

01

О двузначных волновых функциях в описании внутримолекулярных координатных движений

© А.В. Буренин

Институт прикладной физики РАН,
603950 Нижний Новгород, Россия
e-mail: buran@appl.sci-nnov.ru

Поступила в редакцию 14.05.2018 г.

Показано, что появление двузначных волновых функций при построении методами CNPI-группы классификации дискретного спектра координатных движений в молекулах с линейным остовом и двумя тождественными волчками является следствием физически некорректного определения действия операций симметрии на переменные конфигурационного пространства молекулы.

DOI: 10.21883/OS.2018.09.46544.135-18

Введение

Хорошо известно [1], что при построении классификации дискретного спектра в нежестких молекулах с линейным остовом и двумя тождественными волчками с помощью полной ядерной перестановочно-инверсионной (CNPI) группы в описании внутренней динамики возникают двузначные вращательные, торсионные и колебательные волновые функции. Однако такое описание противоречит фундаментальному закону квантовой механики, согласно которому все координатные движения должны описываться однозначными волновыми функциями, а двузначные функции возникают только в описании спиновых движений квантовых систем с полуцелым спином [2]. В настоящей работе показывается, что противоречие с фундаментальным законом появляется из-за физически некорректного определения действия операций группы молекулярной симметрии (MS-группы, включающей из CNPI-группы лишь так называемые возможные элементы¹) на переменные конфигурационного пространства молекулы. Соответственно некорректно задается действие этих операций на базисные функции гильбертова пространства дискретного спектра молекулы. Как будет показано в настоящей работе, это происходит потому, что CNPI-группа и, как следствие, MS-группа не содержат никакой информации о геометрической симметрии внутримолекулярной динамики, в то время как такая симметрия играет принципиальную роль [3]. В результате задание действия операций MS-группы плохо формализуется и является неоднозначным, причем выделить его физически корректный вариант очень сложно. Рассмотрение в работе проводится на примерах молекул с линейным остовом и двумя симметричными, плоскими и линейными тождественными волчками.

¹ Данные элементы отвечают преобразованиям молекулы, которые могут быть реализованы с помощью рассматриваемых внутренних движений ядер [1].

Молекулы с симметричными волчками

Классический пример — молекула этана C_2H_6 в основном электронном состоянии. Показанная на рис. 1 ее равновесная конфигурация является шахматной и отвечает точечной группе D_{3d} [4]. Нужно отделить торсионное движение метильных волчков CH_3 от поворота молекулы как целого вокруг линейного остова. Впервые на появление двузначных волновых функций в такой задаче при работе с MS-группой G_{36} молекулы этана было указано в [5]. В [1] этому дается следующее объяснение. Конфигурационное торсионно-вращательное пространство имеет 4 координаты: θ, φ — полярные углы ориентации линейного остова; χ_1, χ_2 — углы поворота двух метильных волчков вокруг этого остова. Для разделения вращательного и торсионного движений вводятся вращательный и торсионный углы, определенных по модулю 2π :

$$\chi = (\chi_1 + \chi_2)/2, \quad \gamma = (\chi_1 - \chi_2)/2. \quad (1)$$

При этом двугранный торсионный угол $\tau = \chi_1 - \chi_2 = 2\gamma$ определяется по модулю 4π . При повороте одного

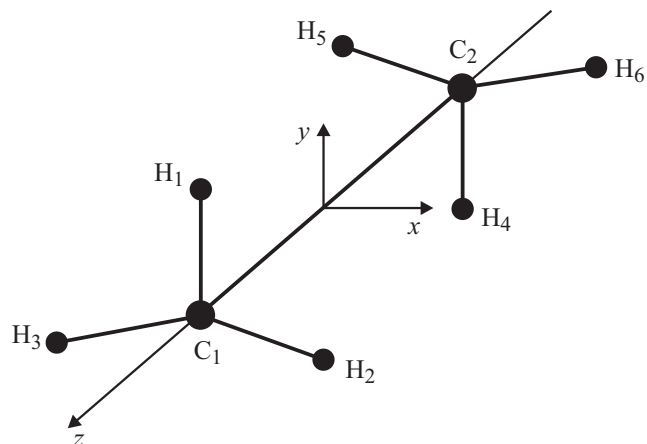


Рис. 1. Равновесная конфигурация молекулы этана (ядра H_1 и H_4 лежат в плоскости yz).

волчка на угол $2\pi/3$ (преобразование (123) группы G_{36}) имеем для угла χ

$$(123)\chi = (123)(\chi_1 + \chi_2)/2 = \left(\chi_1 + \frac{2\pi}{3} + \chi_2\right)/2 = \chi + \pi/3. \quad (2)$$

Заменяя χ_1 на $\chi_1 + 2\pi$, что оставляет положение ядер в пространстве неизменным, вместо (2) получаем

$$(123)\chi = \chi + 4\pi/3. \quad (3)$$

Тот же результат имеет место и для угла γ . Такие же неопределенности возникают для всех элементов группы G_{36} . Поэтому в ней нельзя однозначно классифицировать вращательные, торсионные и даже колебательные функции. Чтобы обойти эту трудность, предлагается считать, что описываемые углами (χ, γ) и $(\chi + \pi, \gamma + \pi)$ конфигурации не одинаковы. В результате возникают двузначные волновые функции в описании этих движений, а группа G_{36} заменяется ее двойной группой $G_{36}(EM)$. Понимая, что такое описание противоречит фундаментальному закону квантовой механики об однозначности волновых функций любых координатных движений, двузначные функции в [1] называются искусственными (artificial wave functions).

Фактически при работе с MS-группой задается действие элементов симметрии строгой задачи (перестановки тождественных ядер и их произведения с операцией пространственной инверсии) на координаты конфигурационных пространств ряда приближенных моделей, на основе которых вводятся сами понятия интересующих нас внутренних движений (в данном случае вращательного и торсионного). Оказывается, при этом очень важен правильный учет геометрической симметрии задачи. Однако такая информация в MS-группе отсутствует, что и приводит к физически некорректному описанию. Покажем это, используя правильное разделение торсионного и вращательного движений в молекуле этана, полученное в [3] методами цепочки групп, органично учитывающих геометрическую симметрию внутренней динамики молекулы.

Геометрическая симметрия гамильтониана внутреннего движения нежесткой молекулы этана C_2H_6 в основном электронном состоянии описывается расширенной точечной группой

$$G_{72} = (c_{3v} \times c_{3v}) \wedge C_I, \quad (4)$$

где две группы c_{3v} определяются симметрией двух волчков CH_3 , а действующая на конфигурацию в целом операция инверсии I учитывает тождественность волчков. Символ \wedge означает полупрямое произведение [3,6], возникающее вследствие некоммутативности элементов группы $c_{3v} \times c_{3v}$ и операции I . А именно

$$(p \times q)I = I(q \times p), \quad (5)$$

где $p \times q$ — произвольный элемент группы $c_{3v} \times c_{3v}$. Из (5) сразу следует, что $c_{3v} \times c_{3v}$ — это инвариантная

подгруппа группы G_{72} , что является необходимым и достаточным условием записи последней в виде (4). Отметим, что группа G_{72} включает точечную группу $D_{3d} = C_{3v} \times C_I$ как подгруппу. При этом реальная структура уровней дискретного спектра характеризуется полной вращательной подгруппой H_{36} группы $G_{72} \times C_i$, где $C_i = (E, i)$ — группа пространственной инверсии. Изоморфная группе G_{36} группа H_{36} записывается в виде

$$H_{36} = B_6 \times D_3. \quad (6)$$

Здесь D_3 — вращательная подгруппа группы D_{3d} , а $B_6 = B_3 \wedge H_2$, где $B_3 = (E \times E, c_3 \times c_3^2, c_3^2 \times c_3)$ и $H_2 = (E, Ii)$. Запись (6) группы H_{36} позволяет однозначно разложить торсионно-вращательное движение на торсионное и вращательное, определяемые элементами групп B_3 и D_3 соответственно. Важно, что элементы этих групп коммутируют между собой. Поэтому элементы группы B_3 не действуют во вращательном пространстве, а элементы группы D_3 — в торсионном². Изящное решение, целиком определяемое геометрией задачи. Подчеркнем, что хотя элемент C_3^k ($k = 1, 2$) группы D_3 может быть записан как $c_3^k \times c_3^k$, он не переводит молекулу из одного минимума эффективного ядерного потенциала в другой (первая операция c_3^k действительно переводит молекулу в другой минимум, однако вторая операция возвращает ее в исходный минимум). Поэтому операция $c_3^k \times c_3^k$ не связывает независимые локальные минимумы и, как следствие, описывает обычное вращение молекулы как целого без барьера. Подчеркнем, что согласно данному рецепту разделения поворот одного волчка не является чисто торсионным движением. В частности, поворот $c_3^1 \times E$ является суперпозицией торсионного движения $c_3^2 \times c_3^1$ и вращения C_3^2 молекулы как целого.

Естественно, что рецепт разделения торсионного и вращательного движений на основе геометрической группы H_{36} качественно отличается от рецепта разделения на основе MS-группы. Суть различия хорошо видна из сравнения действия элемента (123)(456) группы G_{36} и соответствующего ему элемента C_3^1 группы H_{36} :

$$(123)(456)\chi = \chi, \quad (123)(456)\tau = \tau + 4\pi/3, \quad (7)$$

$$C_3^1\chi = \chi + 2\pi/3, \quad C_3^1\tau = \tau. \quad (8)$$

То есть вращение молекулы как целого в MS-группе представляется в виде суперпозиции торсионных движений двух волчков. Естественно, что такое представление ошибочно, поскольку в отличие от торсионного движения вращение молекулы как целого в изотропном пространстве должно быть свободным.

² При отсутствии коммутации ситуация меняется. Например, согласно (5), элемент Ii не коммутирует с элементами группы B_3 . В результате элемент Ii нетривиальным образом, определяемым свойствами полупрямого произведения, действует в торсионном пространстве и полная симметрия торсионного движения описывается группой B_6 [3].

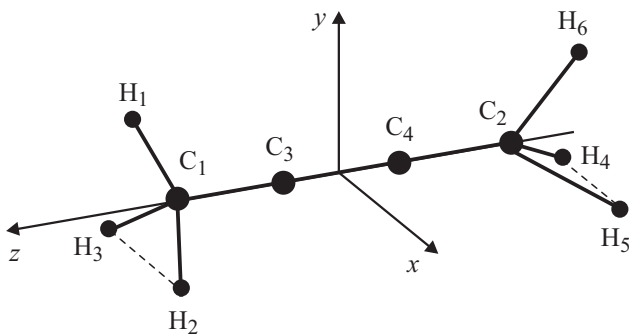


Рис. 2. Конфигурация молекулы диметилацетилена, отвечающая точечной группе D_{3h} (ядра H_1 и H_6 лежат в плоскости yz).

Другим полезным примером является молекула диметилацетилена $CH_3C_2CH_3$ в основном электронном состоянии. Она дополнительно интересна тем, что торсионный барьер согласно исследованиям методами спектроскопии высокого разрешения [7,8] равен всего 6.0 см^{-1} , и в качестве равновесной конфигурации возможна или шахматная или затененная. Показанная на рис. 2 затененная конфигурация отвечает точечной группе $D_{3h} = C_{3v} \times C_s$. Для перехода к шахматной конфигурации необходимо один из волчков повернуть вокруг оси z на угол π . Заметим, что для равновесной шахматной конфигурации вершина торсионного барьера соответствует затененной конфигурации, и наоборот. Естественно возникает вопрос о следствиях в свойствах симметрии внутренней динамики нежесткой молекулы диметилацетилена при изменении типа ее равновесной конфигурации. При применении MS-группы ответ на него очень сложен, так как в ней нет информации о геометрии системы, и в обоих вариантах она одна и та же [1]. Другая ситуация при рассмотрении методами цепочки групп [9,10]. Геометрическая симметрия гамильтониана нежесткой молекулы диметилацетилена с затененной равновесной конфигурацией описывается расширенной точечной группой

$$K_{72} = (c_{3v} \times c_{3v}) \wedge C_5. \quad (9)$$

В данном случае тождественность волчков учитывает действующая на конфигурацию в целом операция отражения $\sigma^{(xy)}$ группы C_5 . Поэтому группа K_{72} включает как подгруппу уже точечную группу D_{3h} . Реальная структура уровней описывается полной вращательной подгруппой M_{36} группы $K_{72} \times C_i$:

$$M_{36} = A_6 \times D_3. \quad (10)$$

Здесь $A_6 = B_3 \wedge C_2$, где $C_2 = (E, C_2^{(z)} = \sigma^{(xy)}i)$. Хотя группы M_{36} и H_{36} изоморфны, их элементы имеют разную геометрическую интерпретацию. Наиболее важно, что теперь вращение молекулы как целого определяется элементами группы $D_6 = C_2 \times D_3$, причем элемент $C_2^{(z)}$

входит в группу A_6 и из-за геометрии задачи не коммутирует с элементами группы B_3 , определяющими торсионное движение. Поэтому элемент $C_2^{(z)}$ нетривиальным образом, определяемым свойствами полупрямого произведения, действует и в торсионном пространстве [9]. Такое различие в группах M_{36} и H_{36} ведет к целому ряду важных изменений в классификации стационарных состояний и выражениях для эффективных операторов физических величин (включая эффективный гамильтониан) при рассмотренной смене типа равновесной конфигурации [9,10]³.

Молекулы с плоскими волчками

В качестве примера наиболее часто рассматривается молекула этилена C_2H_4 в основном электронном состоянии. Соответствующая равновесная конфигурация плоская и принадлежит точечной группе D_{2h} [4]. Будем считать, что в связанной с молекулой подвижной системе координат эта конфигурация лежит в плоскости yz , а внутреннее вращение волчков⁴ CH_2 происходит вокруг оси z , проходящей через равновесные положения ядер C . Нежесткая молекула этилена описывается MS-группой G_{16} , которая в силу причин, аналогичных молекулам этана и диметилацетилена, заменяется ее двойной группой $G_{16}(EM)$ [1].

В методах цепочки групп реальная структура уровней молекулы этилена характеризуется изоморфной MS-группе G_{16} группой H_{16} [12]:

$$H_{16} = U_2 \times [(c_2 \times c_2) \wedge C_2]. \quad (11)$$

Внутренние вращения волчков задают элементы $c_2^1 \times E$ и $E \times c_2^1$ группы $c_2 \times c_2$, а вращения молекулы как целого элемент $C_2^{(z)} = c_2^1 \times c_2^1$ группы $c_2 \times c_2$, а также группы $U_2 = (E, U_2^{(x)} = \sigma^{(yz)}i)$ и $C_2 = (E, C_2^{(x)} = \sigma^{(yz)}I)$. Элемент $C_2^{(z)}$ аналогично элементу C_3^k молекулы этана не связывает независимые локальные минимумы и поэтому описывает обычное вращение молекулы как целого без барьера. То есть группу H_{16} невозможно представить как произведение групп, независимо описывающих торсионное и вращательное движения. Необходимо еще учесть, что из-за геометрии задачи вращение $C_2^{(x)}$ не коммутирует с $c_2^1 \times E$ и $E \times c_2^1$. Поэтому действует и в торсионном пространстве, где такое действие легко находится из свойств полупрямого произведения. В торсионно-вращательных величинах (в волновых функциях и эффективных операторах физических величин) поведение торсионных частей по отношению к $c_2^1 \times E$ и

³ Из этих работ также следует, что применение MS-группы в силу указанных ее недостатков привело в [11] (см. также [1]) к неправильному ответу на вопрос о таких изменениях.

⁴ Заметим, что барьер внутреннего вращения для молекулы этилена в основном электронном состоянии довольно высок. Но традиционно рассмотрение такого движения прежде всего интересно с методологической точки зрения [1].

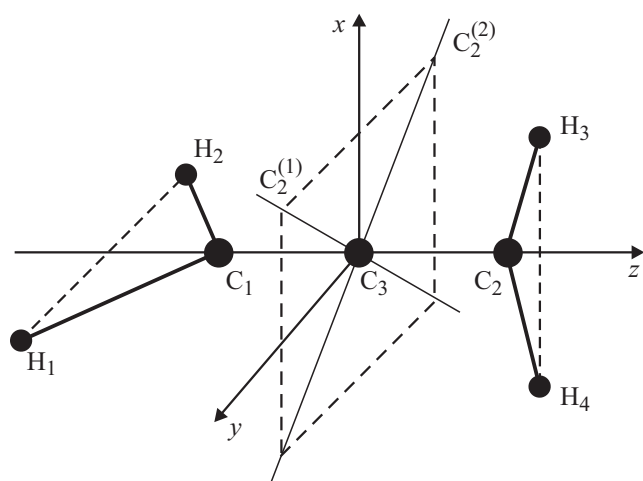


Рис. 3. Равновесная конфигурация молекулы аллена (волчки $C_1H_1H_2$ и $C_2H_3H_4$ лежат соответственно в плоскостях yz и xz).

$E \times c_2^1$ однозначно задается неприводимым представлением группы $c_2 \times c_2$. Тем самым определяется поведение вращательных частей относительно $C_2^{(z)}$. То есть геометрия задачи ведет к жесткой корреляции между торсионной и вращательной частями таких величин. В итоге получаем ответ на основной вопрос, в каких пространствах и каким образом действуют различные преобразования группы H_{16} . Данный ответ весьма нетривиален. Поэтому работая с MS-группой без информации о геометрической симметрии, вряд ли можно угадать его правильный аналог.

Полезно посмотреть на изменения в анализе при переходе к относящейся к тому же типу молекуле аллена C_3H_4 . Дело в том, что молекула этилена является асимметричным волчком, и точечная группа D_{2h} содержит только невырожденные неприводимые представления. Молекула аллена, чья равновесная конфигурация в основном электронном состоянии приведена на рис. 3, уже симметричный волчок и ее точечная группа D_{2d} [4] имеет двумерное неприводимое представление. Поэтому кроме торсионного вырождения уровней энергии, имеются вырождения, связанные с другими типами движения, и в том числе вращательные. Кроме того, равновесная конфигурация не плоская и в энергетическом спектре имеются инверсионные дублеты. Причем внутреннее вращение волчков CH_2 их расщепляет, что довольно неожиданно для такого типа движения. Здесь этот эффект целиком объясняется плоскостностью волчков [13].

Несмотря на такое серьезное изменение геометрической симметрии равновесной конфигурации молекулы аллена по сравнению с молекулой этилена, MS-группа нежесткой молекулы аллена совпадает с таковой для этилена. Совсем иная ситуация в методах цепочки групп. Группа, описывающая реальную структуру уровней молекулы аллена, также представляется в виде (11), но

теперь [13]

$$U_2 = [E \times E, (\sigma^{(yz)} \times \sigma^{(xz)})i], \quad C_2 = (E, C_2^{(1)}). \quad (12)$$

То есть по сравнению с молекулой этилена меняется геометрическая интерпретация элементов. В частности, U_2 уже не является группой преобразований молекулы как целого. Но при этом в качестве подгруппы, элементы которой задают вращение молекулы как целого, группа H_{16} в случае молекулы этилена включает группу асимметричного волчка D_2 , а в случае молекулы аллена — группу симметричного волчка D_4 . Интересно, что различия в геометрии равновесных конфигураций молекул этилена и аллена таковы, что характеризующие их точечные группы даже не изоморфны. Однако расширенные точечные группы, включающие точечные группы в качестве подгрупп, и группы, описывающие реальную структуру уровней энергии, являются уже изоморфными, что подчеркивает однотипность этих молекул с точки зрения нежестких движений. Но при этом налицо качественные различия в их спектрах. Действительно, в молекуле этилена инверсионные дублеты отсутствуют, и поэтому в торсионных расщеплениях оба подуровня имеют одинаковое поведение относительно операции пространственной инверсии i . Причем расщепляется только половина вращательных уровней энергии, а остальные просто становятся двукратно вырожденными [12]. В то же время в молекуле аллена инверсионные дублеты имеются и именно они расщепляются вследствие торсионного движения, так как такое движение из-за плоскостности волчков приводит к реализуемости операции пространственной инверсии. В результате в расщеплениях подуровни имеют разное поведение относительно i , причем расщепляются все вращательные уровни [13]. Важно, что эти различия целиком объясняются разной геометрической интерпретацией элементов их расширенных точечных групп. Естественно, что правильно описать их на основе MS-группы, которая одна и та же для обеих молекул, не представляется реальным⁵.

Молекулы с линейными волчками

Классическим примером является молекула перекиси водорода $HOOH$. Показанная на рис. 4 ее равновесная конфигурация в основном электронном состоянии принадлежит точечной группе $C_2 = (E, C_2^{(x)})$. Как следствие, молекула обладает стереоизомерами⁶. Их смешивание в жестких молекулах отсутствует, и вводят понятие „правой“ и „левой“ модификаций молекулы с совпадающими энергетическими уровнями. В молекуле $HOOH$

⁵ Как уже ранее упоминалось, попытка на основе MS-группы описать изменения, связанные с разным выбором равновесных конфигураций молекулы диметилацетилена, привела к неправильному ответу. Причем несмотря на то, что задача значительно проще, поскольку точечные группы возможных равновесных конфигураций этой молекулы изоморфны.

⁶ Для наличия стереоизомерии требуется, чтобы точечная группа молекулы не имела несобственных преобразований [2].

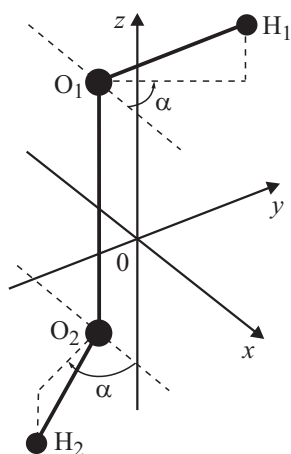


Рис. 4. Равновесная конфигурация молекулы перекиси водорода (0 — точка центра масс, 2α — двугранный угол между плоскостями $H_1O_1O_2$ и $H_2O_2O_1$).

структуры ОН туннелируют между энергетически эквивалентными положениями. Так как центр масс молекулы не лежит на химической связи ОО, нежесткое движение можно представлять как синхронное вращение структур вокруг оси z навстречу друг другу (*цис*-переход) или друг от друга (*транс*-переход). Естественно, что *транс*-переход является доминирующим [14]. Расширенная точечная группа, учитывающая геометрию таких нежестких движений, имеет вид [3]

$$F_8 = C_2 \times C_S \times C'_S, \quad (13)$$

где группа $C_S = (E, \sigma^{(yz)})$ задает *транс*-переход, а группа $C'_S = (E, \sigma^{(xz)})$ — *цис*-переход⁷. Важно, что при отражении в плоскостях yz и xz меняется пространственное положение эффективного потенциала взаимодействия ядер (и, как следствие, положение равновесной конфигурации). То есть тождественные ядра не обмениваются местами друг с другом, а занимают новые положения в пространстве. Такие нежесткие движения в методах цепочки групп называются движениями необменного типа. Соответствующие им преобразования не являются элементами симметрии гамильтониана внутреннего движения молекулы. В результате G_8 это неинвариантная группа, в которой подгруппа симметрии гамильтониана совпадает с точечной группой C_2 .

Реальная структура уровней энергии описывается полной группой $F_8 \times C_i$, так как все ее элементы выражаются через операции, характеризующие рассматриваемые типы движений. В частности,

$$i = \sigma^{(yz)} C_2^{(x)} = \sigma^{(xy)} C_2^{(y)}. \quad (14)$$

Отсюда следует, что как *транс*-переход, так и *цис*-переход смешивают стереоизомеры. Всего группа $F_8 \times C_i$ содержит 16 элементов.

⁷ Вершине барьера для *транс*-перехода отвечает двугранный угол, равный π (молекула лежит в плоскости yz), а для *цис*-перехода — угол, равный 0 (молекула лежит в плоскости xz).

В качестве MS-группы при описании нежесткой молекулы перекиси водорода используется группа G_4 [1]:

$$G_4 = (E, (12)(34)) \times (E, E^*), \quad (15)$$

где (34) — операция перестановки двух тождественных ядер О, а E^* — операция пространственной инверсии. Группа G_4 значительно беднее группы $F_8 \times C_i$. В этом нет ничего удивительного, так как по своему определению MS-группа является группой симметрии гамильтониана внутримолекулярного движения. Поэтому она изоморфна подгруппе симметрии гамильтониана $C_2 \times C_i$ группы $F_8 \times C_i$. Из-за бедности MS-группы *транс*-переход приходится задавать элементом $(12)(34)E^*$, хотя E^* является связанной со свойствами пространства внешней операции симметрии и поэтому не может иметь отношения к заданию нежестких движений молекулы⁸. Но просто нет другого варианта. Еще более странно задание *цис*-перехода с помощью элемента $E'(12)(34)E^*$, где E' — образующий элемент перехода от группы G_4 к ее двойной группе $G_4(EM)$, для которого выполняется условие $E'^2 = E$. То есть для задания нежесткого движения используется совершенно абстрактный элемент E' , и в этом плане ситуация серьезно отличается от молекул с симметричными и плоскими волчками. Там нежесткие движения задаются перестановками тождественных ядер. Это можно сделать по той простой причине, что геометрические преобразования, задающие нежесткие движения, не меняют пространственное положение эффективного ядерного потенциала, а движение ядер в этом потенциале сводится к обмену тождественных ядер местами друг с другом. Такие преобразования являются элементами симметрии гамильтониана, а отвечающие им движения в методах цепочки групп называются движениями обменного типа. При анализе подобных нежестких движений в молекулах с линейным остовом и двумя тождественными волчками двойная MS-группа появляется только потому, что некорректно определяется действие операций симметрии MS-группы, заданных перестановками тождественных ядер, на переменные конфигурационного пространства молекулы. Последнее связано с отсутствием информации о геометрии внутренних движений. Однако в молекуле перекиси водорода нежесткие движения относятся к необменному типу, которым нельзя сопоставить перестановку тождественных ядер. Здесь ярко проявляется принципиальный недостаток подхода на основе MS-группы. Приходится привлекать для задания *транс*-перехода элемент E^* , а для задания *цис*-перехода элементы E^* и E' . То есть двойная группа используется уже на этапе задания нежестких движений. Такая схема анализа свойств симметрии вообще лишена какого-либо физического смысла.

⁸ Другое дело, что полная координатная волновая функция стационарного состояния изолированной молекулы должна иметь определенное поведение относительно этой операции.

Заключение

Проведенный в этой работе анализ молекул с линейным остовом и двумя тождественными волчками наглядно демонстрирует значение геометрической симметрии для правильного описания их внутренней динамики. Важно, что в настоящее время такую симметрию в случае нежестких молекул позволяют адекватно учитывать только методы цепочки групп.

Список литературы

- [1] *Bunker P.R., Jensen P.* Molecular symmetry and spectroscopy, NRC Research Press, Ottawa, 1998. 750 p. Перевод: Банкер Ф., Йенсен П. Симметрия молекул и спектроскопия. М.: Мир, 2004. 764 с.
- [2] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 767 с.
- [3] *Буренин А.В.* Симметрия квантовой внутримолекулярной динамики. 3-е изд., Н.Новгород: ИПФ РАН, 2012. 416 с. *Burenin A.V.* Symmetry of intramolecular quantum Dynamics. Berlin/Boston: Walter de Gruyter, 2012. 430 p.
- [4] *Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П.* Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1970. 560 с.
- [5] *Hougen J.T.* // *Can. J. Phys.* 1964. V. 42. P. 1920.
- [6] *Эллиот Дж., Добер П.* Симметрия в физике. Т. 2. М.: Мир, 1983. 412 с.
- [7] *Pliva J., Pine A.S., Civis S.* // *J. Mol. Spectrosc.* 1996. V. 180. P. 15.
- [8] *Lauro C., Bunker P.R., Johns J.W.C., McKellar A.R.W.* // *J. Mol. Spectrosc.* 1997. V. 184. P. 177.
- [9] *Буренин А.В.* // *Опт. и спектр.* 2016. Т. 121. С. 683.
- [10] *Буренин А.В.* // *Опт. и спектр.* 2017. Т. 123. С. 3.
- [11] *Bunker P.R., Lauro C.* // *Chem. Phys.* 1995. V. 190. P. 159.
- [12] *Буренин А.В.* // *Опт. и спектр.* 2017. Т. 123. С. 834.
- [13] *Буренин А.В.* // *Опт. и спектр.* 2017. Т. 123. С. 841.
- [14] Внутреннее вращение молекул / Под ред. В.Дж. Орвилл-Томас. М.: Мир, 1977. 511 с.