

РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПОГЛОЩЕНИЯ В КОЛЕБАТЕЛЬНОМ СПЕКТРЕ КРИСТАЛЛА ПОЛИЭТИЛЕНА

Л. А. Грибов, И. В. Житлова, О. Б. Зубкова
и О. И. Кондратов

Проведен расчет частот и интегральных интенсивностей нормальных колебаний кристаллического полиэтилена, построена кривая спектрального распределения коэффициента поглощения. С этой целью вначале осуществлен расчет частот и интегральных интенсивностей нормальных колебаний полиэтиленовой цепи. Затем с учетом потенциалов атом-атомного взаимодействия для валентно несвязанных атомов водорода проведен расчет частот нормальных колебаний слоя и по данным расчета построены частотные поверхности. На основании анализа полученных результатов выбрана модель для решения задачи о частотах и интенсивностях кристаллического полиэтилена с учетом трехмерности структуры. Выбранная модель содержит две НН «связи» валентно несвязанных атомов водорода. Построенный ИК спектр близко совпадает с экспериментально наблюдаемым спектром.

Ранее в работах [1-4] и ряде других, находящихся в печати, были произведены расчеты кривых спектрального распределения коэффициентов поглощения колебательных спектров, которые непосредственно могли быть сопоставимы с экспериментальными ИК спектрами сложных соединений. Расчеты выполнялись на базе обычной полуэмпирической теории колебаний с учетом дополнительных эмпирических параметров — полупириин полос поглощения, отвечающих отдельным, наиболее интенсивным нормальным колебаниям. Особенно важными представляются нам результаты, полученные для полимеров, где такие расчеты позволяют давать достаточно надежную интерпретацию спектра в условиях многочисленных наложений. Принципиально, что спектральная кривая полимеров рассчитывалась на базе параметров, почти без изменений перенесенных из малых молекул. Таким образом, можно сказать, что расчеты полимеров относятся к категории расчетов *ab initio*.

Успех проведенных работ побудил нас попытаться рассчитать кристалл полимера, т. е. перейти от анализа одномерных структур к трехмерным. Для этого был выбран один из простейших кристаллических полимеров — полиэтилен, — для которого имеются достаточно надежные данные о спектре, геометрических, силовых и электрооптических параметрах: имелись все основания полагать, что силовые и электрооптические параметры могут быть непосредственно заимствованы из молекул парафинового ряда. Число степеней свободы повторяющейся единицы кристалла полиэтилена не слишком велико, что давало возможность произвести весь расчет на ЭВМ среднего класса (Минск-22). Расчет кристалла осуществлялся по способу, изложенному в работах [5, 6]. Этот способ является дальнейшим развитием для трехмерных структур ранее описанного для одномерных структур [7, 8], который был с успехом применен для расчета частот, интенсивностей и кривых спектрального распределения ряда полимерных молекул [9-11]. Для практической реализации метода был создан необхо-

димый парк программ для машины «Минск-22» [12-14]. Для расчета спектра кристалла разработана специальная программа для машины «Минск-22», реализующая нулевое приближение трехмерной задачи.

Кристалл полиэтилена ранее изучался рядом авторов [15-20]. При этом в теоретических работах проводились расчеты нормальных колебаний одномерной цепи. Взаимодействие цепей учитывалось только для двух нормальных колебаний в области 1460 и 720 см^{-1} и вводилось как возмущение, оказываемое окружением на данную цепь. Расчет интенсивностей в колебательном спектре полимера вообще не проводился. Таким образом, достаточно подробный теоретический анализ ИК спектра кристалла полиэтилена в литературе отсутствует. Нет таких расчетов и для других случаев. Следовательно, возникает принципиальная задача: проверить способность разработанной теории колебательных спектров полимеров, включая и трехмерные образования, служить надежной основой интерпретации спектров столь сложных объектов, какими являются кристаллические полимеры.

Решение всей задачи проводилось для идеального кристалла, в регулярной части которого содержалось не менее ста повторяющихся группировок. Из общей теории метода и проведенных конкретных расчетов следует, что в этом случае (при сохранении трансляционной симметрии) для вычисления активных в ИК спектре частот колебаний (им соответствуют индексы S_N, S_L, S_M , равные единице; смысл индексов смотри ниже) можно ограничиться нулевым приближением, которое обеспечивает достаточно высокую точность [21]. Полиэтилен рассматривался как трехмерный объект, состоящий из параллельно уложенных слоями одномерных цепей. В качестве слоя мы выбирали совокупность повторяющихся цепей, одинаковым образом ориентированных и расположенных вдоль кристаллографической оси b [15, 17]. В этом случае расстояние между центрами двух соседних цепей составляет 4.9 \AA и оказывается значительно меньшим, чем расстояние между двумя одинаковым образом ориентированными цепями полиэтилена, расположенными вдоль кристаллографической оси a — 7.4 \AA . Поэтому можно было считать взаимодействия между цепями вдоль оси a несущественными. В дальнейшем при расчетах мы их не учитывали. Поскольку кристаллографическая ячейка содержит две, расположенные взаимно перпендикулярно полиэтиленовые цепи, то модель, построенная из слоев, направленных вдоль оси b будет иметь чередующиеся слои, отличающиеся друг от друга взаимно перпендикулярным расположением полиэтиленовых цепей. С целью изучения влияния относительных колебаний звеньев цепи и цепей в слое и с целью последующего упрощения задачи на первом этапе был произведен расчет частотных ветвей в нулевом приближении теории для отдельных полиэтиленовых цепей. Затем на втором этапе осуществлялся расчет частотных поверхностей также в нулевом приближении теории для слоя, составленного из молекул, расположенных вдоль кристаллографической оси b . На третьем этапе изучались колебания двух связанных (образующих одну кристаллографическую ячейку) полиэтиленовых цепей. Расчет интенсивностей выполнен для выделенной цепи и пары цепей в приближении связанных осцилляторов.

При расчете колебаний цепи использовались геометрические параметры, принятые для данного класса соединений [22]. $\text{CC} = 1.54$ \AA , $\text{CH} = 1.1$ \AA , $\angle \text{CCN} = 108^\circ 42' 30''$, $\angle \text{CCC} = 112^\circ$, $\angle \text{HCH} = 110^\circ$.

Силовые постоянные перенесены без изменений из парафинов [23, 24] (в единицах 10^6 см^{-2})

$$K_{\text{CC}} = 7.02, K_{\text{CH}} = 7.7, K_{\text{CCC}} = 1.1, K_{\text{CCN}} = 1.05, K_{\text{HCH}} = 0.69, H_{\text{CC}}^{\text{CC}} = 0.05,$$

$$H_{\text{CC}}^{\text{CC}} = 0.43, H_{\text{CC}}^{\text{CH}} = 0.43, H_{\text{CH}}^{\text{CH}} = 0.05, H_{\text{CC}}^{\text{HCH}} = 0.35, l_{\text{CC}}^{\text{CH}} = -0.035, l_{\text{CH}}^{\text{CC}} = -0.035,$$

$$m = 0.006, n = -0.026, l_{\text{CH}}^{\text{HCH}} = -0.035.$$

Электрооптические параметры для расчета интенсивностей полагались отличными от нуля только для связей СН и были приняты равными

$$\nu_{\text{СН}} = 0.28D, \quad \frac{\partial \nu_{\text{СН}}}{\partial q_{\text{СН}}} = 0.71 \frac{D}{\text{Å}}, \quad \frac{\partial \nu_{\text{СН}}}{\partial q_{\text{СН}'}} = 0.1 \frac{D}{\text{Å}} \quad [25].$$

Оказалось, что в этом приближении удается получить вполне удовлетворительное совпадение расчетного и экспериментального спектров. Это в сущности означает, что интенсивности всех практически наблюдаемых в интервале $3000 \div 700 \text{ см}^{-1}$ полос поглощения определяются лишь движением связей СН даже в тех случаях, когда в колебании принимает заметное участие скелет.

При расчете слоя вставал вопрос о выборе силовых постоянных невалентных взаимодействий ближайших атомов двух соседних цепей слоя.

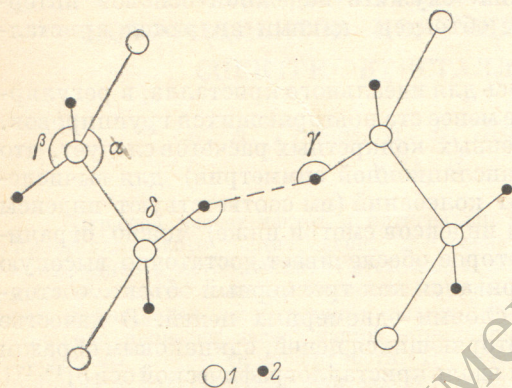


Рис. 1. Совокупность транслируемых естественных колебательных координат, использованных при расчете нормальных колебаний слоя.

1 — атом углерода, 2 — атом водорода.

С помощью модели атом-атомных потенциалов, основываясь на результатах работ [26-28], были оценены силовые постоянные взаимодействия. С этой целью вначале оценивались расстояния между атомами соседних цепей. Взаимодействие атомов, расположенных друг от друга на расстоянии, большем чем 3 Å , не учитывались. Это непосредственно следует из формы атом-атомных потенциалов и совпадает с выводами ряда авторов [27, 28]. В результате численного анализа были сохранены взаимодействия только Н...Н-атомов двух соседних цепей, расположенных на расстоянии 2.67 Å .

При расчете частот колебаний слоя взаимодействие двух соседних цепей моделировалось введением «связи» НН с силовой постоянной $u = 0.023 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$. Наряду с дополнительной координатой «связи» НН учитывались координаты углов, силовые постоянные которых полагались на порядок меньше. В качестве повторяющегося звена на этом этапе выбиралась структура, содержащая колебательные координаты, показанные на рис. 1 (две связи СС, две метиленовые группы, прилежащие к ним углы, НН «связь»). Повторяющееся звено транслировалось вдоль по цепи и вдоль по слою (перпендикулярно цепи). Трансляции вдоль по цепи соответствует индекс S_N , а вдоль по слою индекс S_L . Эти индексы характеризуют форму плоских стоячих волн, образующихся при нормальных колебаниях слоя. В случае слоя значение каждой частоты зависит от двух индексов S_N и S_L , принимающих все целые значения соответственно от 1 до N и от 1 до L , где N — число звеньев в цепи, а L — число цепей в слое. Эта зависимость частот от значения индексов S_N и S_L может быть наглядно изображена в форме частотных поверхностей (рис. 2). Расчеты проводились для следующих сочетаний индексов N и L :

- $L = 1, N = 1, 10, 20, 30 \dots 100,$
- $L = 25, N = 1, 10, 20, 30 \dots 100,$
- $L = 50, N = 1, 10, 20, 30 \dots 100,$
- $L = 75, N = 1, 10, 20, 30 \dots 100,$
- $L = 100, N = 1, 10, 20, 30 \dots 100.$

Это давало возможность достаточно полно представить себе все спектральные поверхности, отвечающие слою. Число поверхностей равняется

числу независимых координат транслируемого звена. Вид этих поверхностей позволяет сделать следующие заключения. Во-первых, поверхности, отвечающие валентным колебаниям связей СН, представляют собой практически плоскости. Следовательно, можно считать, что они не взаимодействуют заметно с колебаниями соседних звеньев ни вдоль цепи, ни вдоль по слою. По мере перехода в более низкочастотную область поверхности начинают искривляться, причем этот изгиб составляет значительную величину только вдоль оси S_N . Изгиб вдоль оси S_L во всех случаях получается незначительным и сдвиг крайних точек составляет максимум 20 см^{-1} . Это означает, как и следовало ожидать, что существенными являются только взаимодействия колебаний, передающихся вдоль цепи. Взаимодействия колебаний, отвечающих транслируемой ячейке (рис. 1), при трансляции вдоль по слою оказываются в большинстве случаев пренебрежимо малыми. В сущности это означает, что для изучения двумерной структуры

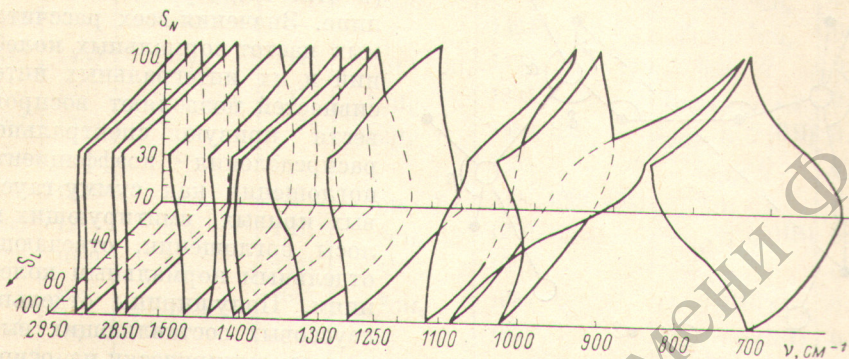


Рис. 2. Вид частотных поверхностей, полученных при расчете нормальных колебаний слоя полиэтилена.

достаточно рассчитать только одномерную цепь, составленную из звеньев, показанных на рис. 1, с включением НН «связи». Данное обстоятельство было учтено нами и использовано для упрощения последующих расчетов взаимодействующих слоев.

При расчете слоя не возникает характерной для кристаллического полиэтилена дублетной структуры ряда полос. Происходит незначительный сдвиг частот некоторых колебаний по сравнению со свободной цепью.

Для расчета эффектов, связанных с трехмерностью структуры, была выбрана модель двух взаимодействующих цепей, образующих одну кристаллографическую ячейку [15]. В принятой модели цепи располагаются перпендикулярно друг к другу. Результаты предыдущих расчетов слоя дают основание утверждать, что эффект трансляции ячейки вдоль оси a не должен быть значительным, и его учет лежит на грани точности метода. Расстояние между атомами разных цепей определялись на основании данных, приводимых в работах [15, 17]. Как и в случае слоя, силовые постоянные невалентных взаимодействий оценивались на основании атом-атомных потенциалов. Взаимодействие двух цепей моделировалось введением двух НН «связей» между ближайшими атомами на расстоянии $r_1 = 2.5 \text{ \AA}$ и $r_2 = 2.84 \text{ \AA}$. Этому соответствовали силовые постоянные «связей», равные $u_1 = 0.038 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$, $u_2 = 0.015 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$, силовые постоянные углов полагались на порядок меньшими. В дальнейшем выяснилось, что при таких значениях силовых постоянных расстояние между максимумами кристаллических дублетов получается несколько завышенным. Поэтому силовая постоянная более длинной НН «связи» была уменьшена: $u_2 = 0.006 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$. Пришлось также несколько видоизменить силовые постоянные углов НСН и ССН в пределах 0.1 в одной из цепей. Это указывает на то, что две цепи в кристаллографической ячейке не являются полностью идентичными, хотя различие это невелико и во многих случаях им можно пренебречь.

При исследовании связанных цепей в качестве транслируемого звена была выбрана структура, показанная на рис. 3 (4 связи СС, 4 метиленовые группы, прилежащие к ним углы, две НН «связи»), в результате чего расчет двух цепей сводился к расчету одной цепи. При таком рассмотрении уже возникает расщепление отдельных полос поглощения, наблюдаемое в кристалле полиэтилена, причем по величине достаточно близко совпадающее с экспериментальным.

На заключительном этапе с помощью модели связанных осцилляторов (с указанными выше электрооптическими параметрами) в нулевом приближении теории для колебаний с индексами $s=1$ (наиболее активные в ИКС колебания при трансляционной симметрии) были проведены расчеты интегральных интенсивностей всех нормальных колебаний. Полученные результаты для частот колебаний и интегральных интенсивностей (в отн. ед.) приводятся в таблице. Значения всех рассчитанных частот нормальных колебаний и их интегральных интенсивностей позволяют воспроизвести кривую спектрального распределения коэффициентов поглощения как сумму гауссовых кривых, имитирующих полосы поглощения, отвечающие отдельным нормальным колебаниям. Полуширины отдельных гауссовых составляющих выбирались эмпирически на основании экспериментального спектра. Окончательные значения их приведены в таблице. В результате такой процедуры удастся построить спектральную кривую, весьма близкую к экспериментальной (рис. 4).

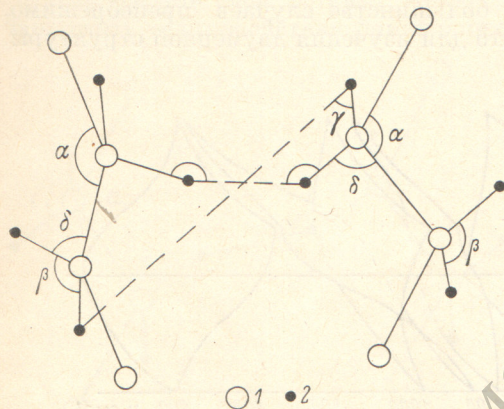


Рис. 3. Совокупность транслируемых колебательных координат, использованных при расчете нормальных колебаний связанных цепей кристаллографической ячейки полиэтилена.

1 — атом углерода, 2 — атом водорода.

Сопоставление вычисленного и экспериментального спектров показывает, что дублеты в области 720 и 1460 см^{-1} возникают за счет взаимодействия двух полиэтиленовых цепей, образующих одну кристаллографическую ячейку. Слабые полосы в области $1400 \div 1300$ см^{-1} также должны были бы иметь дублетную структуру, которая не проявляется, однако, из-за сильного перекрытия полос. Максимум в области 2860 см^{-1} получается в результате наложения четырех нормальных колебаний, каждая пара которых возникает уже при расчете изолированной цепи. В литературе имеются указания на экспериментальное обнаружение дублета в этой области [18]. Реально здесь должен существовать квартет, однако из-за близости колебаний трудно надеяться на экспериментальное разрешение всех максимумов этого квартета. К сожалению, достигнутая сейчас точность расчета не позволяет с уверенностью ответить на вопрос, является ли наблюдаемая дублетная структура в этой области результатом действия кристалличности образца или просто проявлением двух колебаний одной и той же цепи. В области 2925 см^{-1} экспериментально, как правило, наблюдается одиночный максимум, хотя в работе [18] указывается на расщепление данной полосы. Согласно расчету, в этой области должны существовать два интенсивных нормальных колебания, которые возникают в результате взаимодействия двух цепей в кристаллографической ячейке.

Отметим, что для согласования экспериментального и вычисленного спектров пришлось принять для компонентов дублетов кристаллического расщепления несколько разные полуширины (см. таблицу). Эти различия невелики. Вид экспериментального спектра указывает на то, что полуширины действительно несколько различаются друг от друга, однако сейчас

Экспериментальные и рассчитанные при $S=1$ частоты и интегральные интенсивности полиэтилена

Экспериментальный спектр [20, 21]	Расчет цепи		Расчет слоя		Расчет кристалла		Интегральные интенсивности, отн. ед.	Полуширина см^{-1}
	частота, см^{-1}	форма колебаний	частота, см^{-1}	форма колебаний	частота, см^{-1}	форма колебаний		
2919	2927	q_{CH_2}	2925	q_{CH_2}	2925, 2914	q_{CH_2}	2.38	50
2883	2888	q_{CH_2}	2897	q_{CH_2}	2885, 2893	q_{CH_2}	0.0	—
2851	2858	q_{CH_2}	2869	q_{CH_2}	2861, 2863	q_{CH_2}	1.46	50
2848	2845	q_{CH_2}	2851	q_{CH_2}	2855, 2857	q_{CH_2}	0.62	50
1473	1474	$\beta_{\text{CH}_2}, \delta_{\text{CH}_2}$	1470	β_{CH_2}	1474	$\beta_{\text{CH}_2}, \delta_{\text{CH}_2}$	0.36	8
1463	—	—	—	—	1462	$\beta_{\text{CH}_2}, \delta_{\text{CH}_2}$	0.36	6
1440	1435	δ_{CH_2}	1448	$\gamma, \delta_{\text{CH}_2}, \beta_{\text{CH}_2}$	1433	δ_{CH_2}, Q	0.0	—
1415	1399	$\beta_{\text{CH}_2}, \delta_{\text{CH}_2}$	1415	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma$	1394	$\delta_{\text{CH}_2}, \beta_{\text{CH}_2}, \gamma$	0.0	—
1367	1379	δ_{CH_2}	1371	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma$	1380, 1382	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma, Q(\text{HH})$	0.35	60
1352	—	—	—	—	1354	δ_{CH_2}, Q	0.35	60
1306	1325	δ_{CH_2}	1324	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma$	1306, 1301, 1317	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma$	0.0	—
1295	1288	δ_{CH_2}	1261	δ_{CH_2}	1280, 1233	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma, Q(\text{HH})$	0.0	—
1176	1099	δ_{CH_2}	1131	Q, γ	1091	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma$	0.0	—
1134	1085	δ_{CH_2}	1087	δ_{CH_2}	1084	$Q, Q(\text{HH}), \delta_{\text{CH}_2}$	0.0	—
1061	—	—	—	—	1071	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma, Q(\text{HH})$	0.0	—
1051	1037	Q, α	1027	Q, α	1043, 1040	Q, α	0.0	—
731	—	—	—	—	733	$\delta_{\text{CH}_2}, Q(\text{HH})$	0.14	8
720	714	δ_{CH_2}	710	δ_{CH_2}	713	$\delta_{\text{CH}_2}, \gamma$	0.14	6

Примечание. α — координата ССС, β — координата НСН, δ — координата ССН, γ — координата СНН, Q — координата СС, q — координата СН.
 В тех случаях, когда имеется наложение близких по частоте полос, указывается их суммарная интенсивность и полуширина.

трудно с уверенностью ответить на этот вопрос. В самом деле, точных приемов определения полуширин полос в случае их перекрывания не существует. Сделанные же выше замечания о неполной идентичности двух цепей в кристаллографической ячейке требуют, вообще говоря, небольшого различия для значений электрооптических параметров двух таких цепей. Это нами не учитывалось, так как мы не обладаем методом, который позволил бы уверенно ввести это различие. Возможно, что решение задачи с несколько различными параметрами для двух цепей дает возможность построить спектральную кривую при совпадающих полуширинах дублетов. Однако мы считаем, что проводить такую работу при общей точности всех расчетов едва ли целесообразно.

В заключение отметим, что анализ форм колебаний связанных цепей показывает, что компоненты вычисляемых дублетов по форме в основном определяются разного вида колебаниями СН либо одной, либо другой цепи, смешивание колебаний весьма незначительное. Стало быть, это расщепление не может быть отнесено к категории резонансного. Отсутствие резонанса в этом случае объясняется взаимно перпендикулярным расположением цепей, и как следствие этого — взаимно перпендикулярным движением атомов разных цепей для одинаковых нормальных колебаний самих цепей.

Таким образом, проведенный расчет показывает, что средствами разработанной теории можно достаточно подробно и точно анализировать не только одномерные модели полимерных цепей, но и трехмерный кристалл. При этом для расчетов межцепных взаимодействий могут быть использованы невалентные атом-атомные потенциалы. Возможны упрощения расчетов путем последовательного изучения колебаний одиночной цепи и не-

большого числа связанных цепей. Во многих случаях, по-видимому, удовлетворительная спектральная картина может быть получена уже при использовании модели изолированной цепи или двух параллельных цепей.

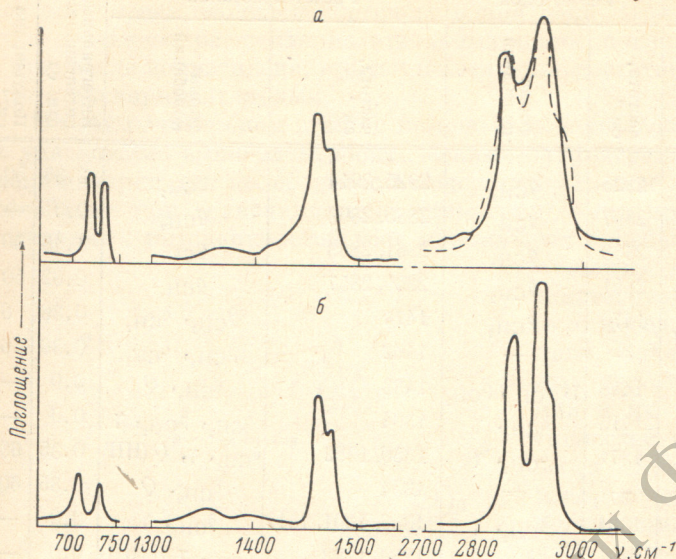


Рис. 4. Экспериментальные (а) и теоретический (б) спектры кристаллического полиэтилена.

Экспериментальный спектр заимствован из работ [28] (сплошная кривая) и [18] (штриховая кривая).

Литература

- [1] Л. А. Грибов, О. Б. Зубкова, О. И. Кондратов. ДАН СССР, 205, 1121, 1972.
- [2] В. А. Дементьев, М. П. Носкова, Л. А. Грибов. Опт. и спектр., 33, 1004, 1972.
- [3] Л. А. Грибов, О. Б. Зубкова. Ж. прикл. спектр., 18, 1028, 1973.
- [4] Л. А. Грибов, И. В. Житлова, О. И. Кондратов. Опт. и спектр., 36, 911, 1974.
- [5] Л. А. Грибов. Опт. и спектр., 29, 876, 1970.
- [6] Л. А. Грибов. Опт. и спектр., 37, 67, 1974.
- [7] Л. А. Грибов, Т. С. Абилова. Опт. и спектр., 23, 374, 1967.
- [8] Л. А. Грибов, Т. С. Абилова. Опт. и спектр., 23, 535, 1967.
- [9] Л. А. Грибов, О. И. Кондратов. Ж. прикл. спектр., 17, 132, 1972.
- [10] Л. А. Грибов, О. И. Кондратов, А. В. Котов. Ж. прикл. спектр., 17, 1074, 1973.
- [11] Л. А. Грибов, О. И. Кондратов. Ж. прикл. спектр., 18, 289, 1973.
- [12] В. А. Дементьев, О. И. Кондратов, Л. А. Грибов, Л. И. Кашкан. Изв. Тимирязевск. с.-х. академии, 2, 203, 1970.
- [13] О. И. Кондратов, Л. А. Грибов. Изв. Тимирязевск. с.-х. академии, 5, 204, 1972.
- [14] В. А. Дементьев. Изв. Тимирязевск. с.-х. академии, 6, 204, 1971.
- [15] C. W. Bunn. Trans. Farad. Soc., 35, 482, 1939.
- [16] R. S. Stein, G. V. B. M. Sutherland. J. Chem. Phys., 21, 370, 1953.
- [17] R. S. Stein. J. Chem. Phys., 23, 734, 1955.
- [18] S. Krimm, C. J. Lang, G. V. B. M. Sutherland. J. Chem. Phys., 25, 549, 1956.
- [19] J. R. Nielsen, R. F. Holland. J. Mol. Spectr., 6, 394, 1961.
- [20] J. R. Nielsen, A. H. Woolet. J. Chem. Phys., 26, 1391, 1957.
- [21] Л. А. Грибов, Т. С. Абилова. Опт. и спектр., 26, 915, 1969.
- [22] T. P. Lin, J. L. Koenig. J. Mol. Spectr., 9, 228, 1962.
- [23] Л. А. Грибов, Е. М. Попов. Усп. химии, 35, 531, 1966.
- [24] Ю. Я. Готлиб, М. В. Кудинская. Опт. и спектр., 10, 531, 1961.
- [25] Л. А. Грибов. Теория интенсивностей в инфракрасных спектрах многоатомных молекул. Изд. АН СССР, М., 1963.
- [26] T. Hill. J. Chem. Phys., 16, 399, 1948.
- [27] Н. П. Борисова, М. В. Волькенштейн. Ж. структ. хим., 2, 346, 1961.
- [28] Ю. Я. Готлиб, Л. В. Кудинская. Опт. и спектр., 9, 591, 1962.
- [29] Р. Збинден. Инфракрасная спектроскопия высокополимеров. Изд. «Мир», М., 1966.