

УДК 546.21 : 535.34.096

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА БИМОЛЕКУЛЯРНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ КИСЛОРОДА В МАТРИЦЕ α -N₂

*Прихотько А. Ф., Островский В. С., Павлощук В. А.,
Пикус Ю. Г., Синяевский П. Н., Шанский Л. И.*

Рассмотрена зависимость интенсивности бимолекулярных переходов кислорода в твердом растворе в α -азоте, обусловленная изменением температурной заселенности уровней мультиплета основного состояния пары молекул O₂ и правилами отбора по полному спину пары для бимолекулярных переходов. Показано, что для молекул O₂ в α -азоте знак параметра обменного взаимодействия является «антиферромагнитным», а его величина составляет около 2.4 см⁻¹.

1. Поглощение света конденсированными фазами кислорода в области 7500—34 000 см⁻¹, как известно, в основном обусловлено так называемыми бимолекулярными электронными переходами, когда в акте поглощения принимают участие две взаимодействующие молекулы. При этом одним квантом света одновременно возбуждаются обе молекулы пары или одна из них. На бимолекулярный характер такого поглощения указывает квадратическая зависимость его интенсивности от плотности сжатого газообразного кислорода [1], а также от концентрации кислорода в жидких и твердых растворах [2, 3].

Установлено, что межмолекулярные взаимодействия, вызывающие бимолекулярные переходы в кислороде, имеют обменную природу. Обменный механизм объясняет разрешение по спину таких переходов и обеспечивает конечную их интенсивность [4-6].

Поскольку структура и интенсивность полос бимолекулярного поглощения определяются правилами отбора по спину и пространственной симметрией уровней основного и возбужденных состояний пары, то исследование этого поглощения дает возможность изучить энергетическую и спиновую структуру обменно-связанных пар кислородных молекул в различных матрицах, а также оценить параметр J обменного взаимодействия. Последний, как показывают расчеты [7], существенно зависит не только от расстояния между молекулами, но также и весьма сложным образом от взаимной ориентации молекул. С этой точки зрения изучение спектров твердых растворов O₂ в матрице α -N₂ представляет собой удобный случай, так как пары ближайших примесных молекул O₂ имеют только одну определенную геометрическую конфигурацию — молекулы O₂, замещая молекулы N₂, располагаются в вершине и центре грани кубической ячейки на расстоянии 4 Å и ориентируются вдоль непересекающихся пространственных диагоналей куба [8].

В данной работе исследована температурная зависимость интенсивности полос бимолекулярного поглощения кислорода в матрице α -N₂. Проведен расчет энергетической и спиновой структуры основного состояния пары обменно-связанных молекул при произвольной ориентации осей молекул O₂ с учетом внутримолекулярной тонкой структуры. Из сравнения расчетных и экспериментальных данных сделана оценка величины обменного параметра J для пары (O₂)₂ в матрице α -N₂.

2. Исследование температурной зависимости интенсивности бимолекулярного поглощения проводилось на двух видах полос: а) полосах, соответствующих

щих одновременным электронным возбуждением одним фотоном двух молекул кислорода из основного состояния $X^3\Sigma_g^-$ в нижайшие возбужденные состояния $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$ (бимолекулярные переходы из мультиплетта основного состояния $1,3,5(^3\Sigma_g^- \ ^3\Sigma_g^-)$ пары в возбужденные синглетные состояния $1(^1\Delta_g \ ^1\Delta_g)$ и $1(^1\Delta_g \ ^1\Sigma_g^+)$ пары); б) полосах, соответствующих электронному возбуждению только одной молекулы пары в состоянии $a^1\Delta_g$ (бимолекулярный переход из основного состояния пары в возбужденное триплетное состояние $3(^1\Delta_g \ ^3\Sigma_g^-)$).

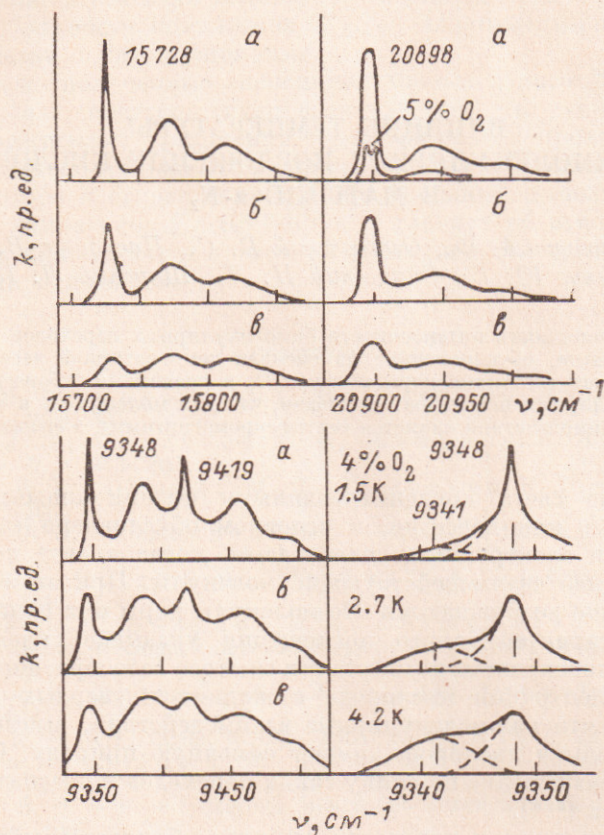


Рис. 1. Изменение с температурой контура полос бимолекулярных переходов в состоянии $(0, 0) (^1\Delta_g \ ^1\Delta_g)$ (БФЛ 15728 см^{-1}), $(0, 0) (^1\Delta_g \ ^1\Sigma_g^+)$ (БФЛ 20898 см^{-1}) и $(1, 0) (^1\Delta_g \ ^3\Sigma_g^-)$ (БФЛ 9348 см^{-1}) в растворе 10 % O_2 в $\alpha\text{-N}_2$.

a — 2 К, $б$ — 10 К, $в$ — 25 К. Влияние температуры на БФЛ полосы $(1, 0) (^1\Delta_g \ ^3\Sigma_g^-)$ в растворе 4 % O_2 в $\alpha\text{-N}_2$.

Контуров исследованных полос при разных температурах и температурная зависимость их интенсивности показаны на рис. 1 и 2 соответственно. Видно, что начальные бесфононные линии (БФЛ) полос уширяются с повышением температуры. Полная интенсивность полос $(0,0) (^1\Delta_g \ ^1\Sigma_g^+)$ и $(1,0) (^1\Delta_g \ ^1\Delta_g)$ уменьшается примерно в 2 раза при повышении температуры от 2 до 15 К. При дальнейшем повышении температуры суммарная интенсивность первой полосы почти не меняется, а второй — заметно увеличивается за счет возрастания интенсивности фононного крыла полосы. Интенсивность начальных БФЛ обеих полос монотонно уменьшается и выше 15 К.

Понижение концентрации O_2 до 4–5 % приводит к сужению БФЛ полос. При этом БФЛ $(0, 0) (^1\Delta_g \ ^1\Sigma_g^+)$ разрешается в дублет ($\Delta\nu=8 \text{ см}^{-1}$) линий, обязательный резонансом расщеплению вырожденного возбужденного состояния (относительная интенсивность линий дублета не зависит от температуры).

Качественно иная температурная зависимость интенсивности наблюдается для полос, отвечающих бимолекулярному переходу в возбужденное триплетное состояние пары. Это видно из рис. 1 и 2, на которых приведены данные для

полосы $(1, 0) ({}^1\Delta_g {}^3\Sigma_g^-) \leftarrow ({}^3\Sigma_g^- {}^3\Sigma_g^-)$. При повышении температуры от 1.5 до 6 К интенсивность полосы увеличивается примерно на 20 %. Кроме того, повышение температуры обнаруживает сложную структуру начальной БФЛ полосы. Контур БФЛ разделяется на два симметричных максимума различной полуширины. Главная компонента БФЛ (9348 см^{-1}) сопровождается с длинноволновой стороны более широкой линией на расстоянии 6.5 см^{-1} . Интенсивность линии 9348 см^{-1} при повышении температуры от 1.5 до 4.2 К заметно уменьшается, а интенсивность линии 9341 см^{-1} быстро растет (рис. 1 и 3).

3. Для объяснения этих экспериментальных результатов рассмотрим структуру основ-

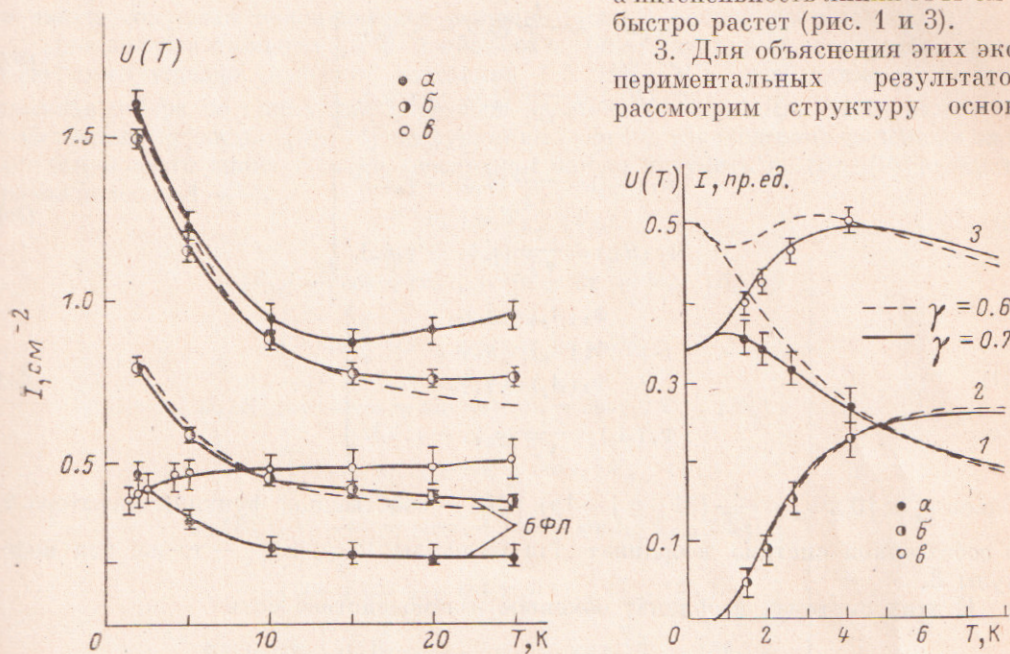


Рис. 2. Зависимость интенсивности полос бимолекулярных переходов в растворе 10 % O_2 в $\alpha\text{-N}_2$ от температуры. $a - (0, 0) ({}^1\Delta_g {}^1\Delta_g)$, $b - (0, 0) ({}^1\Delta_g {}^1\Sigma_g^+)$, $\gamma - (1, 0) ({}^1\Delta_g {}^3\Sigma_g^-)$.

Штриховыми линиями показана вычисленная зависимость $U(T)$ заселенности А-уровней основного состояния пары $(\text{O}_2)_2$ с учетом спина $S=0$ при $\gamma=0.6$. Для сравнения измеренных и вычисленных кривых масштаб для $U(T)$ выбран таким, чтобы значения $I(T)$ и $U(T)$ для полосы $(0, 0) ({}^1\Delta_g {}^1\Sigma_g^+)$ и ее БФЛ совпадали на графиках при 10 К.

Рис. 3. Зависимость интенсивности БФЛ 9348 см^{-1} (a), БФЛ 9341 см^{-1} (b) и суммарной интенсивности обеих БФЛ (γ) полосы $(1, 0) ({}^1\Delta_g {}^3\Sigma_g^-)$ от температуры.

Линиями показаны вычисленные при $\gamma=0.6$ и 0.7 зависимости температурной заселенности $U(T)$ с учетом спина $S=1$ для двух нижних пар близких уровней (1 — для нижней пары уровней A_g , 2 — для следующей пары уровней B_{1g} и B_{2g} , 3 — суммарное значение $U(T)$ для обеих пар этих уровней). Масштаб для I выбран таким, чтобы значения I и $U(T)$ при 4 К на рисунке совпадали.

ного состояния пары $(\text{O}_2)_2$. Энергетическая структура пары примесных парамагнитных ионов ранее исследовалась в случаях, когда локальные группы симметрии каждого из них имели общие элементы пространственной симметрии, что существенно упрощает задачу. В данном случае таких элементов симметрии нет; тем не менее использование теории групп существенно упрощает задачу.

Гамильтониан пары двухатомных молекул имеет вид

$$\hat{H} = A (\hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2) + J \hat{s}_1 \hat{s}_2, \quad (1)$$

где \hat{s} , \hat{s} и \hat{x} , \hat{y} — спины и оси первой и второй молекулы соответственно, J , A — параметры обмена и анизотропии. Поскольку в гамильтониан не входят явно пространственные переменные, группа симметрии G гамильтониана (1) отвечает произведению группы перестановок двух молекул $P_2(1, 2)$ на пересечение групп симметрии каждой из молекул (сведенных к общему центру)

$$D_{\infty h}(1) \times D_{\infty h}(2) \cap (O(\frac{1}{3}) \cap O(\frac{2}{3})) \times P_2 = C_{2h} \times P_2 = D_{2h}. \quad (2)$$

Таким образом, даже для произвольной ориентации пары молекул со спином $s=1$ существует достаточно высокая симметрия (D_{2h}) спинового гамильтониана (1), которая эквивалентна конфигурации, показанной на рис. 4.

Введем базис спиновых функций пары, преобразующихся по неприводимым представлениям группы D_{2h} ,

$$\Phi(B_{2g}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_0 \psi_- + \varphi_- \psi_0), \quad (3a)$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_1(B_{1g}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_0 \psi_+ - \varphi_+ \psi_0), \\ \Phi_2(B_{1g}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_+ \psi_- + \varphi_- \psi_+), \end{aligned} \right\} \quad (3б)$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_1(B_{3g}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_0 \psi_+ + \varphi_+ \psi_0), \\ \Phi_2(B_{3g}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_- \psi_+ - \varphi_+ \psi_-), \end{aligned} \right\} \quad (3в)$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_1(A_g) &= \varphi_0 \psi_0, \\ \Phi_2(A_g) &= \varphi_- \psi_-, \\ \Phi_3(A_g) &= \varphi_+ \psi_+, \\ \Phi_4(A_g) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_0 \psi_- - \varphi_- \psi_0). \end{aligned} \right\} \quad (3г)$$

Здесь $\varphi_0 = |0\rangle$, $\varphi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle \pm |-1\rangle)$, $|M\rangle$ — собственная функция оператора \hat{s}_z в собственной системе координат для молекулы 1; ψ_0 и ψ_{\pm} — то же для молекулы 2.

В этих системах координат обменное взаимодействие есть

$$\begin{aligned} \hat{s}\hat{s} = & -\frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} (\sigma_+ s_+ + \sigma_- s_-) + \cos \theta (\sigma_x s_x) + \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} (\sigma_+ s_- + \sigma_- s_+) + \\ & + \frac{1}{2} \sin \theta [\sigma_x (s_+ + s_-) - (\sigma_+ + \sigma_-) s_x]. \end{aligned} \quad (4)$$

Учитывая (1), (3), (4), находим состояния и уровни, соответствующие неприводимым представлениям B_2 , B_{1g} и B_{3g} (для упрощения записи энергия приведена в безразмерных единицах $\gamma = J/A$, а также приняты сокращения $\Psi_i(n) \equiv \Phi_i(B_{n\gamma})$, $n = 1, 2, 3$; $\Phi_i \equiv \Phi_i(A_g)$),

$$\Psi(B_{2g}) = \Phi_2, \quad E(B_{2g}) = 1 + \gamma; \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1(B_{1g}) &= \Phi_1(1) \cos t_1 + \Phi_2(1) \sin t_1, \\ \Psi_2(B_{2g}) &= \Phi_2(1) \cos t_1 - \Phi_1(1) \sin t_1, \\ \operatorname{tg} 2t_1 &= \gamma \sin \theta \left/ \left(\frac{1}{2} + \gamma \cos \theta \right) \right., \\ E_{1,2}(B_{1g}) &= \frac{3}{2} \pm \left(\frac{1}{4} + \gamma^2 + \gamma \cos \theta \right)^{1/2}, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1(B_{3g}) &= \Phi_1(3) \cos t_2 + \Phi_2(3) \sin t_2, \\ \Psi_2(B_{3g}) &= \Phi_2(3) \cos t_2 - \Phi_1(3) \sin t_2, \\ \operatorname{tg} 2t_2 &= \gamma \sin \theta \left/ \left(\frac{1}{2} - \gamma \cos \theta \right) \right., \\ E_{1,2}(B_{3g}) &= \frac{3}{2} \mp \left(\frac{1}{4} + \gamma^2 - \gamma \cos \theta \right)^{1/2}. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

В представлении

$$\Psi_i(A_g) = \sum_{l=1}^4 a_{il} \Phi_l \quad (8)$$

нахождение остальных четырех состояний симметрии A_g сводится к диагонализации матрицы оператора

$$\hat{H}_{A_g} = P(A_g) \hat{H} P(A_g) = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma & \gamma \cos \theta & 0 \\ -\gamma & 2 & \gamma \cos \theta & 0 \\ \gamma \theta \cos & \gamma \cos \theta & 2 & -\sqrt{2} \gamma \sin \theta \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \gamma \sin \theta & 1 - \gamma \end{pmatrix} \quad (9)$$

и также допускает аналитическое решение (хотя и весьма громоздкое).

Для анализа температурной зависимости бимолекулярных переходов, кроме диаграммы уровней основного состояния $1, 3, 5 (^3\Sigma_g^- \ ^3\Sigma_g^-)$, необходимо учитывать правила отбора по спину для переходов из этих уровней. Для этого разложим собственные функции (6)–(8) по функциям, соответствующим определенным значениям полного спина S пары (последние можно получить из (6)–(9), рассматривая предел $A \rightarrow 0$),

$$\Phi(B_{2g}) = \Psi_{S=2}(B_{2g}), \quad (10)$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_1(B_{1g}) &= \left[\cos \frac{\theta}{2} \cos t_1 + \sin \frac{\theta}{2} \sin t_1 \right] \Psi_{S=1}(B_{1g}) + \\ &+ \left[-\sin \frac{\theta}{2} \cos t_1 + \cos \frac{\theta}{2} \sin t_1 \right] \Psi_{S=2}(B_{1g}), \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_2(B_{1g}) &= \left[-\cos \frac{\theta}{2} \sin t_1 + \sin \frac{\theta}{2} \cos t_1 \right] \Psi_{S=1}(B_{1g}) + \\ &+ \left[\sin \frac{\theta}{2} \sin t_1 + \cos \frac{\theta}{2} \cos t_1 \right] \Psi_{S=2}(B_{1g}), \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_1(B_{3g}) &= \left[-\sin \frac{\theta}{2} \cos t_2 + \cos \frac{\theta}{2} \sin t_2 \right] \Psi_{S=1}(B_{3g}) + \\ &+ \left[\cos \frac{\theta}{2} \cos t_2 + \sin \frac{\theta}{2} \sin t_2 \right] \Psi_{S=2}(B_{3g}), \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_2(B_{3g}) &= \left[\sin \frac{\theta}{2} \sin t_2 + \cos \frac{\theta}{2} \cos t_2 \right] \Psi_{S=1}(B_{3g}) + \\ &+ \left[-\cos \frac{\theta}{2} \sin t_2 + \sin \frac{\theta}{2} \cos t_2 \right] \Psi_{S=2}(B_{3g}), \end{aligned} \right\}$$

$$\Psi_i(A_g) = A_{S=0}^i \Psi_{S=0}(A_g) + A_{S=1}^i \Psi_{S=1}(A_g) + A_{S=2}^i \Psi_{S=2}(A_g) + A_{S=2}^{ii} \Psi_{S=2}(A_g), \quad (13)$$

где $A_{S=0}^i = \frac{1}{\sqrt{3}} [(a_{i1} + a_{i2}) \cos \theta - a_{i3} - \sqrt{2} a_{i4} \sin \theta]$, $A_{S=1}^i = \frac{1}{\sqrt{2}} [(a_{i1} + a_{i2}) \sin \theta + \sqrt{2} a_{i4} \cos \theta]$, $A_{S=2}^i = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{i1} - a_{i2})$, $A_{S=2}^{ii} = \sqrt{\frac{2}{3}} a_{i3} + \frac{1}{\sqrt{6}} [(a_{i1} + a_{i2}) \cos \theta - \sqrt{2} a_{i4} \sin \theta]$.

На рис. 4 показана зависимость положения уровней основного состояния пары $(O_2)_2$ от величины γ для конфигурации, соответствующей матрице $\alpha-N_2$ ($\cos \theta = 1/3$). Из выражений (10)–(13) следует, что ни одно из состояний мультиплетта (кроме $^5B_{2g}$) не может характеризоваться определенным значением полного спина. На рис. 5 показана зависимость от γ вкладов состояний с полным спином $S=0, 1, 2$ для A_g -уровней мультиплетта (для уровней B_{1g} - и B_{3g} -симметрии она легко вычисляется по формулам (11)–(12)).

Полагая, что для каждой конкретной пространственной конфигурации вероятности переходов из уровней основного состояния в возбужденные синглетные $1(^1\Delta_g \ ^1\Delta_g)$, $1(^1\Delta_g \ ^1\Sigma_g^+)$ и триплетное $3(^1\Delta_g \ ^3\Sigma_g^-)$ состояния определяются вкладом в уровни основного мультиплетта в первом случае состояний с полным спином $S=0$, а во втором — с $S=1$, можно вычислить зависимость интенсивности таких переходов от температуры для заданной величины γ . Такие зависимости показаны на рис. 6, а для A_g -уровней с учетом суммарной их заселенности и вклада $S=0$ (для остальных уровней вклад спина $S=0$ равен нулю), а на рис. 6, б — то же самое для восьми уровней (кроме B_{2g}) с учетом спина $S=1$. Из этих рисунков видно наличие существенной зависимости хода кривых

от величины γ , что позволяет надеяться на получение количественных выводов из сравнения с экспериментом.

Наилучшее согласие экспериментальных кривых и расчетных наблюдается при $\gamma=0.6 \div 0.7$. Принимая для молекул O_2 в матрице $\alpha=N_2$ величину A равной 3.60 см^{-1} [8], имеем $J \sim 2.4 \text{ см}^{-1}$. Некоторая неточность этого результата может быть связана с температурной зависимостью обменного взаимодействия и с наличием более сложных кластеров. Возможные погрешности, однако, не должны сильно выходить за пределы точности настоящих измерений.

Величина параметра обменного взаимодействия в кристалле $\alpha-O_2$ гораздо больше $25-40 \text{ см}^{-1}$ [5, 9]. Это связано с тем, что в $\alpha-O_2$ расстояние между центрами ближайших соседних молекул равно 3.2 \AA , что значительно меньше, чем в $\alpha-N_2$, а межъядерные

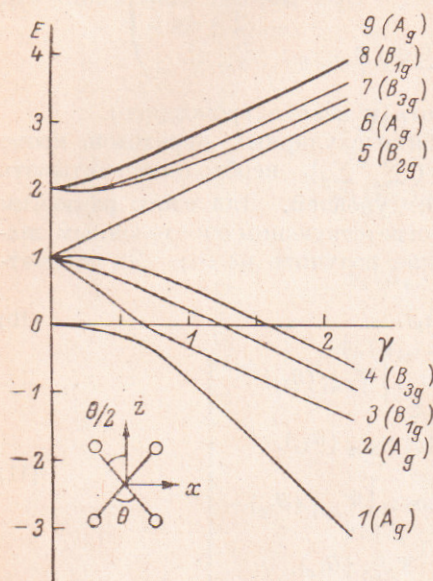


Рис. 4. Диаграмма уровней энергии основного состояния (${}^3\Sigma_g^- {}^3\Sigma_g^-$) пары $(O_2)_2$ ($\cos \theta = 1/3$) в зависимости от величины параметра обменного взаимодействия $\gamma = J/A$.

На вставке показана произвольная конфигурация пары при совмещении центров обеих молекул.

оси молекул параллельны. Существенное увеличение обмена в $\alpha-O_2$ согласуется с данными квантово-механических расчетов [7].

Отражением сложной энергетической структуры основного и возбужденного (${}^3\Delta_g, {}^3\Sigma_g^-$) состояний пары $(O_2)_2$ является дублетное строение БЛФ полосы пере-

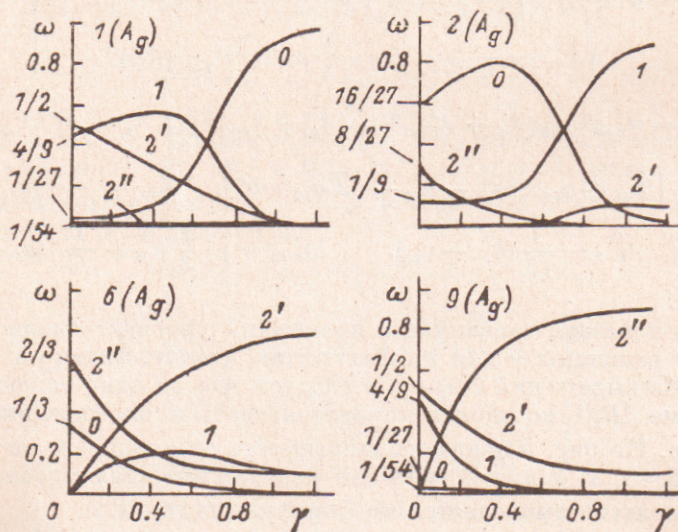


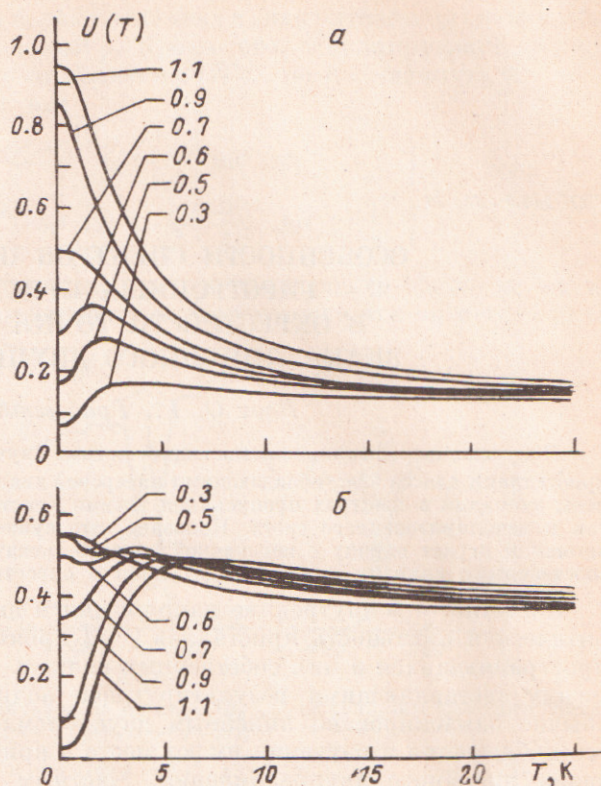
Рис. 5. Вычисленные зависимости от величины обменного взаимодействия γ вклада значений 0, 1, 2 полного спина пары $(O_2)_2$ для уровней симметрии A_g основного состояния пары. 1, 2, 6 и 9 — номер уровней в порядке увеличения их энергии на диаграмме уровней.

хода $(1, 0) ({}^1\Delta_g, {}^3\Sigma_g^-) \leftarrow ({}^3\Sigma_g^-, {}^3\Sigma_g^-)$ и ее изменение с температурой. Понижение интенсивности линии $9 \ 348 \text{ см}^{-1}$ при повышении температуры и увеличение интенсивности линии, отстоящей на 6.5 см^{-1} с длинноволновой стороны (рис. 1 и 3), хорошо согласуются с температурными изменениями суммарной заселенности (с учетом спина $S=1$) нижней пары уровней ($E=0$ и 0.97 см^{-1}) симметрии A_g .

и следующей пары уровней ($E=2.98$ и 3.97 см⁻¹) симметрии B_{1g} и B_{3g} соответственно, вычисленными для $\gamma=0.7$. Это позволяет утверждать, что линия 9348 см⁻¹ является наложением двух близких неразрешенных линий, отвечающих переходам из нижней пары уровней A_g , а линия 9341 см⁻¹ — соответственно из следующей пары близких уровней B_{1g} и B_{3g} . Поскольку расстояние между центрами пар этих уровней около 3 см⁻¹, то можно предполагать, что переходы из этих пар уровней происходят на различные уровни возбужденного состояния ${}^3(1\Delta_g, {}^3\Sigma_g^-)$, находящиеся на расстоянии около 3.5 см⁻¹. Эта величина хорошо совпадает с величиной $A=3.60$ см⁻¹ для молекул O_2 в матрице $\alpha-N_2$.

Рис. 6. Вычисленные для значений $\gamma=0.3\div 1.1$ зависимости температурной заселенности $U(T)$ уровней основного состояния пары $(O_2)_2$ с $\cos\theta=1/3$ и $A=3.60$ см⁻¹.

a — для четырех уровней A_g с учетом значения $S=0$ пары, *б* — для восьми уровней (без B_{2g}) с учетом значения $S=1$ пары.



Таким образом, обнаруженная температурная зависимость интенсивности бимолекулярного поглощения света молекулами O_2 в матрице $\alpha-N_2$, качественно различная для синглетных и триплетных переходов, в области ниже 10 К полностью объясняется температурной заселенностью уровней мультиплетного основного состояния $1, 3, 5 ({}^3\Sigma_g^-, {}^3\Sigma_g^-)$ пары $(O_2)_2$ с учетом правила отбора $\Delta S=0$ по полному спину пары для бимолекулярных переходов и согласуется с «антиферромагнитным» по знаку параметром обменного взаимодействия $J=2.4$ см⁻¹ между ближайшими примесными молекулами O_2 в матрице твердого азота.

Литература

- [1] Salow H., Steiner W. — Zs. Physik, 1936, В. 99, N 1—2, S. 137—147.
- [2] Дианов-Клоков В. И. — ДАН СССР, 1955, т. 105, № 3, с. 504—506.
- [3] Павлощук В. А., Шанский Л. И. — Укр. физ. журн., 1975, т. 20, № 11, с. 1914—1921.
- [4] Robinson G. W. — J. Chem. Phys., 1967, v. 46, N 2, p. 572—585.
- [5] Bhandari R., Falicov L. M. — J. Phys. C, 1973, v. 6, N 3, p. 479—494.
- [6] Fujiwara T. — J. Phys. Soc. Jap., 1974, v. 36, N 6, p. 1530—1541.
- [7] Wormer P. E. S., van der Avoird A. — J. Chem. Phys., 1984, v. 81, N 4, p. 1929—1939.
- [8] Simoneau R., Harvey J. S. M., Graham G. M. — J. Chem. Phys., 1971, v. 54, N 11, p. 4819—4824.
- [9] Прихотько А. Ф., Островский В. С., Пикус Ю. Г., Шанский Л. И. — Физика низких температур, 1980, т. 6, № 8, с. 1065—1073.

Поступило в Редакцию 5 июня 1986 г.