

06

## Исследование структуры кристаллического фуллерена C<sub>70</sub> при давлении до 33 GPa

© Д.Н. Соколовский, Я.Ю. Волкова, А.Н. Бабушкин

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620062 Екатеринбург, Россия  
e-mail: dmitry.sokolovsky@urfu.ru

Поступило в Редакцию 5 октября 2024 г.

В окончательной редакции 5 октября 2024 г.

Принято к публикации 5 октября 2024 г.

Представлены результаты исследований влияния высокого давления на структуру кристаллов фуллерена C<sub>70</sub>. Проведены рентгеноструктурный анализ и спектроскопия комбинационного рассеяния образцов фуллерена C<sub>70</sub> при атмосферном давлении, а также при давлениях до 33 GPa. Для проведения исследований использовали камеры высокого давления с оптически прозрачными алмазными наковальнями. Установлен ряд фазовых преобразований, происходящих под действием высокого давления, обусловленных ориентационным структурным переходом и аморфизацией кристаллов фуллерена.

**Ключевые слова:** углеродные материалы, фазовые переходы, КР спектроскопия, рентгеноструктурный анализ.

DOI: 10.61011/JTF.2025.02.59723.293-24

### Введение

Фуллерены — это аллотропная форма углерода, которая представляет собой замкнутые молекулы, состоящие из пятиугольников и шестиугольников с атомами углерода в вершинах. Количество атомов углерода в молекулах фуллеренов варьируется от 20 до 540. Атомы в составе фуллерена находятся в  $sp^2$ -гибридизации. Наиболее подробно изученным представителем семейства фуллеренов является C<sub>60</sub>, в котором углеродные атомы образуют усеченный икосаэдр, состоящий из 20 шестиугольников и 12 пятиугольников и напоминающий футбольный мяч. Следующим по распространенности является фуллерен C<sub>70</sub>, отличающийся от фуллерена C<sub>60</sub> вставкой пояса из 10 атомов углерода в экваториальную область, в результате чего молекула является вытянутой. Молекула C<sub>70</sub> принадлежит к D<sub>5h</sub> точечной группе [1–4].

Конденсированные системы — молекулярные кристаллы, состоящие из молекул фуллеренов, — также называются фуллеритами. В кристаллической форме между отдельными молекулами фуллеренов нет химической связи — молекулы удерживаются в кристалле силами Ван-дер-Ваальса. Таким образом, взаимодействие между атомами углерода внутри молекулы существенно сильнее, чем между атомами соседних молекул. Учитывая, что сами фуллерены являются достаточно сферически-симметричными структурами (зависит от числа атомов углерода), кристаллы фуллеренов имеют структуру плотной упаковки. Как правило, это гранцентрированная кубическая, но также встречается гексагональная и ромбоэдрическая структуры [1,5,6]. При нормальных условиях молекулы свободно вращаются в узлах решетки. При приложении давления свободное вращение прекращается, и молекулы выстраиваются своими по-

люсами в исходном направлении решетки, сохраняя при этом одноосное вращательное движение [7].

В кристаллической форме молекулы фуллеренов легко образуют ковалентные связи со своими молекулярными соседями при воздействии облучения, высоких температур или давлений — так называемый процесс полимеризации углеродных наноструктур, в данном случае фуллеренов. Полимеризация нейтрального C<sub>60</sub> происходит при давлении в несколько GPa. Деполимеризация возможна при атмосферном давлении и температурах порядка 200°С. Самой энергетически невыгодной фазой является ромбоэдрическая, и она же наиболее распространена при полимеризации под давлением. Таким образом, переход в более стабильную полимеризованную фазу требует более тяжелых условий, тогда как превращение в нестабильную мономерную фазу существенно проще [8].

При более высоких давлениях возможно формирование сверхтвердых фаз, что объясняется трехмерным упорядочением  $sp^2$ -гибридизованной структуры. Воздействие высоких температур приводит к трехмерной полимеризации и формированию разупорядоченной сети с высокой плотностью  $sp^3$ -состояний, и далее — к формированию алмазоподобной структуры [8–10].

Наиболее подробно данные преобразования изучены в условиях высоких давлений и/или температур в кристаллах фуллерена C<sub>60</sub>, что объясняется их наибольшей распространенностью и симметричностью [4,10,11]. Для более крупной и вытянутой молекулы C<sub>70</sub> проведено существенно меньшее количество подобных исследований [7,12,13]. Достичь полимеризации фуллерена C<sub>60</sub> существенно проще, чем в случае молекул C<sub>70</sub>. В то время как структура молекулы фуллерена C<sub>60</sub> включает в себя 30 двойных связей, каждая из которых могла

бы участвовать в образовании химических связей с соседними молекулами,  $C_{70}$  имеет только десять двойных связей, способных участвовать в полимеризации, причем пять из них распределены радиально вокруг каждой пятиугольной „полярной шапки“. Поэтому  $C_{70}$  на практике гораздо менее реакционноспособен, чем  $C_{60}$  [7,14].

Одномерная полимеризованная структура на основе  $C_{70}$  с гексагональной решеткой может быть сформирована в мономерных кристаллах с гексагональной плотной упаковкой при относительно низком давлении 2.5 GPa и температуре порядка 300°C [12]. Гранецентрированная кубическая структура является наиболее распространенной для фуллерена  $C_{70}$ , и долгое время предполагалось, что кристаллы  $C_{70}$  с такой решеткой не могут образовывать какие-либо полимеризованные структуры, обладающие дальним порядком, из-за несовместимой симметрии решетки и структуры молекулы. Однако впоследствии было показано, что это возможно при воздействии давлений порядка 10 GPa и температур около 270°C [15].

Фуллерены представляют интерес для синтеза новых функциональных материалов на основе углеродных наноструктур. Хотя графен и углеродные нанотрубки практически инертны при низких давлениях, фуллерены легко реагируют и, таким образом, могут действовать как „клей“ при синтезе таких материалов. Подобные полимерные структуры обладают уникальными физическими и химическими свойствами. Молекулы фуллерена можно сольватировать в матрице, и при их правильной ориентации в пространстве в условиях высоких давлений возможно создавать структуры с заданными свойствами. Тот факт, что межмолекулярная связь в  $C_{70}$  является строго направленной, делает эту молекулу особенно подходящей для таких экспериментов, и поэтому представляет определенный интерес детальное исследование ее свойств в условиях высокого давления [7,14].

В ранее проведенных исследованиях наблюдали ориентационные переходы при комнатной температуре из гранецентрированной кубической (ГЦК) в ромбоэдрическую фазу при давлениях менее 2 GPa [3,5,16–19]. В указанных работах в условиях высоких давлений получали либо рентгенограммы, либо спектры комбинационного рассеяния. Измерения проводили на разных образцах: исходные фазы и их содержание зависят от метода и условий синтеза [1]. В связи с этим точные значения критических давлений и природа самих фазовых переходов остаются спорными. В настоящей работе проведены *in situ* исследования влияния высокого давления на структуру фуллерена  $C_{70}$  посредством измерения дифрактограмм и спектров комбинационного рассеяния на одних и тех же образцах.

## 1. Образцы и методика измерений

Исходный образец кристаллического фуллерена  $C_{70}$  был изготовлен в Институте биохимической физики

им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук. Аттестация структуры образца кристаллического фуллерена  $C_{70}$  выполнена методом рентгеновской дифракции в излучении  $Cu-K\alpha$  с использованием дифрактометра Bruker ADVANCE D8. Измерения проводились в лаборатории структурных методов анализа и свойств материалов и наноматериалов Института естественных наук и математики Уральского федерального университета.

Также исходный образец был исследован методом спектроскопии комбинационного рассеяния с использованием системы конфокальной микроскопии комбинационного рассеяния Alpha 300 AR (WiTec GmbH). В качестве источника лазерного излучения использовался твердотельный лазер с длиной волны 488 nm. Измерения были выполнены в Уральском центре коллективного пользования „Современные нанотехнологии“ Уральского федерального университета.

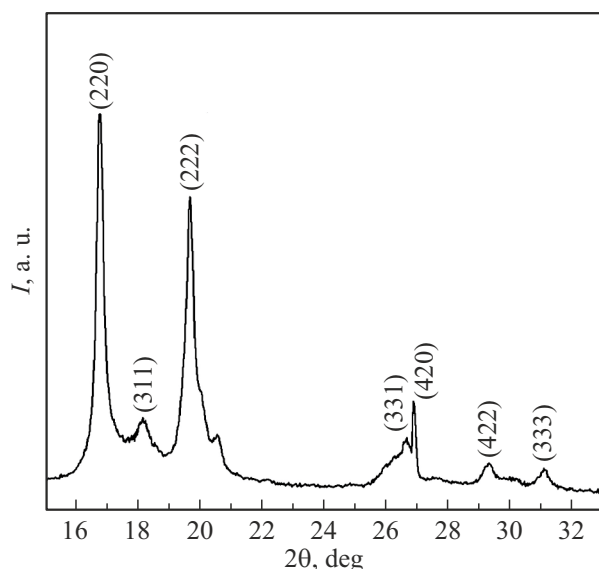
Исследования структуры *in situ* образцов кристаллического фуллерена  $C_{70}$  при высоких давлениях проводились в ячейке с алмазными наковальнями методами рентгеновской дифракции и спектроскопии комбинационного рассеяния. Для проведения исследований использовали четырехпиновые камеры высокого давления. Образец  $C_{70}$  в виде порошка помещался в ячейку с алмазными наковальнями в отверстие рениевой гаскеты (прокладки) диаметром 100  $\mu m$ . Аргон был использован в качестве среды, передающей давление. Для оценки давления в ячейке использовали метод определения давления по линиям люминесценции рубина.

Дифрактограммы при высоких давлениях были получены на установке с вращающимся анодом в излучении  $Mo-K\alpha$  с использованием дифрактометра Rigaku с фокусирующей рентгеновской оптикой Osmic и APEX CCD детектором Bruker. Спектроскопия комбинационного рассеяния при высоком давлении и комнатной температуре проводилась с помощью спектрометра Dilor XY с использованием аргонового лазера с длиной волны 514.5 nm.

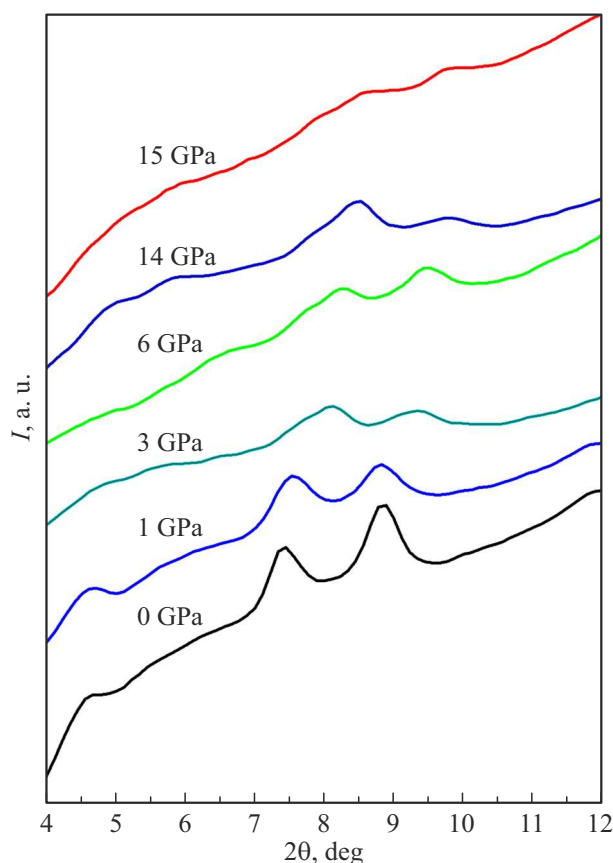
## 2. Рентгеновская дифракция

На рис. 1 представлена дифрактограмма, полученная для исходного образца фуллерена  $C_{70}$  при атмосферном давлении и комнатной температуре. Дифрактограммы были получены при использовании излучения  $Cu-K\alpha$  в диапазоне 10–90°. Исходный образец  $C_{70}$  кристаллизуется преимущественно в ГЦК фазе с параметром решетки  $a = 14.96 \text{ \AA}$ , с небольшой добавкой гексагональной плотноупакованной фазы (ГПУ). Большинство пиков соответствуют именно ГЦК фазе. Правое плечо пика около 20° и некоторые другие пики могут быть связаны с присутствием кластеров с гексагональной упаковкой. Причем ГПУ фаза сильно искажена или разупорядочена.

Дифрактограммы при гидростатических давлениях до 15 GPa (рис. 2) получены с использованием излучения  $Mo-K\alpha$ . При атмосферном давлении мы можем идентифицировать ряд пиков, соответствующих ГЦК фазе. При



**Рис. 1.** Дифрактограмма образца фуллерена  $C_{70}$  при атмосферном давлении.



**Рис. 2.** Дифрактограммы образца фуллерена  $C_{70}$  при различных давлениях.

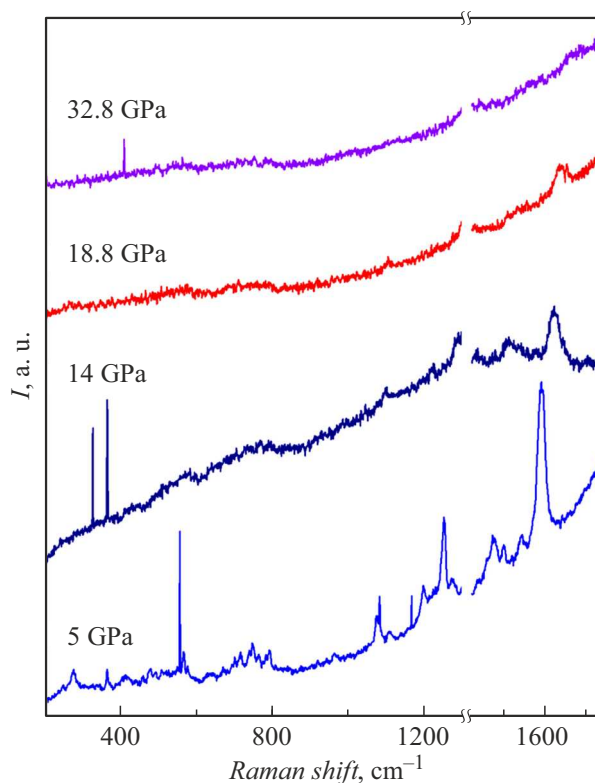
увеличении нагрузки можно наблюдать ориентационный переход при давлениях выше 1 ГПа. Молекулярные кристаллы очень сложны с кристаллографической точки

зрения, и идентифицировать полученные фазы не представляется возможным. В ранее проведенных исследованиях при комнатной температуре наблюдали переход из ГЦК в ромбоэдрическую фазу при давлении 0.35 ГПа с сосуществованием ГЦК-фазы до 1 ГПа [5,16]. Сжатие решетки заставляет вытянутые молекулы фуллерена  $C_{70}$  выстраиваться параллельно, улучшая ориентационный порядок. В нашем случае наблюдается аналогичные изменения в дифрактограммах [16].

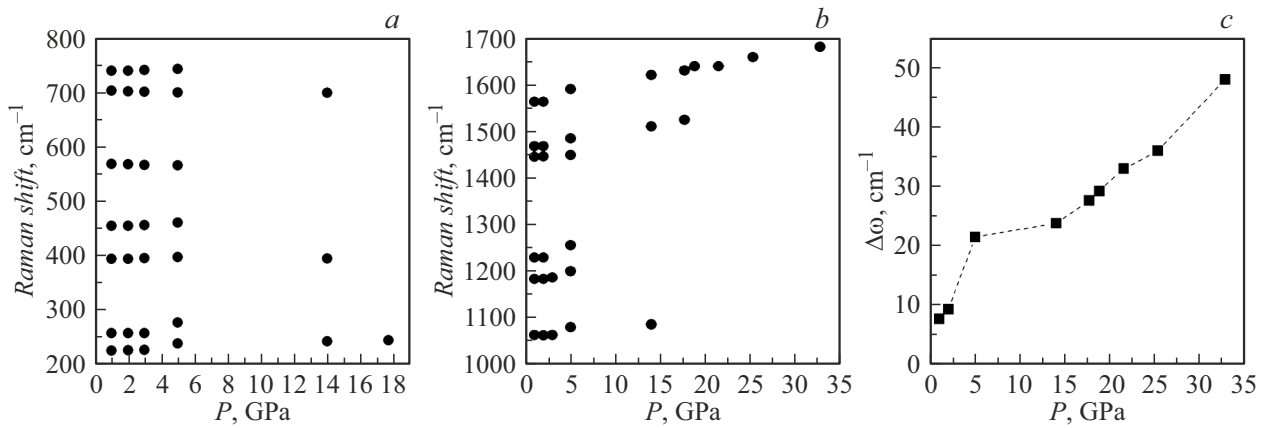
По данным ранее проведенных исследований можно предположить наличие полимеризации фуллеренов в диапазоне давлений от 3 до 14 ГПа [12,15], однако точных подтверждений этому нет. Когда давление достигает 14 ГПа (рис. 2), большинство пиков становятся слабо-различимыми, и при увеличении нагрузки далее они не прослеживаются. Вероятно, при давлении более 14 ГПа происходит переход в аморфную фазу углерода [9,13].

### 3. Спектроскопия комбинационного рассеяния

На рис. 3 представлены результаты *in situ* спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) фуллерена  $C_{70}$  при давлениях до 32.8 ГПа. Образец помещался в ячейку с алмазными наковальнями в отверстие гаскеты. Аргон был использован в качестве передающей давление среды. Область вблизи  $\omega = 1332 \text{ cm}^{-1}$  была удалена из спектров, так как в этом диапазоне частот



**Рис. 3.** Спектры комбинационного рассеяния фуллерена  $C_{70}$  при различных давлениях.

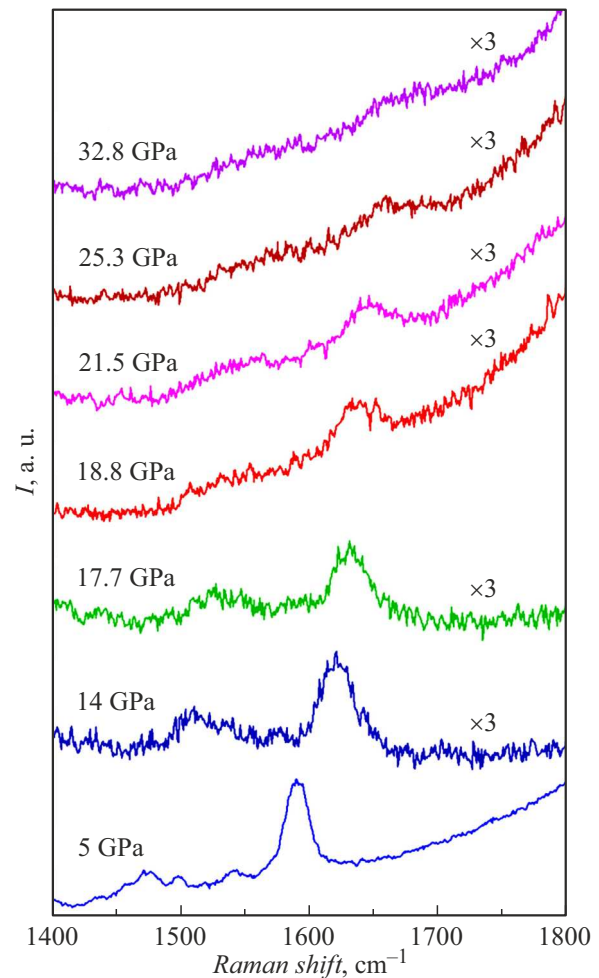


**Рис. 4.** Барические зависимости положения пиков КР спектров фуллерена  $C_{70}$  в диапазоне  $200\text{--}800$  (a) и  $1000\text{--}1700$   $\text{cm}^{-1}$  (b). Барическая зависимость ширины на половине высоты максимума фона с частотой  $1567$   $\text{cm}^{-1}$  (c).

преобладает сильное колебание, исходящее от алмазных наковален, и его вклад в спектр является доминирующим. Увеличение фонового сигнала от  $1000$   $\text{cm}^{-1}$  обусловлено слабой люминесценцией, происходящей от электронно-возбужденных молекул  $C_{70}$  [20]. Известно, что линия комбинационного рассеяния около  $1471$   $\text{cm}^{-1}$  соответствует  $A_g$  дышащей моде пятиугольной ячейки модели  $C_{60}$  [21]. Отсутствие в спектрах дышащей моды фуллерена  $C_{60}$  при  $496$   $\text{cm}^{-1}$  свидетельствует о том, что пик с частотой порядка  $1471$   $\text{cm}^{-1}$  происходит от молекулы  $C_{70}$  и не связан с наличием примесей  $C_{60}$ . Значительное усиление интенсивности низкочастотной части спектра с увеличением давления характерно для фуллеренов [3].

Барические зависимости положения пиков спектров комбинационного рассеяния представлены на рис. 4, a, b. Все пики смещаются к более высоким частотам с увеличением давления, за исключением двух фононных мод при  $568$  и  $702$   $\text{cm}^{-1}$ , частоты которых уменьшаются с ростом давления, что ранее наблюдалось [3]. При давлениях более  $14$  GPa большинство фононных мод фуллерена  $C_{70}$  не прослеживается, и только наиболее интенсивный, широкий пик с частотой около  $1567$   $\text{cm}^{-1}$  может отчетливо наблюдаться (рис. 4, b). Барическая зависимость ширины этого пика (fwhm — full width half maximum) представлена на рис. 4, c.

В зависимостях положения пиков от давления (рис. 4, a, b), в большинстве случаев можно отметить существенное увеличение частот колебаний при достижении давления  $5$  GPa. Скачкообразное изменение ширины линии комбинационного рассеяния для фона с частотой  $1562$   $\text{cm}^{-1}$  свидетельствует о наличии как минимум одного ориентационного перехода в области давлений от  $2$  до  $5$  GPa (рис. 4, c). Авторы [3] ранее сообщали о двух фазовых переходах при давлениях около  $2$  и  $5.5$  GPa, причем переход при давлении  $2$  GPa является обратимым. Данные наблюдения не были подтверждены, что, вероятно, обусловлено различными исходными фазами образцов фуллерена  $C_{70}$ .



**Рис. 5.** Спектры комбинационного рассеяния фуллерена  $C_{70}$  в диапазоне  $1400\text{--}1800$   $\text{cm}^{-1}$  при различных давлениях.

На рис. 5 представлены спектры комбинационного рассеяния фуллерена  $C_{70}$  в частотном диапазоне от  $1400$  до  $1800$   $\text{cm}^{-1}$  при различных давлениях. При давлении

18.8 ГПа отчетливо наблюдается расщепление пика с частотой  $1567 \text{ cm}^{-1}$  (с ростом давления пик смещается в область более высоких частот). При давлении 18.8 ГПа и более в данной области частот можно наблюдать только широкую полосу с центром около  $1680 \text{ cm}^{-1}$ , что может говорить об определенных преобразованиях в структуре образца. Подобные изменения в спектрах связывают с аморфизацией фуллеренов под давлением [3,17,19].

Ранее с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния было показано, что аморфизация кристаллического фуллерена обратима при давлениях до как минимум 31 ГПа [17], что также было подтверждено рентгенограммами образцов, подвергнутых ударно-волновому нагружению [6]. Сам процесс аморфизации начинается при давлениях около 12 ГПа, и в диапазоне 18–20 ГПа фуллерен полностью переходит в аморфное состояние [17–19]. Необратимый переход в аморфную фазу происходит при давлениях порядка 35 ГПа [19].

Исходя из представленных дифрактограмм, спектров комбинационного рассеяния, а также полученных нами ранее результатов исследований влияния высокого давления на термоэлектрические свойства фуллерена  $C_{70}$  [22], можно предположить, что аморфизация фуллерена  $C_{70}$  происходит в диапазоне давлений 14–18 ГПа (рис. 2,5). Барическая зависимость ширины линии фонона с частотой  $1567 \text{ cm}^{-1}$  (рис. 4, c) также подтверждает это предположение. Изменения структуры вещества, как правило, существенно отражаются на термоэлектрических характеристиках и свидетельствуют о преобразованиях во всем объеме исследуемого вещества, тогда как структурные исследования указывают только на локальную трансформацию фаз.

При давлениях выше 18.8 ГПа в отдельных спектрах мы наблюдали интенсивные пики, характерные для фуллеренов. Например, в спектре, полученном при давлении 32.8 ГПа, присутствует характерный для фуллеренов пик с частотой около  $410 \text{ cm}^{-1}$  (рис. 3). Наличие данного пика свидетельствует о том, что некоторая часть фуллеренов переходит в аморфную фазу не полностью. Это также подтверждает обратимость аморфизации при давлениях порядка 30 ГПа [17].

На рис. 6 представлены спектры комбинационного рассеяния фуллерена  $C_{70}$  до и после воздействия давлением порядка 46 ГПа. Ранее мы исследовали влияние высокого давления на термоэлектрические свойства фуллерена  $C_{70}$  [22]. Для создания высоких давлений в этих экспериментах использовались ячейки с наковальнями, изготовленными из поликристаллических алмазов „карбонадо“. Структура такого синтетического алмаза представляет собой взаимопроникающие каркасы из алмазной и металлокерамической фаз, благодаря чему наковальни имеют хорошую электропроводность и могут быть использованы в качестве контактов к исследуемому образцу. В то же время конструкция ячейки не позволяет исследовать структуру образца в условиях высоких давлений, поэтому в данных экспериментах образцы были исследованы после извлечения из алмазной камеры.

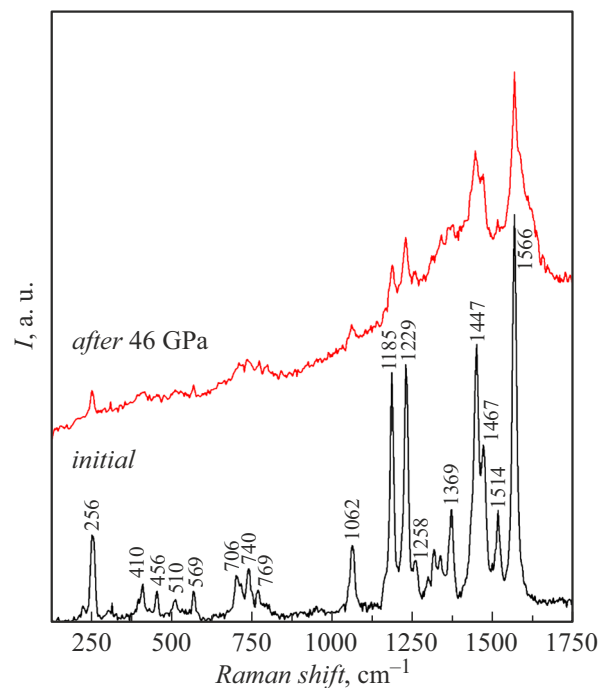


Рис. 6. Спектры комбинационного рассеяния фуллерена  $C_{70}$  до и после воздействия давлением 46 ГПа.

В спектре исходного образца, не подвергнутого воздействию высокого давления, можно отметить ряд комбинационных мод, соответствующих фуллеренам (рис. 6). Пик с частотой  $496 \text{ cm}^{-1}$  здесь также не наблюдается, что свидетельствует об отсутствии примесей  $C_{60}$ , во всяком случае об их низком содержании [21]. В спектре образца, извлеченного из ячейки с алмазными наковальнями после воздействия давлением 46 ГПа, можно отчетливо наблюдать ряд комбинационных мод, соответствующих фуллерену. Ранее аналогичным образом был получен спектр комбинационного рассеяния после нагрузки в 43 ГПа, в котором также прослеживались структурные особенности фуллерена [13].

Таким образом, полученный результат может свидетельствовать о более высокой структурной стабильности фуллерена  $C_{70}$  по сравнению с  $C_{60}$  [8,9]. В то же время в ряде экспериментов нам удалось добиться необратимых преобразований в структуре образца в тех же условиях. Результаты исследований структуры исходного образца, не подвергнутого давлению, свидетельствуют о высокой чистоте и доминировании ГЦК фазы. Учитывая этот момент, можно предположить неоднородность распределения давления в ячейке при осевом сжатии в экспериментах по исследованию термоэлектрических свойств.

## Заключение

Таким образом, наши результаты спектроскопических исследований подтверждают наличие как минимум одного ориентационного перехода в области давлений

2–5 GPa, однако структура полученных фаз не была идентифицирована. Аморфизация фуллерена C<sub>70</sub> происходит в диапазоне давлений 14–18 GPa. Аморфизация фуллерена C<sub>70</sub> частично обратима при гидростатических давлениях порядка 33 GPa, что согласуется с ранее полученными результатами [17]. При осевом сжатии мы наблюдали сохранение структуры фуллерена C<sub>70</sub> при давлениях порядка 46 GPa. Данный результат требует дальнейших исследований в условиях гидростатического сжатия.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов. УФН, **165** (9), 977 (1995). DOI: 10.3367/UFNr.0165.199509a.0977
- [2] W.H. Powell, F. Cozzi, G.P. Moss, C. Thilgen, R.J.-R. Hwu, A. Yerin. Pure Appl. Chem., **74** (4), 629 (2002). DOI: 10.1351/pac200274040629
- [3] К.П. Мелетов, А.А. Максимов, И.И. Тартаковский. ЖЭТФ, **111** (1), 262 (1997). [К.Р. Meletov, A.A. Maksimov, I.I. Tartakovskii. J. Exp. Theor. Phys., **84**, 144 (1997). DOI: 10.1134/1.558143]
- [4] B. Sundqvist. Adv. Phys., **48** (1), 1 (1999). DOI: 10.1080/000187399243464
- [5] C. Christides, I.M. Thomas, T.J.S. Dennis, K. Prassides. Europhys. Lett., **22** (8), 611 (1993). DOI: 10.1209/0295-5075/22/8/009
- [6] С.Н. Соколов, В.В. Милявский, Т.И. Бородина, А.З. Жук. Рос. хим. журн., **50** (1), 101 (2006).
- [7] B. Sundqvist. Diamond & Rel. Mat., **73**, 143 (2017). DOI: 10.1016/j.diamond.2016.09.001
- [8] Т.Л. Макарова. ФТП, **35** (3), 257 (2001). [Т.Л. Makarova. Semiconductors, **35** (3), 243 (2001). DOI: 10.1134/1.1356145]
- [9] В.Д. Бланк, К.В. Гоголинский, В.Н. Денисов, В.А. Ивденко, Б.Н. Маврин, Н.Р. Серебряная, С.Н. Сульянов. ЖТФ, **72** (12), 49 (2002). [V.D. Blank, V.N. Denisov, V.A. Ivdenko, B.N. Mavrin, N.R. Serebryanaya, K.V. Gogolinsky, S.N. Sulyanov. Tech. Phys., **47** (12), 1533 (2002). DOI: 10.1134/1.1529943]
- [10] V.D. Blank, S.G. Buga, G.A. Dubitsky, N.R. Serebryanaya, M.Yu. Popov, B. Sundqvist. Carbon, **36** (4), 319 (1998). DOI: 10.1016/S0008-6223(97)00234-0
- [11] M. Alvarez-Murga, J.L. Hodeau. Carbon, **82**, 381 (2015). DOI: 10.1016/j.carbon.2014.10.083
- [12] A.V. Soldatov, G. Roth, A. Dzyabchenko, D. Johnels, S. Lebedkin, C. Meingast, B. Sundqvist, M. Haluska, H. Kuzmany. Science, **293**, 680 (2001). DOI: 10.1126/science.1061434
- [13] D. Liu, M. Yao, L. Wang, Q. Li, W. Cui, B. Liu, R. Liu, B. Zou, T. Cui, B. Liu, J. Liu, B. Sundqvist, T. Wagberg. J. Phys. Chem. C, **115**, 8918 (2011). DOI: 10.1021/jp2005666
- [14] D. Liu, B. Liu, B. Sundqvist, D. Dong, Zh. Li, D. Liu. Sci. Rep., **6**, 38470 (2016). DOI: 10.1038/srep38470
- [15] L. Marques, Y. Skorokhod, R. Soares. Carbon, **82**, 599 (2015). DOI: 10.1016/j.carbon.2014.10.063
- [16] H. Kawamura, M. Kobayashi, Y. Akahama, H. Shinohara, H. Sato, Y. Saito. Solid State Commun., **83** (8), 563 (1992). DOI: 10.1016/0038-1098(92)90652-P
- [17] N. Chandrabhas, A.K. Sood, D.V. Muthu, C.S. Sundar, A. Bharathi, Y. Hariharan, C.N. Rao. Phys. Rev. Lett., **73** (25), 3411 (1994). DOI: 10.1103/PhysRevLett.73.3411
- [18] A.K. Sood, N. Chandrabhas, D.V.S. Mumu, Y. Hariharan, A. Bharathi, C.S. Sundar. Philosophical Magazine B, **70** (3), 347 (1994). DOI: 10.1080/01418639408240211
- [19] S. Wasa, K. Suito, M. Kobayashi, A. Onodera. Solid State Commun., **114** (4), 209 (2000). DOI: 10.1016/S0038-1098(00)00024-7
- [20] P.H.M. van Loosdrecht, M.A. Verheijen, H. Meekes, P.J.M. van Bentum, G. Meijer. Phys. Rev. B, **47** (12), 7610 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevB.47.7610
- [21] D.S. Bethune, G. Meijer, W.C. Tang, H.J. Rosen, W.G. Golden, H. Seki, C.A. Brown, M.S. de Vries, Chem. Phys. Lett., **179** (1), 181 (1991). DOI: 10.1016/0009-2614(91)90312-W
- [22] Д.Н. Соколовский, Я.Ю. Волкова, В.Х. Осадченко, А.Н. Бабушкин. Изв. УНЦ РАН, **1**, 13 (2023). DOI: 10.31040/2222-8349-2023-0-1-13-18