

УДК 539.194.01

**СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ДИССОЦИАЦИИ СВЯЗЕЙ СН В РЯДЕ БРОМПРОИЗВОДНЫХ АЛКАНОВ, АЛКЕНОВ И АРЕНОВ**© 2007 Л.А. Грибов<sup>1</sup>, И.А. Новаков<sup>2</sup>, А.И. Павлючко<sup>2\*</sup>, Е.В. Васильев<sup>2</sup><sup>1</sup>Институт геохимии и аналитической химии им В.И. Вернадского, Москва<sup>2</sup>Волгоградский государственный технический университет

Статья поступила 12 сентября 2006 г.

С помощью спектроскопического и квантовохимического методов определена энергия диссоциации связей СН в бромпроизводных метана, этана, пропана, циклопропана, этена, пропена и бензола. Спектроскопические значения энергии диссоциации связей СН рассчитывали на основе фундаментальных полос поглощения в ангармоническом приближении вариационным методом с использованием Морзевско-гармонического базиса. Квантовохимические вычисления производили с использованием базиса 6-311G(3df, 3pd)/ВЗЛУР. Проведено обсуждение полученных закономерностей изменения значений энергии диссоциации связи при изменении структуры молекулы.

**Ключевые слова:** ангармонический расчет, энергия диссоциации связей, бромпроизводные, метан, этан, пропан, циклопропан, этен, пропен, бензол.

**ВВЕДЕНИЕ**

С помощью ранее разработанного метода [ 1—10 ] авторами была определена энергия диссоциации связей СН [ 7—9 ] ряда фтор- и хлорсодержащих соединений.

Представляет интерес определение с помощью данного метода этих величин для бромсодержащих углеводородов. Данные вещества широко используются в химическом синтезе, например, при производстве полимеров и лекарственных препаратов. Кроме того, новые данные для бромсодержащих углеводородов позволяют сделать достаточно полные выводы о закономерностях изменения энергии диссоциации связи СН в галогенпроизводных.

С помощью программы [ 11 ] проводили квантовохимический расчет энергии диссоциации связи СН в ряду бромпроизводных для сопоставления характера ее изменения по сравнению с фтор- и хлорпроизводными. Определяемая нами спектроскопическая энергия диссоциации связи завышена по сравнению с ее истинным значением. Это повышение складывается из величины, на которую функция Морзе завышает энергию диссоциации связи [ 12 ] и из энергетического выигрыша (здесь и далее  $\Delta E$ ), достигаемого за счет оптимизации энергии радикала после отрыва атома. Согласно данным работы [ 13 ], величина, на которую функция Морзе завышает энергию диссоциации связи, хорошо переносима для двухатомных молекул и составляет для молекул СН, NH и OH 13,8, 13,9 и 15,9 % соответственно.

По схеме, описанной в [ 9 ], нами была проведена оценка энергетического выигрыша  $\Delta E$ , достигаемого за счет оптимизации энергии радикала (табл. 1). Результаты вычислений свидетельствуют о том, что данная величина с учетом малой точности квантовохимических вычислений для радикалов слабо меняется при бромзамещении и соизмерима с величиной при фтор- и хлорзамещении. Поэтому и для бромзамещенных углеводородов спектроскопическая энергия диссоциации связей СН уменьшается нами на 90 кДж/моль для обеспечения ее сопоставимости с другими экспериментальными данными.

\* E-mail: pavlyuchko@rambler.ru

Т а б л и ц а 1

Выигрыш энергии  $\Delta E$  (кДж/моль) за счет оптимизации радикала

Молекула	Группа, образующая радикал			
	CH <sub>3</sub> , CH <sub>2</sub> Br, CHBr <sub>2</sub>	C—CH <sub>2</sub> —C, C—CHBr—C	C=CH <sub>2</sub> , C=CHBr	СН
Метан	29,06	—	—	—
Бромметан	25,91	—	—	—
Дибромметан	20,63	—	—	—
Трибромметан	17,20	—	—	—
Этан	29,69	—	—	—
Бромэтан	26,41 <sup>b</sup>	—	—	—
1,1,2-Трибромэтан	32,81	—	—	—
Пропан	28,47	30,05	—	—
2-Бромпропан	—	25,32	—	—
Этен	—	—	12,67	—
Бромэтен	—	—	10,41	—
1,1-Дибромэтен	—	—	18,59	—
<i>транс</i> -1,2-Дибромэтен	—	—	12,95	—
Трибромэтен	—	—	15,68	—
3-Бромпропен	—	—	—	23,54
Бензол	—	—	—	7,42
1,4-Дибромбензол	—	—	—	8,78
1,3,5-Трибромбензол	—	—	—	8,49

<sup>b</sup> Связь СН в группе CH<sub>2</sub>Br.

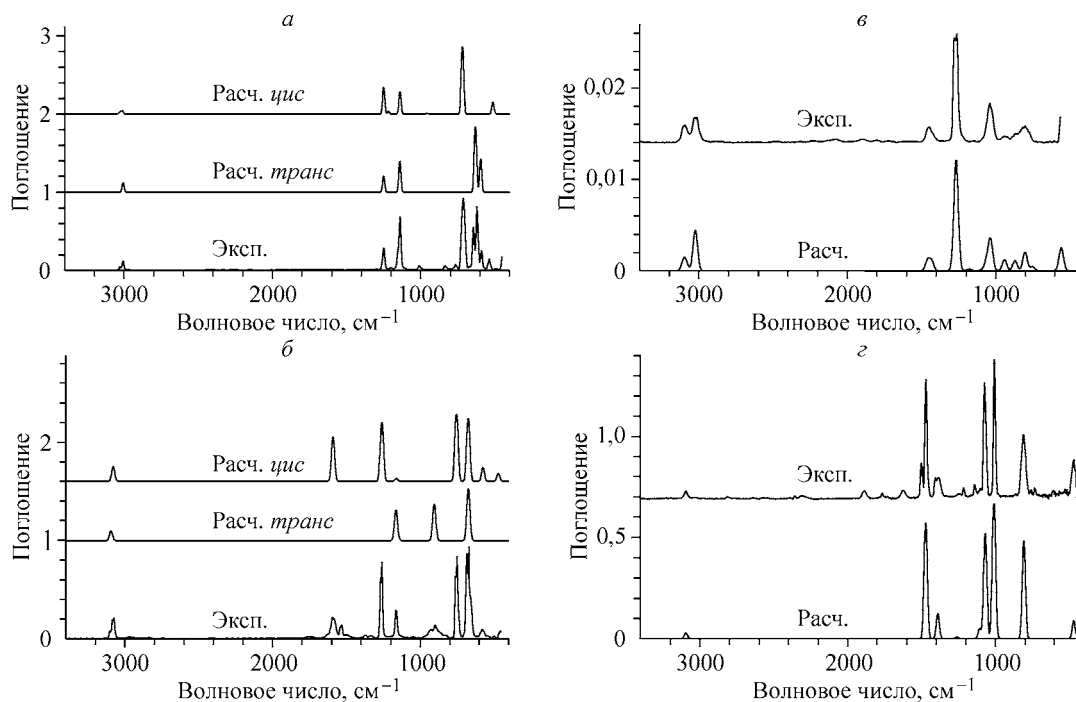
## АНАЛИЗ ВЫЧИСЛЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЭНЕРГИИ ДИССОЦИАЦИИ СВЯЗЕЙ

В соответствии с описанной в [2] схемой расчета были проведены вычисления энергии диссоциации связи СН для бромпроизводных метана (бромметан, dibромметан, трибромметан), этана (бромэтан, 1,2-дибромэтан, 1,1,2-трибромэтан, 1,1,2,2-тетрабромэтан), пропана (2-бромпропан, 1,2-дибромпропан, 1,3-дибромпропан, 1,2,3-трибромпропан), циклопропана (бромциклопропан), этена (бромэтен, 1,1-дибромэтен, *цис*-1,2-дибромэтен, *транс*-1,2-дибромэтен, трибромэтен), пропена (2-бромпропен, 3-бромпропен, 1,1-дибромпропен, 2,3-дибромпропен) и бензола (1,4-дибромбензол, 1,3,5-трибромбензол, 1,2,4,5-тетрабромбензол).

Для данных соединений в эксперименте разрешены полосы поглощения для всех связей СН. Это позволило нам произвести спектроскопический расчет энергии диссоциации для каждой связи СН. Для 1,2-дибромэтана, 1,1,2,2-тетрабромэтана и 1,2-дибромэтена экспериментальные спектры содержат хорошо разрешенные полосы поглощения для *цис*- и *транс*-конфигураций данных молекул, что позволило определить энергии диссоциации связей СН для обеих конфигураций.

Экспериментальные и рассчитанные спектры поглощения для 1,1,2,2-тетрабромэтана, 1,2-дибромэтена, бромциклопропана и 1,4-дибромбензола приведены на рисунке. Результаты вычислений даны в табл. 2 и 3. Для получения более полной информации о характере изменения энергии диссоциации связей СН при замещении атомов водорода на атомы брома в рассматриваемых соединениях также приведены значения для молекул метана, этана, пропана, циклопропана, этена, пропена и бензола.

На основании полученных данных проследим закономерности в изменении величины энергии диссоциации связей СН при последовательном бромировании предельных, непредельных и ароматических соединений и сопоставим их с аналогичными для фтор- и хлорзамещенных углеводородов [7—10]. Проведенные расчеты для бромпроизводных показали, что, как



Экспериментальный и рассчитанный спектры для *цис*- и *транс*-конформаций 1,1,2,2-тетрабромэтана (а), 1,2-дибромэтана (б), бромциклопропана (в), 1,4-дибромбензола (г)

правило, при бромировании соединения происходит рост спектроскопического значения энергии диссоциации связей СН (здесь и далее  $D_{\text{СН}}^s$ ). Величина этого роста зависит от того, как близко расположены атомы водорода и брома и, если они входят в различные группы, от кратности соединяющей их связи СС. Кроме того, эта величина всегда растет при увеличении числа атомов брома в молекуле. Для молекулы метана при бромировании происходит рост величины  $D_{\text{СН}}^s$  на 11 кДж/моль для бромметана, 15 кДж/моль для дибромметана и 14 кДж/моль для трибромметана. Для бромэтана увеличение  $D_{\text{СН}}^s$  составляет 5 кДж/моль для связей СН, входящих в группу  $\text{СН}_2\text{Br}$ . При этом происходит незначительное уменьшение (на 2—3 кДж/моль) величины  $D_{\text{СН}}^s$  для связей СН, входящих в соседнюю группу  $\text{СН}_3$ . Величины  $D_{\text{СН}}^s$  для связей СН в группе  $\text{СН}_3$  почти не зависят от их расположения относительно атома брома.

Рост величины  $D_{\text{СН}}^s$  зависит от числа атомов брома в замещаемой группе и от взаимного расположения атомов брома в различных замещаемых группах. Например, увеличение  $D_{\text{СН}}^s$  в группе  $\text{СНBr}_2$  составляет в бромзамещенных этана, по сравнению с аналогичным значением в этане, от 11 до 17 кДж/моль. Для *цис*- и *транс*-конформаций 1,2-дибромэтана и 1,1,2,2-тетрабромэтана величина  $D_{\text{СН}}^s$  отличается на 5—6 кДж/моль. Следует отметить, что величина  $D_{\text{СН}}^s$  с точностью до 2 кДж/моль переносима в ряду бромзамещенных этана с различным числом атомов брома.

Для 1-бромпроизводных и 1,3-дибромпроизводных пропана рост величины  $D_{\text{СН}}^s$  для связей СН, входящих в группу  $\text{СН}_2\text{Br}$ , по сравнению с аналогичным значением в пропане, составляет 16 кДж/моль. Для 2-бромзамещенных пропана этот рост для группы  $\text{СНBr}$  равен 7 кДж/моль. Величина  $D_{\text{СН}}^s$  хорошо переносима для различных бромзамещенных пропана, при этом ощущается дальнейшее влияние атома брома (до 7 кДж/моль) на величину  $D_{\text{СН}}^s$  для связей СН, входящих в соседнюю группу  $\text{СН}_3$ .

Т а б л и ц а 2

## Энергия диссоциации связей СН в бромпроизводных алканах и циклоалканах (кДж/моль)

Молекула	$D_{\text{СН}}$ в $\text{CH}_3, \text{CH}_2\text{Br}$ и $\text{CНBr}_2$			$D_{\text{СН}}$ в $\text{CH}_2$ и $\text{СНBr}$		
	Расчет		Эксп.	Расчет		Эксп.
	спектр.	квант.-хим.		спектр.	квант.-хим.	
Метан	427,9	502,3	436,6 <sup>1k</sup>	—	—	—
	—	—	439,1 <sup>2</sup>	—	—	—
Бромметан	439,0	476,7	419,0 <sup>1k</sup>	—	—	—
	—	—	426,5 <sup>2</sup>	—	—	—
Дибромметан	442,4	451,3	420,3 <sup>2</sup>	—	—	—
Трибромметан	441,6	427,2	416,1 <sup>2</sup>	—	—	—
Этан	418,1	482,6	411,3 <sup>1k</sup>	—	—	—
Бромэтан	415,1 <sup>p</sup>	475,7 <sup>p</sup>	—	—	—	—
	415,9 <sup>a</sup>	488,7 <sup>a</sup>	—	—	—	—
	423,1 <sup>b</sup>	463,9 <sup>b</sup>	414,0 <sup>2</sup>	—	—	—
<i>цис</i> -1,2-Дибромэтан	423,1	453,2	—	—	—	—
<i>транс</i> -1,2-Дибромэтан	429,1	470,7	—	—	—	—
1,1,2-Трибромэтан	430,3 <sup>b</sup>	456,3 <sup>b</sup>	—	—	—	—
	435,4 <sup>c</sup>	430,4 <sup>c</sup>	—	—	—	—
<i>цис</i> -1,1,2,2-Тетрабромэтан	433,9	422,3	—	—	—	—
<i>транс</i> -1,1,2,2-Тетрабромэтан	429,1	449,2	—	—	—	—
Пропан	410,2 <sup>p</sup>	484,8 <sup>p</sup>	409,6 <sup>1k</sup>	395,8	467,0	395,0 <sup>1k</sup>
	411,8	482,6	415,1 <sup>1k</sup>	—	—	—
2-Бромпропан	415,9	489,0	—	402,3	452,2	—
	409,8	474,3	—	—	—	—
	412,8	488,5	—	—	—	—
1,2-Дибромпропан	418,3 <sup>a</sup>	491,1 <sup>a</sup>	—	402,3	458,3	—
	412,2 <sup>a</sup>	476,8 <sup>a</sup>	—	—	—	—
	415,3 <sup>a</sup>	489,8 <sup>a</sup>	—	—	—	—
	427,9 <sup>b</sup>	468,0 <sup>b</sup>	—	—	—	—
	427,9 <sup>b</sup>	470,5 <sup>b</sup>	—	—	—	—
1,3-Дибромпропан	427,9	463,5	—	396,3	477,9	—
1,2,3-Трибромпропан	427,9	451,9	—	402,3	457,9	—
	427,9	465,9	—	—	—	—
Циклопропан	—	—	—	452,9	491,6	426,1 <sup>1k</sup>
	—	—	—	—	—	437,4 <sup>2</sup>
Бромциклопропан	—	—	—	452,9	491,6	—
	—	—	—	446,9	498,6	—
	—	—	—	454,4 <sup>d</sup>	473,3 <sup>d</sup>	—

Примечание. <sup>a</sup> — связь СН в группе  $\text{CH}_3$ ; <sup>b</sup> — связь СН в группе  $\text{CH}_2\text{Br}$ ; <sup>c</sup> — связь СН в группе  $\text{СНBr}_2$ ; <sup>d</sup> — связь СН в группе  $\text{СНBr}$ ; <sup>p</sup> — связь СН в группе  $\text{CH}_3$ , находящаяся в плоскости симметрии молекулы; <sup>1k</sup> — экспериментальные значения из работы [14], полученные кинетическим методом; <sup>2</sup> — экспериментальные значения из работы [15].

Т а б л и ц а 3

Энергия диссоциации связей СН в бромпроизводных алкенов и аренов (кДж/моль)

Молекула	$D_{\text{СН}}$ в $\text{СН}_3, \text{СН}_2\text{Br}$ и $\text{СНBr}_2$			$D_{\text{СН}}$ в $\text{СН}_2$ и $\text{СНBr}$			$D_{\text{СН}}$ в СН		
	Расчет		Эксп.	Расчет		Эксп.	Расчет		Эксп.
	спектр.	квант.-хим.		спектр.	квант.-хим.		спектр.	квант.-хим.	
Этен	—	—	—	446,3	504,3	452,7 <sup>1k</sup>	—	—	—
	—	—	—	—	—	382,8 <sup>1e</sup>	—	—	—
	—	—	—	—	—	460,7 <sup>2</sup>	—	—	—
Бромэтен	—	—	—	452,9 <sup>tr</sup>	513,2 <sup>tr</sup>	469,3 <sup>2</sup>	—	—	—
	—	—	—	452,9 <sup>cis</sup>	503,9 <sup>cis</sup>	—	—	—	—
	—	—	—	454,1 <sup>a</sup>	486,9 <sup>a</sup>	455,5 <sup>2</sup>	—	—	—
1,1-Дибромэтен	—	—	—	452,0	507,9	—	—	—	—
<i>цис</i> -1,2-Дибромэтен	—	—	—	455,6	483,2	—	—	—	—
<i>транс</i> -1,2-Дибромэтен	—	—	—	460,7	493,8	—	—	—	—
1,1,2-Трибромэтен	—	—	—	458,0	486,6	—	—	—	—
Пропен	418,2 <sup>p</sup>	489,2 <sup>p</sup>	361,1 <sup>2</sup>	444,1 <sup>tr</sup>	505,7 <sup>tr</sup>	—	438,8	489,1	—
	407,9	459,4	—	444,1 <sup>cis</sup>	507,7 <sup>cis</sup>	—	—	—	—
2-Бромпропен	412,8 <sup>p</sup>	483,6 <sup>p</sup>	—	454,4 <sup>tr</sup>	501,8 <sup>tr</sup>	—	—	—	—
	412,8	465,8	—	454,4 <sup>cis</sup>	513,2 <sup>cis</sup>	—	—	—	—
3-Бромпропен	430,3	438,1	—	444,1 <sup>tr</sup>	510,5 <sup>tr</sup>	—	438,8	482,4	—
	—	—	—	444,1 <sup>cis</sup>	510,1 <sup>cis</sup>	—	—	—	—
1,1-Дибромпропен	433,9 <sup>p</sup>	491,5 <sup>p</sup>	—	—	—	—	450,5	487,2	—
	424,9	457,1	—	—	—	—	—	—	—
2,3-Дибромпропен	429,4	445,4	—	454,4 <sup>tr</sup>	514,5 <sup>tr</sup>	—	—	—	—
	—	—	—	454,4 <sup>cis</sup>	505,0 <sup>cis</sup>	—	—	—	—
Бензол	—	—	—	—	—	—	448,4	504,9	457,0 <sup>3</sup>
1,4-Дибромбензол	—	—	—	—	—	—	456,2	510,3	—
1,3,5-Трибромбензол	—	—	—	—	—	—	456,5	516,7	—
1,2,4,5-Тетрабромбензол	—	—	—	—	—	—	457,1	508,7	—

П р и м е ч а н и е. <sup>tr</sup> — связь СН в группе  $\text{СН}_2$  в положении *транс*; <sup>cis</sup> — связь СН в группе  $\text{СН}_2$  в положении *цис*; <sup>a</sup> — связь СН в группе  $\text{СНBr}$ ; <sup>p</sup> — связь СН в группе  $\text{СН}_3$ , находящаяся в плоскости  $\text{ССС}$  для бромпропенов; <sup>1e</sup> — экспериментальные значения из работы [ 14 ], полученные методом электронного удара; <sup>1k</sup> — экспериментальные значения из работы [ 14 ], полученные кинетическим методом; <sup>2</sup> — экспериментальные значения из работы [ 15 ]; <sup>3</sup> — экспериментальные значения из работы [ 16 ].

В бромциклопропане возрастание величины  $D_{\text{СН}}^s$  для связей СН, входящих в группу  $\text{СНBr}$ , незначительно (2 кДж/моль) по сравнению с аналогичным значением в циклопропане. Так же, как и в бромзамещенных пропана, наблюдается заметное дальнейшее влияние (6 кДж/моль) атома брома на величину  $D_{\text{СН}}^s$  для связи СН, входящей в соседнюю группу  $\text{СН}_2$  и лежащей с другой стороны плоскости молекулы. Очевидно, что это связано с появлением анизотропии электронной плотности в бромзамещенных углеводородах.

В непредельных бромзамещенных углеводородах также наблюдается рост величины  $D_{\text{СН}}^s$  (до 8 кДж/моль) для связей СН, входящих в группу  $\text{СНBr}=\text{C}$ . Кроме того, в бромпроизводных этена и пропена всегда наблюдается значительное дальнейшее влияние (до 6 кДж/моль) атома бро-

ма на величину  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  для связей СН у другого атома углерода, входящего в кратную связь С=С. Очевидно, что это связано со значительной подвижностью электронной оболочки при кратной связи С=С.

Для 1,2-дибромэтена, аналогично с бромпроизводными этана, по нашим данным, имеется значительная разница (5 кДж/моль)  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  для *цис*- и *транс*-конформаций. В 3-бромпропене и 2,3-дибромпропене влияние атома брома, входящего в группу  $\text{СН}_2\text{Br}$ , на величину  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  для связей СН, входящих в другие группы, практически не наблюдается. При этом рост величины  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  в группе  $\text{СН}_2\text{Br}$  составляет в среднем 18 кДж/моль. С другой стороны, для 2-бромпропена наблюдается дальнейшее влияние (до 5 кДж/моль) атома брома на величины  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  для связей СН в группе  $\text{СН}_3$ , приводящее к выравниванию значений их энергии диссоциации. Следует отметить, что величины  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  хорошо переносятся в аналогичных группах пропена и различных его бромпроизводных.

В ароматическом ряду введение атомов брома в кольцо также приводит к увеличению  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  для соседних атомов углерода, что связано с подвижностью ароматической  $\pi$ -системы. Средняя величина этого увеличения равна 8 кДж/моль. При этом величина  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  хорошо переносима в ряду 1,4-дибромбензола, 1,3,5-трибромбензола и 1,2,4,5-тетрабромбензола.

Для изученных нами соединений практически отсутствуют систематические экспериментальные данные, что не позволяет произвести достаточно полное сопоставление  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  с экспериментальными величинами.

Для вычисленных нами квантовохимических значений энергии диссоциации связей СН (здесь и далее  $D_{\text{СН}}^{\text{Q}}$ ) наблюдается, в целом, та же закономерность изменения, что и для фтор- и хлорсодержащих углеводородов [7—9], а именно: замещение одного из атомов Н на атом Br ведет к понижению  $D_{\text{СН}}^{\text{Q}}$  для связей СН, связанных с тем же атомом углерода, и к увеличению  $D_{\text{СН}}^{\text{Q}}$  для связей СН, связанных с другими атомами углерода.

### ВЫВОДЫ

Проведенное нами изучение фтор-, хлор- и бромсодержащих углеводородов [7—9] позволяет сделать некоторые общие выводы о закономерностях изменения энергии диссоциации связи СН в галогенсодержащих углеводородах.

1. Во всех случаях замещение атома Н на NaI приводит к увеличению  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  для связей СН, входящих в замещаемую группу. Величина этого увеличения зависит от природы группы, в которую входит замещаемый атом Н. Например, для молекулы метана это увеличение составляет от 7 до 11 кДж/моль. Для групп  $\text{СН}_2$  данный рост лежит в пределах от 5 до 8 кДж/моль, групп  $\text{СН}_2=\text{C}$  — от 8 до 15 кДж/моль и для близлежащих СН в ароматическом кольце — от 8 до 11 кДж/моль.

2. Увеличение  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  для связей СН, входящих в замещаемую группу, зависит от числа замещений в этой группе. Следующее замещение в среднем приводит к 75%-му увеличению  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  при первом замещении.

3. Замещение атома Н на атомы F и Cl практически не приводит к изменению  $D_{\text{СН}}^{\text{S}}$  для связей СН, входящих в группу, связанную связью С—С с замещаемой группой. Очевидно, что это связано с локальностью электронной оболочки алифатических групп. При бромировании в этом случае наблюдаются небольшие изменения, что связано с делокализацией электронной оболочки брома. Согласно нашим данным, при галогенировании велико дальнейшее влияние на

$D_{\text{СН}}^s$  для связей СН, входящих в группу, связанную кратной связью С=С с замещаемой группой, что обусловлено значительной делокализацией электронной оболочки. Для ароматического кольца величина этого дальнего влияния имеет промежуточное значение, пропорциональное кратности связи.

4. Для галогензамещенных непредельных углеводородов наблюдается значительная разница  $D_{\text{СН}}^s$  для *транс*- и *цис*-изомеров. Это разница также велика для *цис*- и *транс*-изомеров бромзамещенных этана, в отличие от фтор- и хлорзамещенных этана, где это влияние слабо прослеживается.

5. Квантовохимические вычисления величины  $D_{\text{СН}}^Q$  для галогенсодержащих углеводородов дают внутренне противоречивые результаты. С одной стороны, вычисления, проводимые для основного состояния молекулы, свидетельствуют об увеличении  $D_{\text{СН}}^Q$ . В частности, наблюдается укорачивание связей СН и увеличение их жесткости. С другой стороны, наблюдается уменьшение величины  $D_{\text{СН}}^Q$ , вычисляемой по разности энергии молекулы и радикалов, образующихся при ее диссоциации. С нашей точки зрения, это связано с недостаточной точностью квантовохимических вычислений для галогенсодержащих радикалов. Кроме того, квантовохимические вычисления дают неверные соотношения энергии поворотных изомеров галогенпроизводных.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований N 05-03-32017.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грибов Л.А., Павлючко А.И. Вариационные методы решения ангармонических задач в теории колебательных спектров молекул. – М.: Наука, 1998.
2. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И., Орлинсон Б.С. // Журн. структур. химии. – 2003. – **44**, № 6. – С. 1031 – 1041.
3. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И. и др. // Там же. – С. 1042 – 1051.
4. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И. и др. // Там же. – 2004. – **45**, № 5. – С. 816 – 821.
5. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И. и др. // Там же. – № 6. – С. 999 – 1007.
6. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И., Кучуров И.В. // Там же. – 2006. – **47**, № 4. – С. 648 – 653.
7. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И., Васильев Е.В. // Там же. – С. 654 – 660.
8. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И., Шумовский О.Ю. // Там же. – 2007. – **48**, № 3. – С. 445 – 451.
9. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И., Васильев Е.В. // Там же. – № 4. – С. 650 – 656.
10. Грибов Л.А., Новаков И.А., Павлючко А.И., Шумовский О.Ю. // Там же. – С. 657 – 665.
11. Schmidt M.W., Baldridge K.K., Boatz J.A. et al. // J. Comput. Chem. – 1993. – **14**. – P. 1347 – 1363.
12. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. – М.: ГИФМЛ, 1962.
13. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. – М.: Атомиздат, 1980.
14. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону / Под ред. В.Н. Кондратьева – М.: Наука, 1974.
15. Тахистов В.В. Органическая масс-спектрометрия. – Л.: Наука, 1990.
16. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. – Л.: Химия, 1978.