

УДК 539.19

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ
ДОДЕКАСИЛСЕСКВИОКСАНА $H_{12}Si_{12}O_{18}$** **С.Г. Семенов, М.Е. Бедрина***Санкт-Петербургский государственный университет*

E-mail: m.bedrina@mail.ru

*Статья поступила 26 октября 2012 г.**С доработки — 12 марта 2013 г.*

Квантово-химическими методами B3LYP/сс-pVTZ, PBE0/сс-pVTZ и MP2(full)/6-311G(d,p) вычислены структурные параметры додекасилсесквioxсана $H_{12}Si_{12}O_{18}$ и катиона $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$. Согласно расчетам DFT/сс-pVTZ энергия $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}) на 1,3—1,7 ккал/моль выше энергии $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}). Сокращение базиса приводит к большей разности энергий изомеров $H_{12}Si_{12}O_{18}$. Для катиона получены электронные состояния $^2B_{2u}$ и 2B_1 , отвечающие симметричным равновесным структурам $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$ (D_{6h}) и (D_2) соответственно. Для эндокомплекса $He@H_{12}Si_{12}O_{18}$ получена симметрия D_{2d} , для $He_2@H_{12}Si_{12}O_{18}$ — симметрия D_{2h} и для $H_2@H_{12}Si_{12}O_{18}$ — симметрия D_{6h} .

Ключевые слова: додекасилсесквioxсан, эндокомплексы, симметрия, структура, ионизация, B3LYP, PBE0, MP2(full), сс-pVTZ.

ВВЕДЕНИЕ

Молекулы силсесквioxсанов $R_{2k}Si_{2k}O_{3k}$ имеют клеточную структуру. На один атом кремния в них приходится полтора атома кислорода. Каждый атом кремния связан с тремя атомами кислорода и с атомом водорода или замещающим водород радикалом R [1, 2]. Внутримолекулярная полость силсесквioxсана может быть заполнена атомом, ионом или небольшой молекулой. Наиболее интересен пример атома водорода, заключенного в полость октакис(триметилсилоксиоктасилсесквioxсана) [3—5].

Молекула додекасилсесквioxсана $H_{12}Si_{12}O_{18}$, синтез и структура которой описаны в работах [6—9], может включать более крупные атомы, ионы и двухатомные молекулы. Квантово-химическими методами RHF/6-31G(d), RHF/TZV(d,p) и DFT (LDA, NLDA) исследованы альтернативные структуры полого додекасилсесквioxсана [10—12], методом RHF/TZV(d,p) — эндокомплексы с N_2 и O_2 (по одной молекуле в полости) [11], методами RHF/SBK, /6-31G(d), /TZV(d,p), MP2/SBK и MP2/6-31+G(d,p)//RHF/6-31G(d) — эндокомплексы с H_2 внутри додекасилсесквioxсановых структур с 12-атомными [13] и 10-атомными циклами [14].

В настоящей работе показано, как методами DFT (B3LYP, PBE0) и MP2(full) с использованием различных наборов базисных орбиталей вычислены равновесные параметры двух симметричных структур додекасилсесквioxсана: $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}) и (D_{2d}) (рис. 1), а также изомерных катионов $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$, образование которых можно ожидать, например, при фотоионизации. Методом PBE0 нами определены также разности энергий альтернативных структур эндокомплексов $He@H_{12}Si_{12}O_{18}$, $He_2@H_{12}Si_{12}O_{18}$ и $H_2@H_{12}Si_{12}O_{18}$.

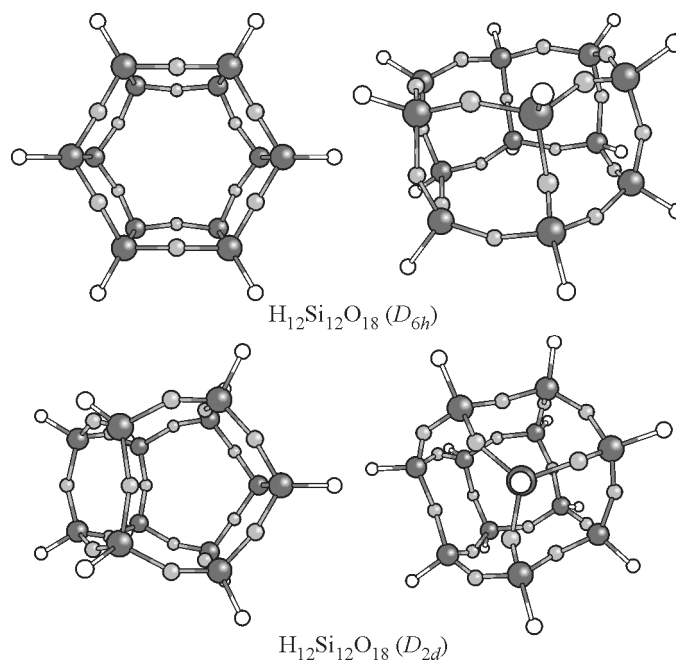


Рис. 1. Равновесные структуры додекасилсесквиоксана, показанные с разных сторон

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Расчеты выполнены квантово-химическими методами V3LYP/сс-pVTZ, PBE0/сс-pVTZ, PBE0/6-311(*d,p*) и MP2/(full)/6-311(*d,p*) с соблюдением требований по обеспечению необходимой точности [15] на высокопроизводительном вычислительном комплексе факультета прикладной математики — процессов управления СПбГУ по компьютерной программе GAUSSIAN-03 [16].

Определение структурных параметров названными методами DFT завершали расчетом колебательного спектра, и соответствие каждой равновесной структуры минимуму энергии подтверждено отсутствием мнимых частот. Полученные методом PBE0/6-311(*d,p*) равновесные конфигурации атомных ядер использовали в качестве начальных в расчетах по методу Мёллера—Плессе, но колебательный спектр не пересчитывали ввиду высоких ресурсных запросов метода MP2 и его недостаточной надежности в предсказании симметрии молекул [17]. Для эндокомплексов равновесные структурные параметры и энергии вычислены методом PBE0/сс-pVTZ, а частоты колебаний ядер относительно их равновесного положения — методом PBE0/6-311(*d,p*). Начальные конфигурации эндокомплексов с двухатомными молекулами были несимметричными.

СТРУКТУРА МОЛЕКУЛЫ $\text{H}_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18} (D_{6h})$ И КАТИОНА $\text{H}_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}^+ (D_{6h})$

Вычисленные параметры высокосимметричной структуры додекасилсесквиоксана $\text{H}_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18} (D_{6h})$ и соответствующего катиона представлены в табл. 1. Согласно результатам расчетов методами V3LYP/сс-pVTZ и PBE0/6-311(*d,p*) структура $\text{H}_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18} (D_{6h})$ соответствует локальному минимуму энергии, но расчет методом PBE0/сс-pVTZ дал для нее мнимые частоты.

Для катиона $\text{H}_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}^+$ получено состояние ${}^2B_{2u}$ при высокосимметричной равновесной ядерной конфигурации D_{6h} . Этот неожиданный на первый взгляд результат объясняется взаимодействием неподеленных электронных пар атомов кислорода с орбиталями соседних атомов кремния. Количественная оценка такого взаимодействия методом разложения недиагональных блоков матрицы плотности по сингулярным числам на примере прямолинейного силоксанового

Т а б л и ц а 1

Равновесные структурные параметры молекулы $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}) и катиона $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$ (D_{6h})

Структурный параметр*	$H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h})					$H_{12}Si_{12}O_{18}^+$ (D_{6h})	
	TZN(d,p)	6-311(d,p)		cc-pVTZ		6-311(d,p)	cc-pVTZ
	RHF [11]	MP2(full)	PBE0	PBE0	B3LYP	(U)PBE0	
Межъядерные расстояния, Å							
Si—O*	1,618	1,631	1,630	1,625	1,631	1,632	1,627
Si—O ^{II}	1,624	1,638	1,636	1,631	1,636	1,640	1,635
Si—H	1,459	1,457	1,468	1,470	1,465	1,462	1,464
Si(O)Si	—	3,183	3,182	3,166	3,178	3,208	3,195
Si(O ^{II})Si	—	3,174	3,175	3,154	3,167	3,169	3,141
max(Si···Si)	—	7,114	7,112	7,075	7,102	7,155	7,120
max(H···H)	—	10,013	10,033	10,000	10,017	10,053	10,018
Валентные углы, град.							
OSiO	109,6	109,0	109,1	108,5	108,7	108,4	107,8
OSiO ^{II}	—	109,7	109,4	110,3	110,2	107,8	108,7
SiOSi	108,7**	154,7	155,0	153,9	154,1	158,8	158,1
SiO ^{II} Si	154,0	151,4	152,1	150,5	150,8	150,0	147,6
HSiO	—	109,7	109,8	109,5	109,5	111,1	110,9
HSiO ^{II}	—	109,0	109,3	108,6	108,7	110,4	109,8

* O — атомы кислорода в 12-атомных циклах; O^{II} — атомы, связывающие 12-атомные циклы.** Можно предположить, что в работе [11] вместо угла SiOSi приведен угол OSiO^{II}.

стержня в олигомерах фталоцианината кремния дана в работе [18]. Там же в терминах внутри-атомного перекрытия гибридных атомных орбиталей описано сопряжение неординарных связей Si—O через атом кремния. О подвижности электронов в силоксановом полиэдре косвенным образом свидетельствует депрессия поляризуемости эндокомплекса $He@(O_h)Me_8Si_8O_{12}$, близкой к поляризуемости свободного атома гелия [15].

Методом NBO [19, 20] (в сочетании с PBE0/cc-pVTZ) для каждого атома кислорода в молекуле $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}) получены две натуральные гибридные орбитали валентной оболочки, заселенности которых $\lambda_j = 1,906$ и $1,913$ меньше предельного значения $\lambda = 2$, отвечающего неподделенной электронной паре. Половина суммы близких по величине вкладов $V_j = (2 - \lambda_j) \cdot \lambda_j = 0,179$ и $0,165$ в валентность атома кислорода может служить оценкой π -составляющей индексов связей атома кислорода с двумя соседними атомами кремния.

Судя по суммарной спиновой плотности атомов кислорода, неспаренная орбиталь b_{2u} в катионе $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$ (D_{6h}) состоит преимущественно из орбиталей 18 атомов кислорода. Уменьшение электронной заселенности отрицательно заряженных атомов кислорода обуславливает ослабление внутриатомного и межатомного кулоновского отталкивания, увеличение валентных углов при атомах кислорода и сближение ядер соседних атомов кислорода. Наименьшее из волновых чисел в колебательном спектре $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}) при ионизации увеличивается от 19 до 33 см^{-1} (в случае использования метода (U)PBE0/6-311(d,p)).

СТРУКТУРА МОЛЕКУЛЫ $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}) И КАТИОНА $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$ (D_2)

Энергия изомера $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}) при расчете методами PBE0/6-311(d,p) и B3LYP/cc-pVTZ с учетом "нулевых" колебаний на $4,4$ и $1,7$ ккал/моль соответственно ниже энергии изомера

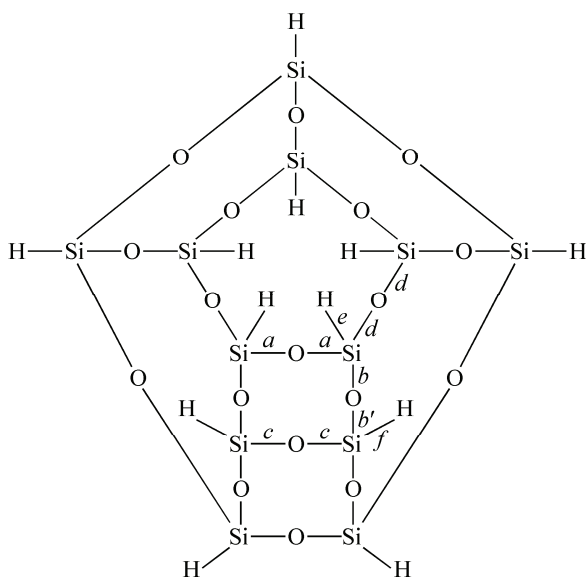


Рис. 2. Структурная формула додекасилсесквиоксана D_{2d}

цикл $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}) осуществляется легче, чем через 10-атомный цикл $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}) [13].

В структурной формуле молекулы $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}) (рис. 2, табл. 2) каждый 8-атомный цикл имеет локальную симметрию C_s . Он конденсирован с таким же 8-атомным циклом (общие связи c) и с тремя 10-атомными циклами, которые имеют ту же локальную симметрию C_s . Центральный из этих 10-атомных циклов имеет с 8-атомным циклом пару общих связей a , а каждый из боковых циклов – пару общих связей b и b' . Общий для 8-атомного и двух 10-атомных циклов атом кремния образует связь Si—H (e); общий для 10-атомного и двух 8-атомных циклов атом кремния образует связь Si—H (f). Диаметр молекулы $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}) с учетом удвоенного ван-дер-ваальсова радиуса атома водорода (1,2 Å) составляет 12 Å.

Валентный угол $d \wedge d$ при атоме кислорода в 10-атомных циклах очень сильно зависит от метода расчета. Значения этого угла, полученные методами B3LYP/6-311(d,p) и PBE0/6-311(d,p), различаются на 21°, но при использовании лучшего базиса $cc-pVTZ$ различие уменьшается до 7°.

Максимальные значения натуральных электронных заселенностей λ_j [19, 20] гибридных орбиталей ϕ_j валентной оболочки кислорода в молекуле $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}), полученные методом NBO (в сочетании с PBE0/ $cc-pVTZ$), не выходят за пределы интервала $1,90 < \lambda < 1,92$ (среднее значение 1,91), а соответствующие им вклады в валентность атома кислорода заключены в интервале $0,16 < V_j < 0,18$. Так как атом кислорода обладает парой таких орбиталей и связан преимущественно с двумя атомами кремния, π -составляющую индекса силоксановой связи в $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}) можно оценить как усредненное значение V_j , т.е. 0,17.

Результаты расчета методом (U)PBE0/ $cc-pVTZ$ свидетельствуют, что отрыв электрона от молекулы $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}) с реализацией состояния 2B_1 при равновесной конфигурации (D_2)- $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$ требует затраты 231 ккал/моль (10,01 эВ). Эта величина лишь на 0,5 ккал/моль меньше энергии состояния ${}^2B_{2u}$ при равновесной конфигурации $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$ (D_{6h}).

Разрыва химических связей при ионизации не происходит, но в равной мере нарушается равенство длин соседних связей a и равенство двух связей b и b' в 8-атомных циклах (1,627 Å → 1,625 Å и 1,634 Å). Длины остальных силоксановых связей увеличиваются до значений b 1,631 и 1,632 Å, c 1,633 Å, d 1,630 Å, а связи кремния с водородом становятся короче (e 1,464 Å, f 1,465 Å).

$H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}). При расчете методами PBE0/ $cc-pVTZ$ и MP2/6-311(d,p) без учета "нулевых" колебаний энергия $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{2d}) на 1,3 и 4,5 ккал/моль соответственно ниже энергии, отвечающей равновесной структуре $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}). Таким образом, уточнение расчета посредством увеличения числа базисных функций сближает энергии рассматриваемых структур додекасилсесквиоксана до величины ΔE 1,3—1,7 ккал/моль и свидетельствует о достижимости структуры $H_{12}Si_{12}O_{18}$ (D_{6h}) при комнатной температуре*. Это обстоятельство облегчает образование и распад эндокомплекса, так как прохождение эндочастицы через 12-атомный

* Ранее были получены величины ΔE 2,6 (RHF/6-31G(d) [10]), 4,7 (RHF/TZV(d,p) [11]) и 1,0 ккал/моль (MP2//RHF/TZV(d,p) [11]).

Т а б л и ц а 2

Равновесные структурные параметры молекулы $\text{H}_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$ (D_{2d})

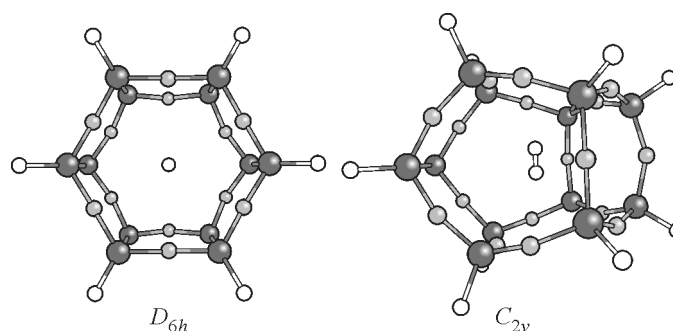
Структурный параметр*	6-31G(d) [10]		TZV(d,p)	6-311G(d,p)		cc-pVTZ		PCA [8]**
	LDA	NLDA	RHF [12]	MP2	PBE0	PBE0	B3LYP	
Межъядерные расстояния, Å								
Si—O (a)	1,64	1,68	1,619	1,635	1,630	1,627	1,631	1,602
Si—O (b)	1,64	1,68	1,620	1,634	1,632	1,627	1,632	1,603
Si—O (b')	1,64	1,68	1,619	1,634	1,630	1,627	1,631	1,610
Si—O (c)	1,64	1,68	1,624	1,637	1,636	1,630	1,636	1,616
Si—O (d)	1,64	1,68	1,613	1,631	1,624	1,625	1,628	1,596
Si—H (e)	1,47	1,47	1,459	1,458	1,468	1,471	1,465	1,458
Si—H (f)	1,47	1,47	1,458	1,456	1,466	1,469	1,464	1,460
Валентные углы при атоме кислорода, град.								
$a \wedge a$	144,8	145,0	162,8	157,4	162,4	159,0	161,9	159,7
$b \wedge b'$	140,2	136,7	157,0	151,7	156,7	152,4	155,0	152,8
$c \wedge c$	150,4	147,5	152,7	157,1	151,2	154,6	151,5	151,7
$d \wedge d$	143,6	143,8	—	146,5	167,7	148,4	155,4	—
Валентные углы при атоме кремния, град.								
$a \wedge b$	—	—	—	109,0	109,3	109,9	110,0	—
$a \wedge d$	—	—	—	108,6	109,5	108,9	109,3	—
$b \wedge d$	—	—	109,4	110,3	109,5	110,0	109,9	109,8
$e \wedge a$	—	—	—	110,8	109,8	110,6	110,1	—
$e \wedge b$	—	—	—	109,4	109,5	109,2	109,2	—
$d \wedge e$	—	—	—	108,7	109,3	108,3	108,5	—
$c \wedge b'$	—	—	—	109,6	109,3	110,2	110,0	—
$b' \wedge b'$	—	—	109,5	110,1	109,6	109,8	109,7	109,3
$f \wedge b'$	—	—	—	109,0	109,6	108,9	109,1	—
$f \wedge c$	—	—	—	109,4	109,5	109,0	109,0	—

* См. рис. 2.

** Приведены усредненные значения рентгеноструктурных параметров из работы [11].

СТРУКТУРА ЭНДОКОМПЛЕКСОВ $\text{He}@H_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$, $\text{He}_2@H_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$, $\text{H}_2@H_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$

Альтернативные равновесные структуры эндокомплексов $\text{He}@H_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$, рассчитанные методом PBE0/cc-pVTZ, аналогичны структурам полого $H_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$, но симметрия D_{2d} лишь на 0,45 ккал/моль предпочтительнее симметрии D_{6h} . В случаях $\text{He}_2@H_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$ (рис. 3)

Рис. 3. Альтернативные структуры эндокомплекса $\text{H}_2@H_{12}\text{Si}_{12}\text{O}_{18}$ 

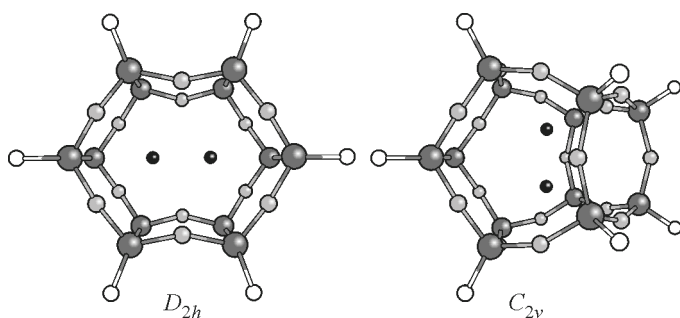


Рис. 4. Альтернативные структуры эндокомплекса $\text{He}_2@H_{12}Si_{12}O_{18}$

и $\text{H}_2@H_{12}Si_{12}O_{18}$ (рис. 4) энергии квазипризматических равновесных структур с 12-атомными циклами на 1,9 и 0,7 ккал/моль ниже энергий равновесных структур с 10-атомными циклами. Расстояния между ядрами гелия 1,974 Å при симметрии D_{2h} и 1,950 Å при симметрии C_{2v} , а также расстояния между ядрами водорода 0,747 Å при симметрии D_{6h} и 0,745 Å при симметрии C_{2v} в эндокомплексах свидетельствуют о меньшем сжатии атомной пары квазипризматической структурой додекасилсесквиоксана. Наименьшей энергии эндокомплекса $\text{H}_2@H_{12}Si_{12}O_{18}$ отвечает симметрия D_{6h} и расположение ядер атомов водорода молекулы H_2 на главной оси симметрии C_6 .

ВЫВОДЫ

Квантово-химические расчеты, выполненные методами DFT B3LYP/сс-pVTZ и PBE0/сс-pVTZ, свидетельствуют о близости энергий, отвечающих как равновесным структурам молекулы додекасилсесквиоксана $H_{12}Si_{12}O_{18}$ с симметрией D_{2d} и D_{6h} , так и равновесным структурам катиона $H_{12}Si_{12}O_{18}^+$ в электронных состояниях ${}^2B_{2u}$ и 2B_1 с симметрией D_{6h} и D_2 . Вывод о термической достижимости структуры с 12-атомными циклами важен для понимания механизмов внедрения атомов и малых молекул в додекасилсесквиоксановую полость и распада эндокомплекса.

Равновесная структура (D_{2d}) эндокомплекса с атомом гелия аналогична структуре (D_{2d}) полового додекасилсесквиоксана. Вместе с тем наши расчеты свидетельствуют об энергетической предпочтительности квазипризматической структуры с 12-атомными циклами для эндокомплекса с парой атомов гелия или молекулой H_2 .

Снижение точности при использовании базиса 6-311G(*d,p*) и менее полных базисов не только увеличивает разности энергий изомеров, но и порождает сильную зависимость некоторых структурных параметров (углов) от выбранного квантово-химического метода (B3LYP, PBE0, MP2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лукевиц Э.Я., Пудова О.А., Стуркович Р.Я. Молекулярная структура кремнийорганических соединений. – Рига: Зинатне, 1988.
2. Voronkov M.G., Lavrentyev V.I. // Topics in Current Chem. – 1982. – **102**. – P. 199 – 236.
3. Sasamori R., Okaue Y., Isobe T., Matsuda Y. // Science. – 1994. – **265**. – P. 1691 – 1693.
4. Päch M., Stösser R. // J. Phys. Chem. (A). – 1997. – **101**, N 44. – P. 8360 – 8361.
5. Stösser R., Päch M. // Appl. Rad. a. Isotop. – 2001. – **55**, N 2. – P. 215 – 220.
6. Agaskar P.A., Day V.W., Klemperer W.G. // J. Amer. Chem. Soc. – 1987. – **109**, N 18. – P. 5554 – 5556.
7. Agaskar P.A., Klemperer W.G. // Inorg. Chim. Acta. – 1995. – **229**, N 1-2. – P. 355 – 364.
8. Hall S.R., Allen F.H., Brown I.D. // Acta Crystallogr. (A). – 1991. – **47**, Pt. 6. – P. 655 – 685.
9. Törnroos K.W., Bürgi H.-B., Calzaferri G., Törnroos K.W., Bürgi H. // Acta Crystallogr. (B). – 1995. – **51**, Pt. 2. – P. 155 – 161.
10. Earley C.W. // J. Phys. Chem. – 1994. – **98**, N 35. – P. 8693 – 8698.
11. Tejerina B., Gordon M.S. // J. Phys. Chem. (B). – 2002. – **106**, N 45. – P. 11764 – 11770.
12. Xiang K.-H., Pandey R., Pernisz U.C., Freeman C. // J. Phys. Chem. (B). – 1998. – **102**, N 44. – P. 8704 – 8711.
13. Kudo T., Akasaka M., Gordon M.S. // Theor. Chem. Account. – 2008. – **120**. – P. 155 – 166.

14. Kudo T., Taketsugu T., Gordon M.S. // J. Phys. Chem. (A). – 2011. – **115**, N 13. – P. 2679 – 2691.
15. Семенов С.Г., Бедрина М.Е. // Журн. структур. химии. – 2013. – **54**, № 1. – С. 166 – 170.
16. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Montgomery J.A. Jr., Vreven T., Kudin K.N., Burant J.C., Millam J.M., Iyengar S.S., Tomasi J., Barone V., Mennucci B., Cossi M., Scalmani G., Rega N., Petersson G.A., Nakatsuji H., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Klene M., Li X., Knox J.E., Hratchian H.P., Cross J.B., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Ayala P.Y., Morokuma K., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Zakrzewski V.G., Dapprich S., Daniels A.D., Strain M.C., Farkas O., Malick D.K., Rabuck A.D., Raghavachari K., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cui Q., Baboul A.G., Clifford S., Cioslowski J., Stefanov B.B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Martin R.L., Fox D.J., Keith T., Al-Laham M.A., Peng C.Y., Nanayakkara A., Challacombe M., Gill P.M.W., Johnson B., Chen W., Wong M.W., Gonzalez C., Pople J.A. GAUSSIAN-03, Rev. B.05. – Pittsburgh PA: Gaussian, 2003.
17. Moran D., Simmonett A.C., Leach F.E. III, Allen W.D., Schleyer P.v.R., Schaeffer H.F. III // J. Amer. Chem. Soc. – 2006. – **128**, N 29. – P. 9342 – 9343.
18. Семенов С.Г., Сиголаев Ю.Ф. // Координац. химия. – 1985. – **11**, № 12. – С. 1635 – 1638.
19. Reed A.E., Weinstock R.B., Weinhold F. // J. Chem. Phys. – 1985. – **83**, N 2. – P. 735 – 746.
20. Glendening E.D., Reed A.E., Weinhold F. // NBO. Ver. 3.1.