомого потенциала  $V(\phi)$  показали, что уровни легко подгоняются, были найдены коэффициенты:  $V_1, V_2, V_3$  и  $V_4$ . Стало ясно, что ранее по-

лученные потенциалы были недостаточно точны, так как теперь  $E_{0,0}$  – значение нулевого уровня ( $n = 0$ ) оказалось равным 169,81, а не 172,58  $\text{см}^{-1}$  [6] (табл. 7).

Эта поправка сдвигает все экспериментальные уровни. Были вновь построены графики зависимости  $A_v, B_v$  и  $C_v$  от  $E_{n,t}$  (рис. 1, 2, 3), вычислены новые значения  $A_e, B_e$  и  $C_e$  и вновь оптимизирована геометрия. Естественно, что это второе приближение по геометрии и вращательным постоянным отличается от предыдущего лишь незначительно. Это позволило подогнать расчетные уровни еще точнее (табл. 8) и получить более надежные значения  $V(\phi)$  (рис. 5) (табл. 9).

Как видно из табл. 1, 3, 4, нам удалось получить равновесную геометрию молекулы  $\text{H}_2\text{O}_2$ , которая, с одной стороны, соответствует расчетам серьезных теоретических работ, а с другой – экспериментальным значениям вращательных постоянных  $A_v, B_v$  и  $C_v$ . Таким образом, главное противоречие, существующее ранее, удалось, как нам кажется, снять.

Однако в настоящей работе не рассматривали другие экспериментальные данные для  $\text{H}_2\text{O}_2$  (дипольные моменты, интенсивность ИК-переходов и т. д.). Кроме того, в настоящей работе использовали уровни энергии только для  $\text{H}_2\text{O}_2$  (не для  $\text{D}_2\text{O}_2$ ).

Таким образом, впервые в современной стандартной форме ПФВВ получен достаточно точный потенциал  $V(\phi)$ , хорошо воспроизводящий одновременно и вращательные постоянные и крутильные уровни энергии.

Уточнено значение релаксации геометрических параметров при изменении угла  $\phi$ , как среднее по КМ-работам [15, 17, 19 – 22] (табл. 5).

Получено новое значение неплоского угла  $\phi$  для равновесной конфигурации  $\phi = 115,16^\circ$  ( $\theta = 64,84^\circ$ ), лучше совпадающее с минимумом потенциала  $\phi = 112,04^\circ$  ( $\theta = 68,0^\circ$ ). Однако расхождения этих величин еще заметны, они обусловлены, в основном, недостаточностью модели одномерного внутреннего вращения, реализованной в программе TORSIO [27], не учитывающей торсионно-вращательное взаимодействие.

Настоящее исследование показывает, что даже простейшие молекулы с внутренним вращением являются довольно сложными экспериментальными объектами, где многие стандартные методы и программы, а также простые модели оказываются недостаточными. Мы имеем в виду не только ряд обрабатываемых методик, но и множество теоретических работ, так как наиболее подходящие базисы в КМ-расчетах для конкретных молекул заранее неизвестны. Многие известные экспериментальные данные для  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{D}_2\text{O}_2$  (дипольные моменты, значения некоторых термодинамических характеристик [28 – 30], интенсивность ИК-спектров [5 – 7] и т.д.) не были задействованы, поэтому их учет должен неизбежно привести к дальнейшему усложнению модели.

В заключение авторы благодарят проф. Ю.А. Пентина за интерес к работе, а также А.В. Абраменкова за помощь в реализации новых программ.

Таблица 9

Торсионные потенциалы внутреннего вращения молекулы  $H_2O_2$ 

I. $V(\varphi) = V_0^* + \sum V_k^* \cos k\varphi$ (в $см^{-1}$ )								
$\angle\varphi_{мин}$	$V_0^*$	$V_1^*$	$V_2^*$	$V_3^*$	$V_4^*$	$V_{транс}$	$V_{цис}$	литература
119.1±2	821.46	1019.52	643.92	43.80	67.08	469.13	2595.8	[4]
111.5	787	993	636	44	—	386	2460	[5]
111.9±0.4	645.1 ±15.4	1036.97 ±23.1	657.53 ±5.2	50.89 ±3.30	2.524 ±0.83	387.07 ±0.20	2562.8 ± 6.00	[6]
111.9	802	1014	641	42	—	387	2499	[14]
111.8	—	1037.3	646.8	46.7	2.4	384.9 (7)	2487.6 (94)	[16]
111.5	797	888	532	77	—	371	2490	[25]
II. $2 V(\theta) = \sum V_n n(1 - \cos n\theta)$ (в $см^{-1}$ )								
$\theta_{мин}$	$V_1$	$V_2$	$V_3$	$V_4$	$V_5$	$V_6$	$V_{транс}$	$V_{цис}$
67.96 ( $\varphi=112.04$ )	2040.6 ±7.0	-1297.7 ±5.0	99.4 ±3.7	-9.6 ±2.4	1.5 ±0.7	-0.5 ±0.4	386.9 ±2.0	2141.5 ±10.0

Примечания. I.  $V(\varphi) = V_0^* + V_1^* \cos\varphi + V_2^* \cos 2\varphi + V_3^* \cos 3\varphi + \dots$  (а)

II.  $V(\varphi) = 1/2 \sum V_n (1 - \cos n\varphi) = 1/2 \sum V_n - 1/2 \sum V_n \cos n\varphi = 1/2 \sum V_n + 1/2 V_1 \cos\theta - 1/2 V_2 \cos 2\theta + 1/2 V_3 \cos 3\theta + \dots$  (б).

При сравнении уравнений (а) и (б), учитывая, что  $\theta = \pi - \varphi$ , получаем:

$V_0^* = 1/2 \sum V_n$ ,  $V_1^* = 1/2 V_1$ ,  $V_2^* = -1/2 V_2$ ,  $V_3^* = 1/2 V_3$  ...

Работа выполнена в рамках проекта *uni-02395* программы “Университеты России” (химия).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хачкурузов Г.А., Пржевальский И.Н. // Опт. и спектр. 1972. 33. С. 127.
2. Хачкурузов Г.А., Пржевальский И.Н. // Опт. и спектр. 1973. 35. С. 374.
3. Хачкурузов Г.А., Пржевальский И.Н. // Опт. и спектр. 1974. 36. С. 2, 175.
4. Хачкурузов Г.А., Пржевальский И.Н. // Опт. и спектр. 1976. 41. С. 323.
5. Hunt R.H., Leacock R.A., Peters C.W., Hecht K.T. // J. Chem. Phys. 1965. 42. С. 1931.
6. Flaud J.M., Camy-Peyret C., Johns W.C. // J. Chem. Phys. 1989. 91. С. 1504.
7. Perrin A., Flaud J.M., Camy-Peyret C. // J. Mol. Spectr. 1996. 176. С. 281.
8. Oelfke W.C., Gordy W. // J. Chem. Phys. 1969. 51. С. 5336.
9. Busing W.R., Levy H.A. // J. Chem. Phys. 1965. 42. С. 3054.
10. Giguere P.A., Schomaker V. // J. Am. Chem. Soc. 1943. 65. С. 2025.
11. Cremer D.J. // J. Chem. Phys. 1978. 69. С. 4440.
12. Abrahams S.C., Collin R.L., Lipscomb W.N. // Acta cryst. 1951. 4. С. 15.
13. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. // Под ред. В.П. Глушко. Т.1. М., 1962.
14. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. // Под ред. В.П. Глушко. Т.1. М., 1978.
15. Harding L.B. // J. Phys. Chem. 1989. 93. С. 8004.
16. Koput J. // J. Mol. Spectrosc. 1986. 115. С. 438.
17. Koput J. // Chem. Phys. Let. 1995. 236. С. 516.
18. Carpenter J.E., Weinhold F. // J. Phys. Chem. 1988. 92. С. 4295.
19. Carpenter J.E., Weinhold F. // J. Phys. Chem. 1988. 92. С. 4306.
20. Rendell A.P., Lee T.J. // J. Chem. Phys. 1994. 101. С. 400.
21. Dunning T.H.Jr., Winter I.V. // J. Chem. Phys. 1975. 63. С. 1847.
22. Dunning T.H.Jr. // J. Chem. Phys. 1989. 90. С. 1007.
23. Hunt R.H., Leacock R.A. // J. Chem. Phys. 1966. 45. С. 3141.
24. Scuseria G.E., Lee T.J. // J. Chem. Phys. 1990. 93. С. 5851.
25. Dahkis M.N., Lugovskii A.A., Dashevskii V.G. // Opt. Spectrosc. 1972. 3. С. 243.
26. Ефимов Д.Б., Матеев В.К., Тюлин В.И. // Вестн. Моск. ун-та. Сер.2, Химия. 1997. 38. С. 156.
27. Абраменков А.В. // ЖФХ. 1995. 69. С. 1048.
28. Giguere P.A. // J. Chem. Thermodyn. 1974. 6. С. 1013.
29. Giguere P.A., Liu J.D., Dugdale J.S., Morrison J.A. // Can. J. Chem. 1954. 32. С. 117.
30. Chao J., Wilhoit R.C., Zwolinski B.J. // J. Chem. Thermodyn. 1971. 3. С. 497.
31. Redington R.L., Olson W.B., Cross P.C. // J. Chem. Phys. 1962. 36. С. 1311.
32. Lathan W.A., Curtiss L.A., Helire W.J., Lisle J.B., Pople J.A. // Progr. Phys. Organ. Chem. 1974. 2. С. 175.
33. Radom L., Hehre W.J., Pople J.A. // J. Amer. Chem. Soc. 1971. 93. С. 289.