

УДК 539.194.01

**РАСЧЕТ ПОЛНОГО КВАРТИЧНОГО ПОТЕНЦИАЛА
МОЛЕКУЛ ОЗОНА И ЕГО ИЗОТОПОЗАМЕЩЕННЫХ
(СИММЕТРИИ C_{2v}) НА ОСНОВЕ НОВОГО МЕТОДА
УСРЕДНЕНИЯ ПРИБЛИЖЕННЫХ РЕШЕНИЙ**

A. I. Скотников, E. B. Ярославская и L. M. Свердлов

Предложена модификация описанного ранее [20] алгоритма решения обратной ангармонической механической спектроскопической задачи, позволяющая находить полное квартичное силовое поле по экспериментальным данным только одного изотопа молекулы. Методика проверена на молекулах H_2S , H_2Se , NO_2 , SO_2 , H_2O , для которых ранее было получено строгое решение и, применена для решения обратной задачи для молекулы озона, экспериментальная информация по которой недостаточна для использования основного алгоритма. Решение прямой задачи для молекул $^{16}O_3$, $^{18}O_3$, $^{16}O^{18}O^{16}O$, $^{18}O^{16}O^{18}O$ показывает, что полученное силовое поле наилучшим образом из всех имеющихся в литературе воспроизводит известные из эксперимента значения спектроскопических величин. Дан анализ прежних экспериментальных и теоретических работ по определению ангармонического силового поля этой молекулы.

**I. Обзор экспериментальных и теоретических
спектроскопических работ
по изотопозамещенным молекулы озона**

Имеется очень большое число экспериментальных работ по колебательно-вращательным спектрам этой важной молекулы. Рассмотрим наиболее важные для наших целей работы, вышедшие после 1960 г. В [1] в приближении жесткого ротора анализирована 101 полоса $^{16}O_3$ и получена эффективная вращательная постоянная $X_{101}^{\text{эфф}}$, составная частота ν_{101} и постоянная ангармоничности x_{13} , входящая в двухчленную формулу для колебательных термов. Инфракрасный спектр $^{16}O_3$ сняли авторы работы [2] и обработали его для получения нульевых частот ω_s и $x_{ss'}$ без учета резонанса Дарлинга—Деннисона [3], исправив x_{13} работы [1]. Кориолисово взаимодействие в ν_1 и ν_3 полосах $^{16}O_3$ с уточнением значений ν_1 и ν_3 и получением невозмущенных значений $X_{100}^{\text{эфф}}$ и $X_{001}^{\text{эфф}}$ рассмотрено в работе [4]. Далее, чисто колебательный спектр $^{16}O_3$ в жидкой и газовой фазах измерен в [5, 6]; авторы обрабатывают его для получения ω_s и $X_{ss'}$ без учета резонанса Дарлинга—Деннисона. Тщательное изучение вращательной структуры полос ν_{100} , ν_{010} , ν_{020} и ν_{001} $^{16}O_3$ с учетом резонанса Кориолиса для полос ν_{100} и ν_{001} было проведено в [7], что позволило определить начало полосы ν_{010} [8]. Вращательные постоянные основного состояния $^{16}O_3$ с учетом в гамильтониане шестых степеней оператора углового момента определены в [9]. В [10] в приближении жесткого ротора получены значения $X_{111}^{\text{эфф}}$, $^{16}O_3$. Авторы работы [11] еще раз снимают спектр $^{16}O_3$ и обрабатывают его с учетом резонанса Дарлинга—Деннисона для получения ω_s , $x_{ss'}$ и резонансной постоянной γ ; аналогичная работа проделана ими и для $^{18}O_3$. Кроме того, они также интерпретировали несколько колебательных частот молекул ^{16}O , ^{18}O , ^{16}O и ^{18}O , ^{16}O , ^{18}O . Для всех указанных изотопов в [12] получено в уотсоновском представлении гамильтониана [13] $X_{000}^{\text{эфф}}$.

Анализ всех указанных экспериментальных работ при помощи условий корректности вращательного и колебательного экспериментов во втором порядке теории возмущений [14]

$$\frac{\pi^2 c}{h} \left[\omega_1 \left(\frac{\Delta_{v_1} - \Delta_0}{v_1} \right) + \omega_2 \left(\frac{\Delta_{v_2} - \Delta_0}{v_2} \right) + \omega_3 \left(\frac{\Delta_{v_3} - \Delta_0}{v_3} \right) \right] = 1, \quad (1)$$

$$\nu_{v_1 v_2 v_3} = (2 - v_1 - v_2 - v_3) (v_1 \nu_{100} + v_2 \nu_{010} + v_3 \nu_{001}) + 0.5 [v_1 (v_1 - 1) \nu_{200} + v_2 (v_2 - 1) \nu_{020} + v_3 (v_3 - 1) \nu_{002}] + [v_1 v_2 \nu_{110} + v_1 v_3 \nu_{101} + v_2 v_3 \nu_{011}], \quad (2)$$

где v_s — квантовое число s -го колебательного состояния, Δ — дефекты инерции, показал, что наиболее корректные значения экспериментальных частот содержатся в работе [11]. Однако гармонические силовые постоянные f_{ij} не вычисляются из ω_s $^{16}\text{O}_3$ и $^{18}\text{O}_3$ этой работы — дискриминант квадратного уравнения оказывается отрицательным, что говорит о наличии каких-то, по-видимому, небольших, погрешностей эксперимента (или в его обработке). На наличие погрешностей указывает также анализ высших колебательных состояний молекул $^{16}\text{O}_3$ и $^{18}\text{O}_3$ с помощью уравнения (2), который отражен в табл. 1. Из анализа таблицы можно сделать вывод о сомнительности значений частот 003 и 103 уровней молекулы $^{18}\text{O}_3$.¹

Таблица 1

Анализ высших ($\sum_s v_s \geq 3$) экспериментальных частот колебательных переходов для $^{16}\text{O}_3$ и $^{18}\text{O}_3$ с помощью уравнения (2) (частоты в обратных сантиметрах)

$v_1 v_2 v_3$	$^{16}\text{O}_3$		$^{18}\text{O}_3$	
	опыт	расчет	опыт	расчет
000	0	0	0	0
021	2409.5	2409.9	—	—
120	2485 *	2487	—	—
012	2725.6	2725.7	2579.5	2580.5
111	2785.2	2786.3	2634.3	2634.0
003	3046.0	3047.7	2883	2893
102	3084.1	3092.2	—	—
201	3185.7	3174.5	3012.6	3001.2
121	3457.5	3461.5	3271	3270
013	3697.2	3698.8	3501.4	3498.8
211	3849.4	3841.3	—	—
004	4026.5	4011.2	—	—
103			3814.1	3830.1

* Жидкая фаза.

Значения постоянных $X_{100}^{\text{эфф.}}$, $X_{010}^{\text{эфф.}}$, $X_{001}^{\text{эфф.}}$ из работы [7] и $X_{000}^{\text{эфф.}}$ из работы [12] дают значение правой части уравнения (1), равное 1.29, что говорит о недостаточной корректности, по-видимому, значения $X_{000}^{\text{эфф.}}$.

Ангармоническое силовое поле озона определялось в работах [7, 11, 15–17]. Сравнение различных наборов силовых постоянных, приведенных к нашей системе единиц и обозначений, дано в табл. 2. Авторы [7] решили только кубическую часть задачи с использованием недостаточно точной экспериментальной информации по колебательным частотам для определения f_{ij} . В работах [15, 16] квартичное силовое поле определялось на основании найденных из газовой фазы постоянных колебательно-вращательного взаимодействия $b_s^{\alpha\alpha}$, входящих в формулу для $X^{\text{эфф.}}$, и колебательного эксперимента по жидкому озону. Авторы [17] пренебрегают квартичными

¹ Действительно, согласно уравнения (2), имеем: $\nu_{003} = (\nu_{002} - \nu_{001})$, $\nu_{103} = 3(\nu_{002} + \nu_{102}) - 2(\nu_{100} + 3\nu_{001})$. В предположении адекватности используемой теории можно считать, что утроенное уменьшение частоты ν_{002} за счет резонанса Дарлинга—Деннисона должно дать расчетные значения частот ν_{003} и ν_{103} ниже (или не больше) их экспериментальных значений.

Таблица 2

Квадратичные, кубичные и квартичные силовые постоянные в точных естественных координатах молекулы озона (в ед. 10^5 дин/см, 10^{13} дин/см 2 и 10^{21} дин/см 3 соответственно)

$\begin{matrix} ij \\ ijk \\ ijkl \end{matrix}$	[7]	[15]	[16]	[11]	Наш расчет
11	6.16	6.20	6.44	6.16	6.1644
12	1.49	1.73	1.87	1.60	1.6022
13	0.42	0.43	0.51	0.40	0.4021
33	1.31	1.32	1.21	1.30	1.3000
111	-9.03	-9.38	-10.13	-9.15	-9.1351
112	-0.40	-0.52	-0.56	-0.44	-0.4254
113	-0.42	-0.47	-0.25	-0.41	-0.4034
123	-0.15	-0.20	-0.28	-0.17	-0.1581
133	-0.40	-0.42	-0.23	-0.40	-0.3991
333	-0.32	-0.32	-0.23	-0.31	0.3133
1111	—	14.32	16.10	16.45	11.2576
1112	—	-0.40	0.54	2.92	-1.0615
1113	—	-0.37	0.15	0	-0.5611
1122	—	-0.65	0.62	2.69	-0.9053
1123	—	0.21	0.24	0	-0.0993
1133	—	0.19	0.14	-0.81	0.3562
1233	—	0.16	0.18	-0.81	0.2970
1333	—	0.30	0.16	0	0.1880
3333	—	0.17	0.21	0.56	0.2238

силовыми постоянными $f_{1113}, f_{1123}, f_{1333}$ и не учитывают резонанс Дарлинга — Деннинсона. В следующей работе [11] они пересчитали силовое поле с ω_s и $x_{ss'}$, исправленными на резонанс, но опять-таки в пренебрежении $f_{1113}, f_{1123}, f_{1333}$. Такое приближение, как будет показано ниже, является в конечном счете довольно грубым, хотя решение прямой задачи, проведенное нами с их силовым полем, дает довольно хорошую воспроизведимость $b_s^{\alpha\alpha}$ и v_s , — ($v_s^{\text{выч.}} - v_s^{\text{эксп.}}$) $\leq 8 \text{ см}^{-1}$ для упомянутых выше изотопов озона. Мы также решили прямую задачу с силовым полем Ванга и Оверенда [16]. Модельный потенциал, используемый в работе, как по данным авторов, так и в нашем расчете, плохо воспроизводит экспериментальные значения $b_s^{\alpha\alpha}$, а колебательные частоты газовой фазы, что естественно, воспроизводятся с погрешностью $\Delta v_s \approx 15 \div 20 \text{ см}^{-1}$; кроме того, $x_{22} > 0$ ($\approx 0.6 \text{ см}^{-1}$).

Таким образом, можно считать, что полная квартичная потенциальная функция озона в пределах возможностей теории колебательно-вращательного взаимодействия [18] еще не определена.

II. Приближенный метод расчета квартичных силовых постоянных

Алгоритм расчета ангармонической потенциальной функции молекулы озона базируется на теории [18], сформулированной в нормальных координатах, и способе перехода к точным естественным координатам, предложенным в [19]. Алгоритм описан в работе [20] и здесь не повторяется. В рамках этой теории квадратичные f_{ij} и кубичные f_{ijk} силовые постоянные определяются, в принципе, по экспериментальным данным одного изотопа молекулы — $w_s, \Delta, b_s^{\alpha\alpha}$, постоянным центробежного искажения, постоянным Кориолиса. Для определения f_{ijkl} , однако, приходится привлекать экспериментальные значения частот (или $x_{ss'}$) еще одного изотопа молекулы, так как шести $x_{ss'}$ основного изотопа недостаточно для определения девяти f_{ijkl} . Для большинства молекул, однако, такой экспериментальной информации нет, или она недостаточна; кроме того, при малом изотопном замещении, т. е. практически для всех молекул, за исключением гидридов, система уравнений для определения f_{ijkl} становится

плохо обусловленной, что приводит к значительной трате времени для корректного решения обратной задачи. Это затруднение обычно обходится либо применением модельного потенциала, либо пренебрежением f_{1113} , f_{1123} , f_{1333} [7, 11, 21–23], что позволяет решать задачу по экспериментальным данным одного изотопа молекулы.

Статистика расчетов указывает, однако, что все f_{ijkl} , за исключением f_{1111} , малы и одного порядка, так что пренебрегать можно любыми тремя из восьми. При этом мы получаем 56 приближенных решений, которые в первом приближении можно считать равноправными. Как показывает решение соответствующей задачи для молекул H_2S , H_2Se , NO_2 , SO_2 , H_2O , проведенное нами на ЭВМ, f_{ijkl} в различных подвариантах имеют значительный разброс как по знаку, так и по порядку величины (особенно для гидридов, для которых Δf_{ijkl} составляет несколько тысяч соответствующих единиц). Таким образом, имеется полнейшая неопределенность и даже нефизичность (отрицательное значение f_{1111}) значений f_{ijkl} при вычислении их в такой постановке задачи.

Единственным критерием для устранения неоднозначности приближенных решений при отсутствии контроля по частотам изотопозамещенных молекулы является, по-видимому, только предположение, что истинное решение лежит где-то внутри интервала между экстремальными значениями f_{ijkl} , однако найти его мы не можем. Тем не менее можно попытаться просто усреднить f_{ijkl} по всем имеющим физический смысл подвариантам, ожидая, что полученные девять значений f_{ijkl} будут наиболее близки к истинным. С целью проверки гипотезы были получены таким способом для вышеуказанных молекул f_{ijkl} и решены прямые задачи для ряда соответствующих изотопозамещенных. Сравнение полученных результатов с результатами строгого решения² [14, 20, 24] показывает, что полученные f_{ijkl} , вообще говоря, в большинстве случаев не очень сильно отличаются от полученных при строгом решении, и лишь на несколько обратных сантиметров хуже последних воспроизводят экспериментальные значения колебательных частот изотопозамещенных молекул. Соответствующие таблицы численных значений не приводятся из-за недостатка места.

III. Решение обратной и прямой ангармонических механических задач для изотопозамещенных молекулы озона

Входными данными для решения обратной задачи являются: 1) постоянные f_{ij} , определенные из ω_s работы [11], и $\xi_{13}^2 = 0.36$ из работы [7]; 2) равновесные геометрические параметры $R_e = 1.2717 \text{ \AA}$, $\varphi_e = 116^\circ 47'$ [7] и массы атомов $m(^{16}\text{O}) = 15.994915$, $m(^{18}\text{O}) = 17.999153$ в а. е. м. по отношению к ^{12}C ; 3) при решении кубической части обратной задачи мы исключили вследствие близости в озоне ω_1 и ω_3 уравнения для b_1^{zz} и b_3^{zz} , положив в методе наименьших квадратов соответствующие веса равными нулю. Экспериментальные значения b_s^{zz} получены нами при применении двухчленной формулы для $X_{100}^{\text{эфф.}}$, $X_{010}^{\text{эфф.}}$, $X_{001}^{\text{эфф.}}$ из работы [7] и $X_{000}^{\text{эфф.}}$ из работы [12]; 4) невозможно получить девять f_{ijkl} по общей методике (работа [20]), так как вследствие пропорциональности матриц нормированных форм колебаний для $^{16}\text{O}_3$ и $^{18}\text{O}_3$ эксперимент по наиболее исследованной изотопной модификации молекулы $^{18}\text{O}_3$ не дает дополнительной информации — система из девяти уравнений для определения f_{ijkl} становится линейно зависимой. Поэтому полное квартичное силовое поле молекулы находилось по экспериментальным данным одного изотопа в соответствии с разд. II.

Далее, с полученным силовым полем мы решили прямую задачу для изотопов молекулы $^{16}\text{O}_3$, $^{18}\text{O}_3$, $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, $^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Результаты решения

² Под строгим решением понимается решение достаточной системы уравнений.

Таблица 3

Силовые постоянные в нормальных координатах молекул $^{16}\text{O}_3$, $^{18}\text{O}_3$, $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, $^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ (в обратных сантиметрах)*

Постоянная	$^{16}\text{O}_3$	$^{18}\text{O}_3$	$^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$	$^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$
k_{111}	— 48.1609	— 44.0800	— 47.6538	— 44.6350
k_{112}	— 29.7191	— 27.2009	— 26.7418	— 30.0455
k_{122}	— 24.0865	— 22.0455	— 24.4411	— 21.7414
k_{222}	— 19.2238	— 17.5949	— 18.1279	— 18.5525
k_{133}	— 225.8183	— 206.6838	— 218.0574	— 214.4440
k_{233}	— 59.3190	— 54.2926	— 50.6944	— 62.5462
k_{1111}	2.2312	1.9828	2.0442	2.4506
k_{1122}	— 2.4133	— 1.8824	— 1.4984	— 2.3933
k_{1133}	28.2527	25.1067	26.7960	26.5087
k_{2222}	0.6502	0.5778	0.5468	0.6635
k_{2233}	— 6.1747	— 5.4871	— 6.0105	5.5937
k_{3333}	6.6600	5.9184	6.2825	6.2924

* Квартичные силовые постоянные соответствуют усредненному квартичному полю в естественных координатах.

Таблица 4

Нулевые частоты ω_s , постоянные ангармоничности $x_{ss'}$, (в обратных сантиметрах) и постоянные колебательно-вращательного взаимодействия (в ед. 10^{-3} см $^{-1}$) некоторых изотопозамещенных озона

Постоянная	$^{16}\text{O}_3$		$^{18}\text{O}_3$		$^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$	$^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$
	опыт	расчет	опыт	расчет	опыт	расчет
ω_1	1134.9	1134.9	1070.0	1069.8	1105.7	1100.9
ω_2	716.0	716.0	674.8	675.0	707.1	682.8
ω_3	1089.2	1089.2	1026.5	1026.8	1052.7	1064.2
x_{11}	— 4.9	— 4.0	— 4.3	— 4.3	— 5.1	— 4.2
x_{12}	— 9.1	— 9.1	— 7.7	— 8.1	— 8.2	— 8.9 **
x_{13}	— 34.8	— 34.8	— 31.4	— 30.9	— 34.3	— 31.5
x_{22}	— 1.0	— 1.0	— 0.9	— 0.9	— 1.0	— 0.9
x_{23}	— 17.0	— 17.0	— 14.8	— 15.1	— 15.5	— 16.5
x_{33}	— 10.6	— 10.6	— 9.4	— 9.4	— 9.7	— 10.3
b_{1xx}^{yy}	— 2.98	— 2.98	—	— 2.50	— 0.51	— 6.22
b_1^{yy}	2.55	2.55	—	2.14	2.55	2.15
b_1^{zz}	2.32 *	2.28 *	—	0.95 *	2.24 *	1.94 *
b_2^{xx}	— 53.41	— 54.09	—	— 45.31	— 51.50	— 47.53
b_2^{yy}	1.27	1.26	—	1.05	1.20	1.10
b_2^{zz}	2.31	2.32	—	1.94	2.42	1.86
b_3^{xx}	53.12	53.12	—	44.50	46.90	50.61
b_3^{yy}	3.99	3.99	—	3.34	3.81	3.50
b_3^{zz}	3.61 *	3.56 *	—	2.98 *	3.23 *	3.26 *

* Невозмущенные значения.

** Экспериментальное значение равно -8.8 см^{-1} .

обратной и прямой задач предstawлены в табл. 2—5. Как видно из табл. 4, 5, полученное силовое поле очень хорошо воспроизводит всю совокупность известных из эксперимента спектроскопических величин для всех изотопозамещенных молекулы. Погрешность вычисления 41 частоты, значения которых известны из эксперимента, не превышает 2 см^{-1} . Кроме того, силовое поле дает значение x_{12} для $^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, равное -8.9 см^{-1} , что хорошо согласуется с его экспериментальным значением, равным -8.8 см^{-1} , которое определено нами из известных экспериментальных

Таблица 5

Сравнение вычисленных и экспериментальных колебательных частот молекул $^{16}\text{O}_3$, $^{18}\text{O}_3$, $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ и $^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ (в обратных сантиметрах)

$v_1 v_2 v_3$	$^{16}\text{O}_3$		$^{18}\text{O}_3$		$^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$		$^{18}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	
	опыт	расчет	опыт	расчет	опыт	расчет	опыт	расчет
000	0	0	0	0	0	0	0	0
010	700.93	700.95	661.7	661.6	—	693.3	—	668.2
001	1042.10	1042.10	984.6	984.9	1008.5	1008.4	1019.1	1019.5
100	1103.15	1103.15	1041.9	1041.6	—	1074.3	—	1072.3
020	1400 [2]	1400	—	1321.4	—	1384.6	—	1334.6
011	1726.4	1726.1	1631.2	1631.4	—	1686.2	1671.2	1671.2
110	1795.3	1795.0	1695.9	1695.1	—	1759.4	—	1731.6
002	2058.0	2057.5	1945.4	1946.3	—	—	—	—
200	2201.3	2202.0	2079.4	2079.3	—	—	—	—
101	2110.79	2110.45	1995.1	1995.6	2049.3	2048.5	2060.1	2060.2
021	2409.5	2408.0	—	2276.1	—	2362.0	—	2321.4
012	2725.6	2725.0	2579.5	2578.1	—	—	—	—
210	—	2884.2	—	2724.2	—	—	—	—
111	2785.24	2785.31	2634.3	2634.0	2718.1	2718.1	2703.4	2703.0
003	3046.0	3044.3	2883.2	2882.5	—	—	2980.3	2979.4
201	3185.7	3187.4	3012.6	3013.3	—	—	—	3109.7
121	3457.5	3458.1	3271.0	3270.6	—	3385.7	—	3344.0
013	3697.1	3696.1	3501.4	3500.3	—	—	—	—
211	3849.4	3851.3	—	3642.1	—	—	—	—
102	3084.1	3084.8	—	2920.6	—	—	—	—
300	—	3291.8	—	3108.9	—	—	—	—
103	—	4025.7	3814.1	3816.0	—	—	—	—
301	—	4253.5	—	4023.4	—	—	—	—

частот ν_{111} , ν_{101} , ν_{011} , ν_{001} . Таким образом, можно утверждать, что такое приближенное решение обратной задачи является корректным.

Все вычисления проводились на ЭВМ типа М-220.

Литература

- [1] S. Traimari, D. I. McCaa. J. Mol. Spectr., 14, 244, 1954.
- [2] D. I. McCaa, I. H. Shaw. J. Mol. Spectr., 25, 374, 1968.
- [3] B. T. Darling, D. M. Dennison. Phys. Rev., 57, 128, 1940.
- [4] S. A. Clough, F. X. Kneizys. J. Chem. Phys., 44, 1855, 1966.
- [5] A. Barbe, P. Jouve. C. R. Acad. Sci., 268B, 1723, 1969.
- [6] A. Barbe, C. Secroum, P. Jouve. C. R. Acad. Sci., 274B, 615, 1972.
- [7] Y. Tanaka, Y. Morino. J. Mol. Spectr., 33, 538, 1970.
- [8] T. Tanaka, Y. Morino. J. Mol. Spectr., 33, 552, 1970.
- [9] M. Lichtenstein, I. I. Gallagher, S. A. Clough. J. Mol. Spectr., 40, 10, 1974.
- [10] D. E. Snider, I. H. Shaw. J. Mol. Spectr., 44, 400, 1972.
- [11] A. Barbe, C. Secroum, P. Jouve. J. Mol. Spectr., 49, 171, 1974. J. Physiq., 33, 209, 1972.
- [12] I.-C. Depannecker, B. Duterae, I. Bellet. C. R. Acad. Sci., 279B, 287, 1974.
- [13] I. K. Watson. J. Chem. Phys., 46, 1935, 1967.
- [14] А. И. Скотников, Л. М. Свердлов. Опт. и спектр., 42, 88, 838, 1977.
- [15] D. F. Smith. Spectrochim. Acta, 29 A, 1517, 1973.
- [16] V. K. Wang, J. Overend. Spectrochim. Acta, 30 A, 237, 1974.
- [17] A. Barbe, C. Secroum, P. Jouve. J. Physiq., 34, 313, 1973.
- [18] H. H. Nielsen. Rev. Mod. Phys. 23, 90, 1951; Handbuch der Physik, edited S. Flügge (Springer-Verlag, Berlin, 1959), Vol. 38.
- [19] А. Я. Цауне, Н. Т. Сторчай, Л. В. Беляевская, В. П. Морозов. Опт. и спектр., 26, 923, 1969; В. П. Морозов, Н. Т. Сторчай. Опт. и спектр., 34, 882, 1973.
- [20] А. И. Скотников, Л. М. Свердлов. Опт. и спектр., 40, 68, 1976.
- [21] K. Kuchitsu, Y. Morino. Bull. Chem. Soc. Japan, 38, 805, 814, 1965.
- [22] H. Takeo, E. Hirota, Y. Morino. J. Mol. Spectr., 34, 370, 1970; 41, 420, 1972.
- [23] H. Takeo, R. F. Curl, P. W. Wilson. J. Mol. Spectr., 38, 464, 1971.
- [24] А. И. Скотников, Л. М. Свердлов. Ж. прикл. спектр., 26, 952, 1977; Опт. и спектр., 45, 480, 1978.

Поступило в Редакцию 19 октября 1978 г.