

УДК 532.74:541.571.9:541.65:543.422

**СТРОЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ ФТОРИСТОГО ВОДОРОДА
С ДИЭТИЛКЕТОНОМ В РАСТВОРЕ HF—Et₂CO****Е.Г. Тараканова, Г.В. Юхневич***Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*
E-mail: egtar@igic.ras.ru*Статья поступила 14 июля 2015 г.*

Методом теории функционала плотности (B3LYP/6-31++G(d,p)) рассчитаны оптимальные структуры и колебательные спектры гетероассоциатов (ГА) из молекул фтористого водорода и диэтилкетона, имеющих состав 1:1, 2:2, 4:1 и 8:2. Путем сопоставления результатов расчета и выполненного ранее эксперимента установлено, что в растворах HF—Et₂CO образуются устойчивые H-связанные молекулярные комплексы: циклический гетеротетрамер (HF)₂·(Et₂CO)₂ с симметрией C_{2h} и сформированный на его основе путем присоединения двух фрагментов (HF)₃ трехциклический ГА (HF)₈·(Et₂CO)₂. Показано, что для определения частот и интегральных интенсивностей широких и сильно перекрывающихся полос ИК поглощения целесообразно использовать разложение спектральной кривой на функции Гаусса или на функции Лоренца. Первый вид разложения позволяет представлять более точную оценку значений частот, а второй — интенсивностей исследуемых полос.

DOI: 10.15372/JSC20160408

Ключевые слова: двойная жидкая система, ИК спектроскопия, водородная связь, комплексы фтористого водорода, HF, диэтилкетон.**ВВЕДЕНИЕ**

Способность молекул HF образовывать прочные водородные связи [1] проявляется в существовании большого разнообразия комплексов фтористого водорода с другими молекулами [1—31]. Присутствие этих комплексов в газовой, жидкой и твердой фазах во многом определяет химические [1—6], физико-химические и спектральные свойства [7—31] содержащих их систем. Кроме того, гетероассоциаты (ГА), включающие молекулы HF, удобны для изучения различных свойств H-связи, а также процесса переноса протона (см., например, [7, 8]). Все это обуславливает интерес к составу и структурно-энергетическим характеристикам таких ГА, механизму и условиям их образования.

Большая часть исследований строения комплексов фтористого водорода проводится путем регистрации их колебательных или вращательных спектров в газовой фазе и молекулярных пучках (см., например, [13—21]). Сравнение результатов таких экспериментов с данными квантово-химических расчетов позволяет определять число и взаимное расположение ассоциированных молекул в указанных средах, оценивать энергетические параметры различных ГА, находить их спектральные признаки.

Получение аналогичных сведений о комплексах, включающих молекулы HF, в жидких смесях является актуальной задачей химии растворов, имеющей как фундаментальное, так и практическое значение (такие системы могут выступать в качестве фторирующих сред [1—4]). Од-

нако из-за объективных сложностей работ, посвященных решению этой задачи, до последнего времени было немного [7, 9—11]. Их авторы, анализируя сдвиги частот валентных колебаний HF ($\Delta\nu_{\text{HF}}$) в ИК спектрах растворов HF—органический растворитель (Solv), предполагали, что в этих растворах образуются цепочечные молекулярные (состава 1:1 [7, 10, 11] или $\geq 3:1$ [11]) и ионные (HF_2^-) [9] комплексы, оценивали энтальпию образования (ΔH) ГА состава 1:1, находили корреляции между значениями ΔH и $\Delta\nu_{\text{HF}}$ [10].

Более полная и достоверная информация появилась в результате объединенных общей логикой экспериментально-расчетных исследований состава, строения и особенностей комплексообразования ГА в двойных жидких системах (ДЖС) HF—Solv [23—31]. На примере растворов HF в семи растворителях ($\text{C}_3\text{H}_5\text{N}$, H_2NCHO , Et_2O , Et_2CO , MeCN, ДМФА, Me_2CO) было показано, что в ДЖС HF—Solv обычно наблюдаются устойчивые ГА трех типов. Первым (когда этому не препятствует строение молекулы Solv) появляется циклический комплекс состава 2:2 с симметрией C_{2h} . Вторым, как правило, образуется либо циклический пентамер состава 4:1 [26, 28], либо гетеродекамер состава 8:2 [27, 29]. Строение ГА третьего типа, в котором на одну молекулу Solv приходится ~ 10 —12 молекул HF, не может быть найдено в силу целого ряда причин [28].

Для растворов HF в ацетоне и диэтилкетоне во всем диапазоне концентраций были определены соотношения между входящими в разные ГА и остающимися "свободными"* молекулами ДЖС [30, 31]. Эти данные, полученные двумя независимыми способами (экспериментальным и расчетным), показали, что в обеих системах, начиная с мольной доли HF $\sim 0,25$, большая часть молекул пребывает в составе стабильных комплексов, а при мольной доле HF $\sim 0,50$ —0,92 ассоциированными являются уже 90—100 % молекул раствора.

Для завершенности представления о структуре растворов HF— Me_2CO и HF— Et_2CO нужно знать не только стехиометрические соотношения молекул в образующихся в них ГА (в обоих случаях это 1:1, 4:1 и 12:1 [25, 28]), но и строение комплексов первых двух типов. Число и взаимное расположение молекул в ГА, характерных для раствора HF в ацетоне, были проанализированы. Судя по данным работы [28], в нем присутствуют циклические комплексы составов 2:2 и, по-видимому, 4:1. Аналогичные данные о комплексах фтористого водорода в диэтилкетоне в литературе отсутствуют.

Задача настоящей работы заключалась в определении строения H-связанных ГА со стехиометрическими соотношениями молекул 1:1 и 4:1**, образующихся в ДЖС HF— Et_2CO . Для ее решения измеренные частоты наиболее интенсивных колебаний таких комплексов были сопоставлены с частотами соответствующих колебаний ГА составов 1:1, 2:2, 4:1 и 8:2, рассчитанными методом теории функционала плотности (B3LYP/6-31++G(d,p)). При поиске экспериментальных значений частот применяли разложение ИК спектра раствора HF— Et_2CO [25] с максимальным содержанием исследуемых комплексов на функции Гаусса и функции Лоренца.

МЕТОДИКА ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Экспериментальные ИК спектры растворов фтористого водорода в диэтилкетоне, использованные в настоящем исследовании, были взяты из работы [25]. Характер спектра раствора состава 1:1 позволял с хорошей точностью определить частоту ГА 1:1, в то время как поиск частот колебаний молекул HF в комплексе 4:1 представлял определенные трудности. Для обеспечения максимально корректной оценки этих частот была предложена и впервые опробована следующая методика. Спектры растворов с мольными соотношениями компонентов 4:1 и 1:1 были пронормированы на число молекул диэтилкетона в 1 см^2 изучаемого слоя раствора (получены спектры A/S). Из данных работы [31] было найдено, что доля ГА 1:1 в растворе состава

* Под "свободными" мы понимаем все присутствующие в растворе, но не входящие в состав ГА молекулы HF и Solv.

** Далее вместо "ГА со стехиометрическим соотношением молекул 1:1" для краткости будем писать "ГА 1:1".

4:1 составляет порядка 10 %. Путем вычитания из спектра раствора 4:1 одной десятой спектра раствора 1:1 был получен спектр, в первом приближении являющийся спектром ГА 4:1*.

Участок этого спектра $3700\text{—}2700\text{ см}^{-1}$, содержащий полосы валентных колебаний ν_{CH} этильных групп и связанных в ГА молекул HF (ν_{HF}), был последовательно разложен на 5 функций Лоренца и на 5 функций Гаусса (по программе ORIGIN5.0). Стартовые условия разложения каждый раз выбирались так, что частоты четырех функций находились вблизи широких максимумов поглощения, а пятой — в районе 2950 см^{-1} (данный компонент разложения соответствовал суммарному поглощению полос ν_{CH}). Решение, вне зависимости от типа функций, оставалось устойчивым при 15-кратном изменении начальных приближений.

Для сравнения с расчетом были выбраны следующие результаты воспроизведения экспериментальной спектральной кривой. В случае разложения на гауссианы — вариант, позволивший описать эту кривую с наименьшей погрешностью (среднеквадратичное отклонение $\chi^2 = 1,1537 \cdot 10^{-40}\text{ см}^2$). В случае разложения на лоренцианы — два варианта: с наименьшей погрешностью ($\chi^2 = 1,0281 \cdot 10^{-40}\text{ см}^2$) и самый стабильный (повторился семь раз из пятнадцати, $\chi^2 = 1,0689 \cdot 10^{-40}\text{ см}^2$). Наряду с частотами были проанализированы и интегральные интенсивности исследуемых полос, что, в частности, позволило понять, насколько адекватно расчет передает их значения.

В каждом случае сравнение результатов расчета и эксперимента было выполнено для двух наборов полос. Первый, наряду с четырьмя полосами валентных колебаний ν_{HF} , включал также полосу ν_{CO} ГА 4:1 (ее параметры были определены в работе [31]). Второй набор состоял только из четырех полос ν_{HF} .




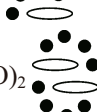
РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Изучение растворов HF—органический растворитель показало, что в каждом из них присутствуют ГА определенного состава и строения (см., например, [26—29]). При этом из ряда возможных конформеров в ДЖС, как правило, образуется самый устойчивый — с циклической или полициклической структурой. Эти данные и стехиометрические соотношения молекул в исследуемых в настоящей работе ГА (1:1 и 4:1 [25]) позволили при определении их строения сравнивать с экспериментом частоты колебаний всего четырех Н-связанных комплексов, схематические изображения которых приведены в табл. 1.

Расчет оптимальных структур и колебательных спектров этих комплексов (и молекул HF, Et₂CO) проводили методом теории функционала плотности (B3LYP/6-31++G(d,p)) по программе GAUSSIAN 98 [32]. Энергии их образования и параметры водородных мостиков (за исклю-

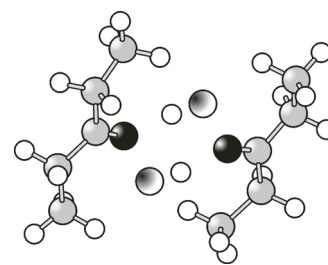
Т а б л и ц а 1

Рассчитанные значения энергии образования ГА (ΔE , ккал/моль)
и длин связей их водородных мостиков O \cdots HF и F \cdots HF ($r_{\text{O}\cdots\text{H}}$, $r_{\text{F}\cdots\text{H}}$, r_{HF} , Å)

Система	ΔE	$r_{\text{O}\cdots\text{H1}}$	r_{H1F1}	$r_{\text{F1}\cdots\text{H2}}$	r_{H2F2}	$r_{\text{F2}\cdots\text{H3}}$	r_{H3F3}	$r_{\text{F3}\cdots\text{H4}}$	r_{H4F4}
HF ●	—	—	0,928	—	—	—	—	—	—
HF · Et ₂ CO 	11,3	1,649	0,953	—	—	—	—	—	—
(HF) ₂ · (Et ₂ CO) ₂ 	30,1	1,571	0,966	—	—	—	—	—	—
(HF) ₄ · Et ₂ CO 	47,5	1,371	1,026	1,436	0,983	1,504	0,968	1,597	0,953
(HF) ₈ · (Et ₂ CO) ₂ 	98,3	1,318	1,054	1,429	0,985	1,512	0,960	1,610	0,951
		1,316	1,054	1,429	0,985	1,514	0,966	1,610	0,951

Обозначения: ● — молекула HF, ○ — молекула Et₂CO.

* Далее для краткости будем называть его спектром ГА 4:1.

Рис. 1. Строение ГА $(\text{HF})_2 \cdot (\text{Et}_2\text{CO})_2$ 

чением углов, значения которых близки к линейным: $\angle \text{F} \cdots \text{HF} = 175 \pm 1^\circ$, $\angle \text{O} \cdots \text{HF} \approx 170^\circ$) представлены в табл. 1. Видно, что при обоих стехиометрических соотношениях молекул — 1:1 и 4:1 — образование ГА удвоенного состава энергетически выгоднее, чем ГА состава, эквивалентного стехиометрическому соотношению. Отметим также, что удвоение состава комплекса заметно сказывается на параметрах мостиков $\text{O} \cdots \text{HF}$. Длины водородных связей ($r_{\text{O} \cdots \text{H1}}$) становятся прочнее (укорачиваются на ~ 4 — 5%), а ковалентных (r_{H1F1}) — ослабевают (удлиняются на $\sim 1,5$ — 3%).

Частота полосы поглощения ν_{HF} ГА 1:1 в спектрах растворов $\text{HF} - \text{Et}_2\text{CO}$ [25] равна $3260 \pm 20 \text{ см}^{-1}$. Рассчитанные частоты колебаний комплексов $\text{HF} \cdot \text{Et}_2\text{CO}$ (3515 см^{-1}) и $(\text{HF})_2 \cdot (\text{Et}_2\text{CO})_2$ (3253 см^{-1}) отличаются от нее на $7,8\%$ и $0,2\%$ соответственно. Отсюда следует, что первый из ГА, образующихся в растворе $\text{HF} - \text{Et}_2\text{CO}$, представляет собой циклический Н-связанный гетеротетрамер с симметрией C_{2h} (рис. 1). Каждый из атомов фтора в этом молекулярном комплексе взаимодействует с ближайшими к нему атомами водорода двух групп CH_2 (среднее значение длины соответствующих Н-связей составляет $2,66 \text{ \AA}$). Отметим, что полученный вывод полностью согласуется с данными о структуре ГА 1:1 в растворах ацетонитрила, N,N-диметилформамида и ацетона [26—28].

Определение строения второго исследуемого комплекса проводили по описанной выше методике. Лучшие из результатов разложения спектра поглощения ГА 4:1 (рис. 2, сплошная линия) на функции Лоренца и функции Гаусса представлены на рис. 2, а и б соответственно. Штриховыми линиями на рисунке изображены полосы валентных колебаний связанных в ГА молекул HF, а пунктирной линией — суммарное поглощение полос ν_{CH} , не представляющее интереса для настоящего исследования.

Значения частот и интегральных интенсивностей полос поглощения $\nu_{\text{HF}(i)}$ ($i = 1$ — 4), полученные при обоих вариантах разложения спектра, представлены в табл. 2. Здесь же приведены аналогичные характеристики полосы ν_{CO} , найденные ранее при описании кривой A/S в области 1850 — 1550 см^{-1} функциями Лоренца [31]. Оба набора экспериментальных данных (отвечающие разложению на лоренцианы и на гауссианы) были сопоставлены с соответствующими параметрами, полученными путем расчета ИК спектров ГА составов 4:1 и 8:2. Для удобства сравнения измеренных и вычисленных величин интегральных интенсивностей (A) между собой и друг с другом в таблице даны относительные значения A , нормированные на величину интегральной интенсивности колебания $\nu_{\text{HF}(2)}$.

При оценке отличия рассчитанных спектров молекулярных комплексов от спектра раствора целесообразно использовать две независимые характеристики. Первая из них — среднее от-

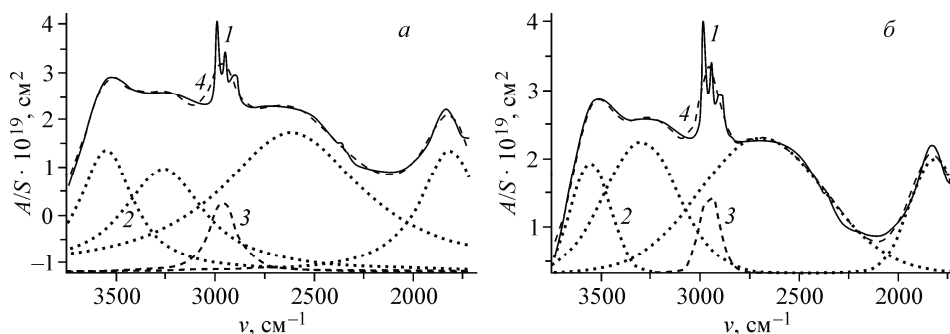


Рис. 2. Спектр A/S ГА 4:1 [25], разложенный на функции Лоренца (а) и функции Гаусса (б): экспериментальный спектр (1), полосы поглощения молекул HF, входящих в состав ГА (2), суммарное поглощение валентных колебаний связей CH (3), спектр, представляющий собой сумму функций, на которые произведено разложение (4)

Экспериментальные и рассчитанные частоты (ν , см^{-1})
и интегральные интенсивности (A , отн. ед.) колебаний ГА составов 4:1 и 8:2

Отнесение колебаний	Эксперимент				Расчет			
	ИК спектр раствора разложен на функции Лоренца		ИК спектр раствора разложен на функции Гаусса		$(\text{HF})_4 \cdot \text{Et}_2\text{CO}$		$(\text{HF})_8 \cdot (\text{Et}_2\text{CO})_2$	
	ν	A	ν	A	ν	A	ν	A
ν_{CO}^*	1654	0,932	1654	0,188	1699	0,375	1663	0,615
$\nu_{\text{HF}(1)}$	1816	0,352	1824	0,326	2247	1,786	1950	1,042
$\nu_{\text{HF}(2)}$	2618	1,0	2693	1,0	3015**	1,0	2983 ^{cp}	1,0
$\nu_{\text{HF}(3)}$	3259	0,423	3301	0,593	3306	0,714	3327 ^{cp}	0,552
$\nu_{\text{HF}(4)}$	3548	0,325	3559	0,253	3577	0,482	3601 ^{cp}	0,365

* Частота и интегральная интенсивность данной полосы определены в работе [31].

** Сильное изменение длины связи $\text{HF}_{(2)}$ происходит при колебаниях с частотами $3015 \text{ см}^{-1} (\nu_{\text{HF}(2)} + \nu_{\text{CH}_2}^s)^{\text{af}}$ и $3017 \text{ см}^{-1} (\nu_{\text{CH}_2}^s + \nu_{\text{HF}(2)})^{\text{sf}}$. Для сравнения с экспериментальными параметрами полосы $\nu_{\text{HF}(2)}$ взяты частота более интенсивного из этих колебаний и их суммарная интегральная интенсивность.

^{cp} Среднее значение частот колебаний сходной формы и интенсивности (отличающихся на 4—5 см^{-1}), относящихся к разным фрагментам $(\text{HF})_4$ ГА состава 8:2.

носительное отклонение вычисленных частот ГА от измеренных (δ_ν , %). Вторая характеристика — взаимное расположение полос в спектре. Ее удобно выражать одним числом — σ , %, которое находится следующим образом. Величина частотного интервала Δ , в котором лежат анализируемые полосы колебаний, принимается за 100 %, а расстояния между всеми соседними полосами ($\nu_j - \nu_i$) выражаются в процентах от Δ ; σ представляет собой среднее отклонение расчетных значений $(\nu_j - \nu_i)/\Delta$ от экспериментальных.

В настоящей работе для обеспечения надежности выводов о структуре присутствующих в растворе $\text{HF}-\text{Et}_2\text{CO}$ ГА были проанализированы параметры δ_ν и σ , а также — впервые — средние относительные отклонения рассчитанных интегральных интенсивностей от измеренных (δ_A). Все эти данные, вычисленные для наборов из пяти и из четырех исследуемых полос, приведены в табл. 3. Поскольку при описании экспериментального спектра с помощью функций Лоренца лучшими были признаны два варианта его разложения (с наименьшей погрешностью и самый стабильный), в таблице приведены параметры δ_ν и σ , рассчитанные для обоих этих вариантов (видно, что значения этих параметров во всех случаях близки).

Из данных табл. 3 следует, что вид функций, с помощью которых воспроизводится спектральная кривая, не влияет на результат анализа значений δ_ν : частоты, рассчитанные для ГА состава 8:2, всегда существенно ближе к эксперименту, чем частоты ГА состава 4:1. Это отличие особенно ощутимо при разложении спектра раствора на гауссианы: величины δ_ν^1 и δ_ν^2 в случае ГА $(\text{HF})_8 \cdot (\text{Et}_2\text{CO})_2$ почти в 2 раза меньше, чем в случае ГА $(\text{HF})_4 \cdot \text{Et}_2\text{CO}$. Параметры, характеризующие взаимное расположение пяти исследуемых полос поглощения, также говорят в пользу комплекса состава 8:2. И только значения σ^2 оказались для этого комплекса несколько большими (в 1,1—1,4 раза), чем для ГА состава 4:1.

Интересно, что и из параметров, характеризующих интегральную интенсивность колебаний (несмотря на то, что их величины на порядок превышают значения δ_ν) можно уверенно заключить, что спектр комплекса удвоенного состава лучше согласуется с экспериментом, чем спектр меньшего комплекса. Важно также отметить, что рассчитанные относительные интенсивности ГА $(\text{HF})_8 \cdot (\text{Et}_2\text{CO})_2$ заметно ближе к результатам измерений, полученным при описа-

Т а б л и ц а 3

Параметры, характеризующие отличие рассчитанных колебательных полос ГА составов 4:1 и 8:2 от эксперимента: средние относительные отклонения вычисленных частот (δ_v , %), интегральных интенсивностей (δ_A) и значений $(\nu_j - \nu_i)/\Delta$ (σ , %), описывающих взаимное расположение полос в спектре

Параметр	Разложение на функции Лоренца		Разложение на функции Гаусса			
	Состав ГА		4:1	8:2		
δ_v^1	8,78	(8,91)*	5,09	(5,21)	7,71	4,04
σ^1	10,31	(10,56)	8,61	(8,37)	10,57	7,08
δ_v^2	10,29	(10,46)	6,23	(6,38)	8,95	4,91
σ^2	7,63	(7,09)	10,84	(10,31)	8,78	9,47
δ_A^1	116,85		54,57		131,65	99,59
δ_A^2	131,12		59,71		139,69	67,70

¹ Параметры, рассчитанные для набора из 5 полос ν_{CO} , $\nu_{HF(1)}$, $\nu_{HF(2)}$, $\nu_{HF(3)}$ и $\nu_{HF(4)}$.

² Параметры, рассчитанные для набора из 4 полос $\nu_{HF(1)}$, $\nu_{HF(2)}$, $\nu_{HF(3)}$ и $\nu_{HF(4)}$.

* Без скобок и в скобках в результатах разложения на функции Лоренца приведены данные, полученные при использовании самого устойчивого результата разложения, и результата, характеризующегося минимальной погрешностью, соответственно.

нии спектра раствора лоренцианами ($\delta_A \sim 55\text{—}60\%$), а не гауссианами ($\delta_A \sim 70\text{—}100\%$). Это дает основание предположить, что в исследованиях, требующих определения интегральных интенсивностей колебательных полос, их значения даже при больших полуширинах полос целесообразно находить путем разложения спектра на функции Лоренца.

Таким образом, приведенные в табл. 3 данные свидетельствуют о том, что второй из появляющихся в растворе HF—Et₂CO молекулярных комплексов представляет собой трехциклический гетеродекамер (HF)₈·(Et₂CO)₂ (рис. 3). Его структуру можно описать двумя способами. С одной стороны, комплекс состава 8:2 сформирован путем присоединения к первому ГА — (HF)₂·(Et₂CO)₂ — двух симметрично расположенных фрагментов (HF)₃. С другой стороны, этот комплекс состоит из двух гетеропентамеров состава 4:1, образующих между собой 6 водородных связей разной прочности (средние значения длин связей F···H и O···H составляют 3,12 и 2,89 Å). Данные взаимодействия немного слабее аналогичных взаимодействий внутри гетеропентамеров, в которых среднее расстояние между атомами F₍₄₎ и атомами H двух групп CH₂ равно 2,79 Å.

Отметим, что такой тип комплексообразования характерен для растворов HF не только в диэтилкетоне, но и в N,N-диметилформамиде [27]. H-связанный комплекс удвоенного состава — (HF)₈·(Et₂O)₂ — оказывается энергетически выгодным также в ДЖС HF—диэтиловый эфир [29].

ВЫВОДЫ

Путем сопоставления результатов расчета и эксперимента установлено, что в растворах HF в диэтилкетоне образуются устойчивые H-связанные молекулярные комплексы: циклический гетеротетрамер (HF)₂·(Et₂CO)₂ с симметрией C_{2h} и сформированный на его основе путем присоединения двух фрагментов (HF)₃ трехциклический гетеродекамер (HF)₈·(Et₂CO)₂.

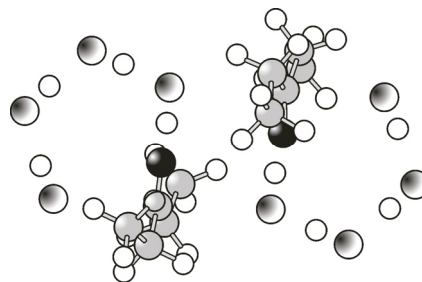


Рис. 3. Строение ГА (HF)₈·(Et₂CO)₂

Показано, что для определения частот и интегральных интенсивностей широких и сильно перекрывающихся полос ИК поглощения целесообразно использовать разложение спектральной кривой на функции Гаусса или на функции Лоренца. Первый вид разложения позволяет получить более точную оценку значений частот, а второй — интенсивностей исследуемых полос.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Файнзильберг А.А., Фурун Г.Г. Фтористый водород как реагент и среда в химических реакциях. — М.: Наука, 2008.
2. Bergstrom C.G., Nicholson R.T., Dodson R.M. // J. Org. Chem. — 1963. — **28**, N 10. — P. 2633.
3. Olah G.A., Welch J.T., Vankar Y.D. et al. // J. Org. Chem. — 1979. — **44**, N 22. — P. 3872.
4. Olah G.A., Shih J.G., Prakash G.K.S. // J. Fluorine Chem. — 1986. — **33**, N 4. — P. 377.
5. Yoneda N. // Tetrahedron. — 1991. — **47**. — P. 5329.
6. Yoneda N., Fukuhara T. // Tetrahedron. — 1996. — **52**. — P. 23.
7. Nakanishi K., Touhara H., Shimoda H., Watanabe N. // J. Phys. Chem. — 1971. — **75**, N 4. — P. 2222.
8. Roohi H., Taghezadeh R. // J. Fluorine Chem. — 2011. — **132**, N 7. — P. 459.
9. Adams R.M., Katz J.J. // J. Mol. Spectrosc. — 1957. — **1**. — P. 306.
10. Tsuda M., Touhara H., Nakanishi K., Watanabe N. // J. Phys. Chem. — 1976. — **80**, N 4. — P. 362.
11. Huong P.V., Couzi M. // J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol. — 1970. — **67**. — P. 1994.
12. Boenigk D., Mootz D. // J. Am. Chem. Soc. — 1988. — **110**, N 7. — P. 2135.
13. Couzi M., Le Calve J., Pham V.H., Lascombe J. // J. Mol. Struct. — 1970. — **5**, N 5. — P. 363.
14. Legon A.C., Wallwork A.L., Millen D.J. // Chem. Phys. Lett. — 1991. — **178**, N 2, 3. — P. 279.
15. Lopez J.C., Blanco S., Lesarri A., Sanz M.E., Lorenzo F.J., Alonso J.L. // J. Chem. Phys. — 2001. — **114**, N 21. — P. 9421.
16. Tokhadze K.G., Utkina S.S. // Chem. Phys. — 2003. — **294**, N 1. — P. 45.
17. Bulychev V.P., Grigoriev I.M., Gromova E.I. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2005. — **7**. — P. 2266.
18. Sanchez R., Blanco S., Lesarri A., Lopez J.C., Alonso J.L. // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2005. — **7**, N 6. — P. 1157.
19. Leung H.O., Marshall M.D. // J. Chem. Phys. — 2007. — **126**. — P. 114310.
20. Leung H.O., Marshall M.D., Drake T.L., Pudlik T., Savji N., McCune D.W. // J. Chem. Phys. — 2009. — **131**, N 20. — P. 204301/1.
21. Cirtog M., Asselin P., Soulard P., Madebene B., Alikhani M.E. // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2010. — **12**, N 38. — P. 12299.
22. Li W., Kiran M.S.R.N., Manson J.L., Schlueter J.A., Thirumurugan A., Ramamurty U., Cheetham A.K. // Chem. Commun. — 2013. — **49**, N 40. — P. 4471.
23. Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г., Суховерхов В.Ф. и др. // Изв. АН. Сер. хим. — 2007. — № 7. — С. 1281. [Russ. Chem. Bull., 2007, **56**, 1329 (Engl. Transl.)].
24. Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г., Кепман А.В. и др. // Изв. АН. Сер. хим. — 2008. — № 9. — С. 1833. [Russ. Chem. Bull. — 2008. — **57**, N 9, 1867 (Engl. Transl.)].
25. Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г., Быков И.В. // Журн. неорган. химии. — 2010. — **55**, № 4. — С. 621. [Russ. J. Inorg. Chem., 2010, **55**, 568 (Engl. Transl.)].
26. Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В. // Журн. структур. химии. — 2008. — **49**, № 4. — С. 707. [J. Struct. Chem., 2008, **49**, 679 (Engl. Transl.)].
27. Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В. // Изв. АН. Сер. хим. — 2011. — № 1. — С. 79. [Russ. Chem. Bull., 2011, **60**, 81 (Engl. Transl.)].
28. Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В. // Журн. структур. химии. — 2012. — **53**, № 3. — С. 501. [J. Struct. Chem., 2012, **53**, 495 (Engl. Transl.)].
29. Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В. // Журн. структур. химии. — 2010. — **51**, № 1. — С. 74. [J. Struct. Chem., 2010, **51**, 69 (Engl. Transl.)].
30. Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г., Каргов С.И. // Изв. АН. Сер. хим. — 2012. — № 6. — С. 1073. [Russ. Chem. Bull. — 2012. — **61**, 1079 (Engl. Transl.)].
31. Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г. // Журн. структур. химии. — 2014. — **55**, № 2. — С. 290. [J. Struct. Chem., 2014, **55**, 270 (Engl. Transl.)].
32. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Zakrzewski V.G., Montgomery J.A., Stratmann R.E., Burant J.C., Dapprich S., Millam J.M., Daniels A.D., Kudin K.N., Strain M.C., Farkas O., Tomasi J., Barone V., Cossi M., Cammi R., Mennucci B., Pomelli C., Adamo C., Clifford S., Ochterski J., Petersson G.A., Ayala P.Y., Cui Q., Morokuma K., Malick D.K., Rabuck A.D., Raghavachari K., Foresman J.B., Cioslowski J., Ortiz J.V., Stefanov B.B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Gomperts R., Martin R.L., Fox D.J., Keith M.A., Al-Laham A., Peng C.Y., Nanayakkara A., Gonzalez C., Challacombe M., Gill P.M.W., Johnson B.G., Chen W., Wong M.W., Andres J.L., Head-Gordon M., Replogle E.S., Pople J.A. — GAUSSIAN 98 (Revision A.1) / Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.