

УДК 541.60

ЗАВИСИМОСТЬ ДЛИНЫ СВЯЗИ В МОЛЕКУЛАХ И КРИСТАЛЛАХ
ОТ КООРДИНАЦИОННЫХ ЧИСЕЛ АТОМОВ

© 2010 С.С. Бацанов*

*Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, Черноголовка**Статья поступила 13 марта 2009 г.**С доработки — 20 мая 2009 г.*

Рассмотрены два подхода к описанию изменений длины связей в молекулах и кристаллах при изменении координационных чисел атомов, основанные на разнице или отношении межатомных расстояний при изменении структуры, и показано, что второй подход дает более точные результаты. Изменение межатомных расстояний в полярных соединениях имеет точно такой же характер как изменение ионных радиусов при вариации координационных чисел.

Ключевые слова: межатомное расстояние, фазовый переход, координационное число, порядок связи.

Концепция координационного числа (КЧ) как числа ближайших соседей, расположенных на равных расстояниях от центрального атома, была введена в науку Вернером [1] в 1893 г. для координационных соединений, а в 1915 г. Пфайфером для структур типа NaCl [2]. Зависимость межатомных расстояний в металлах от КЧ эмпирически установил Гольдшмидт [3] в 1927 г., а Полинг [4] в 1929 г. сформулировал концепцию силы связи (синонимы: кратность или порядок связи, связевая валентность V), согласно которой

$$V = Z / \text{КЧ}, \quad (1)$$

где Z — валентность атома, и в 1947 г. предложил соотношение между длиной (d) и порядком связи [5]:

$$d = d_1 - a \log V, \quad (2)$$

где d_1 — длина одинарной связи и $a = 0,71$ для ковалентных веществ. После этих работ были предложены различные полуэмпирические зависимости длин связей от их кратности (см. библиографию в [6, 7]), которые использовались, как правило, для интерпретации структур тройных кислородных и галоидных соединений. Наиболее популярными оказались формулировки Брауна—Шэннона [8] и Захариазена [9]

$$V = (d_1 / d)^N, \quad (3)$$

$$d = d_1 - b \ln V \quad (4)$$

и особенно Брауна и Олтерматта [10]

$$d = d_1 - 0,37 \ln V, \quad (5)$$

где N — эмпирический параметр, изменяющийся в разных структурах в пределах от 4 до 7, а b принимает для различных связей значения 0,305—0,341 [6, 9, 11], 0,44—0,50 [12], 1,02 и 0,67 [13] и 0,75 [14].

Непостоянство параметра b для разных типов связей и валентных состояний атомов неоднократно обсуждали в кристаллохимических обзорах [7, 15—18], наконец, Зоччи [6] на основе статистического анализа 318 кристаллических структур показал, что применение уравне-

* E-mail: batsanov@gol.ru

ния (5) не дает удовлетворительных результатов. Действительно, трудно понять, почему значение b должно быть неизменным для атомов с различной электронной структурой и размером, хотя в конкретных случаях, например для вычисления ван-дер-ваальсовых радиусов, оно вполне подходит [19].

В настоящей работе рассмотрено изменение межатомных расстояний при максимально возможном изменении КЧ в структурах бинарных соединений в газообразном и кристаллическом состояниях для нахождения альтернативной зависимости $d = f(\text{КЧ})$.

ПРЕВРАЩЕНИЕ МОЛЕКУЛ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ

Сравним два подхода для описания вариации межатомных расстояний при конденсации полярных молекул. Эти изменения можно выразить как отношение расстояний $k_{mn} = d(\text{КЧ}_m)/d(\text{КЧ}_n)$ или как их разность $\Delta d_{mn}(\text{Å}) = d(\text{КЧ}_m) - d(\text{КЧ}_n)$, где m и n — координационные числа в исходном и конечном состояниях вещества. Экспериментальные данные для молекул и кристаллов взяты из обзоров [20—24] или оригинальных статей, на которые даны ссылки.

Как следует из табл. 1, усредненные значения отношений и разниц межатомных расстояний для различных изменений координационных чисел в моногалогенидах равны:

$$k_{21} = 1,056 \pm 1,0 \%, \quad k_{41} = 1,141 \pm 2,8 \%, \quad k_{61} = 1,220 \pm 3,7 \%, \quad k_{81} = 1,264 \pm 3,8 \%;$$

$$\Delta d_{21}, \text{Å} = 0,131 \pm 16,5 \%, \quad \Delta d_{41}, \text{Å} = 0,286 \pm 3,5 \%, \quad \Delta d_{61}, \text{Å} = 0,537 \pm 15,1 \%,$$

$$\Delta d_{81}, \text{Å} = 0,698 \pm 12,5 \%.$$

Т а б л и ц а 1

Длина связей (Å) в молекулах и кристаллических соединениях моногалогенидов

М	КЧ	$d(\text{M—H})$	$d(\text{M—F})$	$d(\text{M—Cl})$	$d(\text{M—Br})$	$d(\text{M—I})$
Au	1			2,199 [25]	2,318 [25]	2,471 [25]
	2			2,356	2,422	2,603
Cu	1	1,462		2,051	2,173	2,338
	4	1,756		2,345	2,464	2,624
Ag	1		1,983	2,281	2,393	2,545
	6		2,465*	2,774	2,887	3,035**
Li	1	1,596	1,564	2,021	2,170	2,392
	6	2,043	2,009	2,566	2,747	3,025
Na	1	1,887	1,926	2,361	2,502	2,711
	6	2,445	2,307	2,814	2,981	3,231
	8		2,36	3,00		
K	1	2,240	2,171	2,667	2,821	3,048
	6	2,856	2,664	3,139	3,293	3,526
	8	2,96	2,78 [26]	3,28 [27]	3,46 [27]	3,76 [27]
Rb	1	2,367	2,270	2,787	2,945	3,177
	6	3,025	2,815	3,285	3,434	3,663
	8	3,16	2,83 [27]	3,41 [27]	3,57 [27]	3,84 [27]
Cs	1	2,494	2,345	2,906	3,072	3,315
	6	3,195	3,005	3,47	3,615	3,83
	8	3,312 [28]	3,09	3,566	3,720	3,956
Tl	1		2,084	2,485	2,618	2,814
	6			3,16	3,297	3,47
	8			3,327	3,443	3,64

* Для AgF в B2 структуре $d = 2,595 \text{ Å}$.

** Для AgI в B3 структуре $d = 2,812 \text{ Å}$.

Т а б л и ц а 2

Длины связей (Å) в молекулах и кристаллах MX (X = C, N, O, S)

MX	КЧ = 1	КЧ = 4	MX	КЧ = 1	КЧ = 6	MX	КЧ = 1	КЧ = 6
BeO	1,331	1,649	ZnO	1,719	2,140	MnO	1,648	2,222
BeS	1,742	2,107	ZnS	2,10	2,53	MnS	2,068	2,610
MgS	2,144	2,451	AlN	1,686	2,022	FeO	1,619	2,154
ZnO	1,719 [29]	1,978	ScN	1,687	2,252	FeS	2,04	2,49
ZnS	2,10 [30]	2,341	YN	1,804	2,44	CoO	1,631	2,130
BN	1,274	1,566	LaN	2,172	2,65	CoS	1,978	2,34
AlN	1,686	1,892	ZrC	1,807	2,344	NiO	1,631	2,088
MnS	2,068 [31]	2,429	HfN	1,69	2,263	NiS	2,00	2,39
FeN	1,580 [32]	1,865	VN	1,566	2,072	PtN	1,682 [35]	2,402 [36]
MX	КЧ = 1	КЧ = 8	NbC	1,700	2,233	PtC	1,679 [35]	2,407 [37]
CaO	1,822	2,52	TaN	1,683	2,168	MgO	1,749	2,106
CaS	2,320	3,00	WN	1,667	2,06	CaO	1,822	2,405
SrO	1,920	2,65	LaS	2,352 [33]	2,926 [34]	CaS	2,320	2,842
SrS	2,441	3,125	PbS	2,287	2,968	SrO	1,920	2,580
BaO	1,940	2,96	ThO	1,840	2,60	SrS	2,441	3,012
BaS	2,507	3,37	CrS	2,071	2,46	BaO	1,940	2,770
LaS	2,352	2,988	CrN	1,563	2,074	BaS	2,507	3,193

Как видно из табл. 2, средние значения k и Δd в соединениях многовалентных элементов равны:

$$k_{41} = 1,174 \pm 3,6 \%, \quad k_{61} = 1,289 \pm 5,5 \%, \quad k_{81} = 1,354 \pm 6,1 \%;$$

$$\Delta d_{41}, \text{Å} = 0,293 \pm 16,9 \%, \quad \Delta d_{61}, \text{Å} = 0,537 \pm 22,5 \%, \quad \Delta d_{81}, \text{Å} = 0,759 \pm 16,6.$$

Средние значения k и Δd в соединениях типа MX_2 равны:

$$k_{42} = 1,108 \pm 2,3 \%, \quad k_{62} = 1,171 \pm 2,8 \%, \quad k_{82} = 1,194 \pm 3,8 \%;$$

$$\Delta d_{42}, \text{Å} = 0,213 \pm 30,0 \%, \quad \Delta d_{62}, \text{Å} = 0,363 \pm 18,8 \%, \quad \Delta d_{82}, \text{Å} = 0,395 \pm 15,7 \%.$$

Средние значения k и Δd в соединениях типа MX_3 равны:

$$k_{63} = 1,110 \pm 1,3 \%, \quad k_{93} = 1,174 \pm 1,4 \%;$$

$$\Delta d_{63}, \text{Å} = 0,215 \pm 17,6 \%, \quad \Delta d_{93}, \text{Å} = 0,437 \pm 6,7 \%.$$

ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ

Сравнение межатомных расстояний в полиморфных модификациях соединений типа MX в таблицах 1, 5, 6 и соединений типа MX_2 в табл. 7 показывает аналогичное влияние координационных чисел на длины связей. При этом следует иметь в виду, что межатомные расстояния в фазах высокого давления определены с точностью $\pm 0,02$ Å.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как показано выше, конденсация полярных молекул, или фазовый переход в кристаллах при высоких давлениях с увеличением координационных чисел в пределах от 1 до 8, ведет к закономерному увеличению межатомных расстояний независимо от природы атомов в соединениях MX_n . При этом стабильность отношений расстояний (k_{mn}) много больше, чем разница длин связей (Δd_{mn}), что указывает на ключевую роль атомных размеров, тогда как влияние валентности много меньше. Следовательно, средние относительные изменения длин связей в бинарных соединениях при изменении координационных чисел могут быть описаны следующим образом:

$KЧ_m \rightarrow CN_n$	$1 \rightarrow 4/3$	$1 \rightarrow 3/2$	$1 \rightarrow 2$	$1 \rightarrow 3$	$1 \rightarrow 4$	$1 \rightarrow 6$	$1 \rightarrow 8$
k_{mn}	1,05	1,08	1,10	1,17	1,19	1,27	1,30

Эти изменения близки к изменениям ионных радиусов при изменении координационного числа в структуре. Так, согласно Полингу ([46], с. 538), для K^+ или Cl^- имеем следующий характер изменения радиусов ионов при изменении их координации:

$KЧ_m \rightarrow CN_n$	$1 \rightarrow 1$	$1 \rightarrow 2$	$1 \rightarrow 3$	$1 \rightarrow 4$	$1 \rightarrow 6$	$1 \rightarrow 8$
k_{mn}	1,00	1,10	1,17	1,19	1,27	1,30

Этот результат следует из закономерностей изменения атомных радиусов при увеличении полярности связи ([24], с. 285), когда уже при 70%-й ионности радиусы атомов приближаются

Т а б л и ц а 3

Длины связей (Å) в молекулах и кристаллах состава MX_2

MX_2	KЧ = 2	KЧ = 4	MX_2	KЧ = 2	KЧ = 6	MX_2	KЧ = 2	KЧ = 6
BeH ₂	1,334 [38]	1,47 [39]	CaI ₂	2,822	3,12	NbO ₂	1,713	2,054
BeF ₂	1,374	1,540	ZnF ₂	1,743	2,033	NiF ₂	1,730	2,073
BeCl ₂	1,791	2,028 [40]	ZnBr ₂	2,194	2,74	NiCl ₂	2,056	2,474
BeBr ₂	1,932	2,185 [40]	CdCl ₂	2,266	2,652	NiBr ₂	2,177	2,628
BeI ₂	2,10	2,417 [40]	CdBr ₂	2,386	2,782	NiI ₂	2,44	2,74
ZnCl ₂	2,064	2,346	CdI ₂	2,570	2,989	MX_2	KЧ = 2	KЧ = 8
ZnBr ₂	2,194	2,415	MnF ₂	1,812	2,196	CaF ₂	2,10	2,365
ZnI ₂	2,389	2,645	MnCl ₂	2,184	2,593	SrF ₂	2,20	2,511
HgI ₂	2,558	2,788 [41]	MnBr ₂	2,328	2,727	SrCl ₂	2,607	3,021
SiO ₂	1,521	1,607	MnI ₂	2,538	2,92	SrBr ₂	2,748	3,17
SiS ₂	1,924	2,14	FeF ₂	1,770	2,139	BaF ₂	2,32	2,683
GeO ₂	1,628	1,74	FeCl ₂	2,132	2,536	BaCl ₂	2,768	3,17
GeS ₂	2,005	2,19	FeBr ₂	2,272	2,636	CdF ₂	1,97	2,333
MX_2	KЧ = 2	KЧ = 6	FeI ₂	2,51	2,88	HgF ₂	1,96	2,398
MgH ₂	1,703 [38]	1,948	CoF ₂	1,756	2,100	PbF ₂	2,036	2,570
MgF ₂	1,746	1,991	CoCl ₂	2,063	2,508	MnF ₂	1,812	2,25
MgCl ₂	2,179	2,565	CoBr ₂	2,223	2,63	CoF ₂	1,756	2,13
MgBr ₂	2,308	2,735	CoI ₂	2,475	2,83	NiF ₂	1,730	2,10
MgI ₂	2,52	2,918	SiO ₂	1,521	1,774	HfO ₂	1,776	2,22
CaCl ₂	2,483	2,741 [42]	GeO ₂	1,628	1,885	Li ₂ O	1,606	2,00
CaBr ₂	2,592	2,905 [43]						

Т а б л и ц а 4

Длины связей (Å) в молекулярных и кристаллических тригалогенидах MX_3

MX_3	KЧ = 3	KЧ = 6	MX_3	KЧ = 3	KЧ = 6	MX_3	KЧ = 3	KЧ = 9
ScF ₃	1,808	2,01	GaF ₃	1,716	1,88	LaF ₃ [45]	2,077	2,495
ScCl ₃	2,285	2,52	TiCl ₃	2,205	2,47	LaCl ₃ [45]	2,534	2,952
YF ₃	2,04	2,32	VF ₃	1,721	1,935	LaBr ₃ [45]	2,689	3,115
YCl ₃	2,422 [44]	2,633	MnF ₃	1,739	1,93	LaI ₃ [45]	2,867	3,355
AlF ₃	1,628	1,80	FeF ₃	1,763	1,925			
AlCl ₃	2,052	2,31	FeCl ₃	2,145	2,37			

Т а б л и ц а 5

Изменение длин связей (Å) в соединениях MX при изменении КЧ от 4 до 6

КЧ = 4	SiC	1,888	MgS	2,45	MgSe	2,53	КЧ = 4	MnS	2,431	MnSe	2,546	MnTe	2,744
КЧ = 6		2,02		2,596		2,732	КЧ = 6		2,610		2,725		3,013
КЧ = 4	ZnO	1,978	ZnS	2,341	ZnSe	2,454	КЧ = 4	AlN	1,896	GaN	1,948	InN	2,156
КЧ = 6		2,140		2,53		2,67	КЧ = 6		2,022		2,076		2,344
КЧ = 4	CdS	2,528	CdSe	2,620	CdTe	2,806							
КЧ = 6		2,72		2,84		3,05							

$$k_{64} = 1,078 \pm 0,9 \%, \Delta d_{64}, \text{Å} = 0,185 \pm 22,0 \%$$

Т а б л и ц а 6

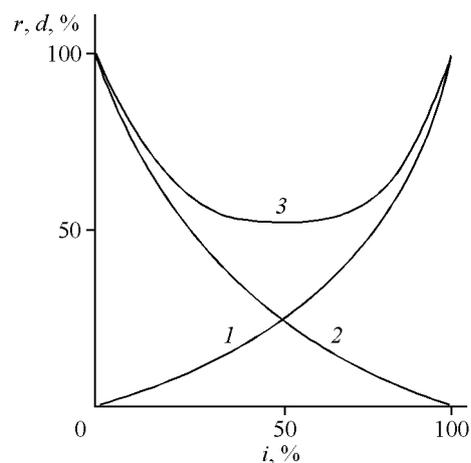
Изменение длин связей (Å) в соединениях MX при изменении КЧ от 6 до 8

M	КЧ		$d(\text{M—Cl})$	$d(\text{M—Br})$	$d(\text{M—I})$	M	КЧ	$d(\text{M—O})$	$d(\text{M—S})$	$d(\text{M—Se})$	$d(\text{M—Te})$
NH ₄	6		3,300	3,437	3,630	Ba	6	2,770	3,193	3,296	3,500
	8		3,350	3,515	3,784		8	2,96	3,37	3,42	3,697
M	КЧ	$d(\text{M—O})$	$d(\text{M—S})$	$d(\text{M—Se})$	$d(\text{M—Te})$	Cd	6	2,348			
Ca	6	2,405	2,842	2,962	3,174		8	2,48			
	8	2,52	3,00	3,13	3,30	La	6		2,926	3,061	3,226
Sr	6	2,580	3,012	3,116	3,330		8		2,988 [34]	3,123 [34]	3,364 [34]
	8	2,65	3,125	3,26	3,475						

$$k_{86} = 1,041 \pm 1,4 \%, \Delta d_{86}, \text{Å} = 0,128 \pm 35,0 \%$$

к ионным значениям (см. рисунок), что собственно и обеспечивает применимость системы ионных радиусов для вычисления длин связей в кристаллических соединениях.

Совершенно иная ситуация наблюдается в ковалентных соединениях, где изменение межатомных расстояний сильно зависит от природы атомов. Например, при переходе молекул щелочных металлов (КЧ = 1) в твердое состояние (КЧ = 8) расстояния увеличиваются на 17 %, тогда как при конденсации молекул Cu, Ag и Au длина связи увеличивается меньше — в среднем на 15 %, хотя КЧ увеличился больше — с 1 до 12 [24].



Изменение атомных радиусов при изменении ионности связи M—X:
1 — радиус X, 2 — радиус M, 3 — длина связи M—X

Т а б л и ц а 7

Длины связей (Å) в полиморфных модификациях соединений типа MX₂

КЧ = 4	SiO ₂	1,607	GeO ₂	1,740				
КЧ = 6		1,774		1,885				
КЧ = 6	TiO ₂	1,959	SnO ₂	2,054	PbO ₂	2,163	RuO ₂	1,970
КЧ = 8		2,109		2,132		2,316		2,106
КЧ = 6	MnF ₂	2,122	CoF ₂	2,040	NiF ₂	2,008	PdF ₂	2,163
КЧ = 8		2,25		2,13		2,10		2,30

$$k_{64} = 1,094 \pm 0,9 \%, k_{86} = 1,058 \pm 1,2 \%, \Delta d_{64}, \text{Å} = 0,156 \pm 7,0 \%; \Delta d_{86}, \text{Å} = 0,120 \pm 22,8 \%$$

Таким образом, уравнения (3)—(5) удобны для интерпретации структуры и свойств индивидуальных веществ, тогда как относительный подход позволяет лучше оценить изменения длин связей при любом изменении координационного числа в кристаллических соединениях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Werner A.* // *Z. Anorg. Chem.* – 1893. – **3**. – S. 267 – 330.
2. *Pfeiffer P.* // *Z. Anorg. Allgem. Chem.* – 1915. – **92**. – S. 376 – 380.
3. *Goldschmidt V.M.* // *Skr. Nor. Vidensk. Akad. Oslo.* – 1927. – **8**. – P. 7 – 23.
4. *Pauling L.* // *J. Amer. Chem. Soc.* – 1929. – **51**. – P. 1010 – 1026.
5. *Pauling L.* // *Ibid.* – 1947. – **69**. – P. 542 – 553.
6. *Zocchi F.* // *Solid State Sciences.* – 2000. – **2**. – P. 383 – 387.
7. *Brown I.D.* *The Chemical Bond in Inorganic Chemistry: The Bond Valence Model.* – Oxford: Oxford Univ. Press, 2002.
8. *Brown I.D., Shannon R.D.* // *Acta Crystallogr.* – 1973. – **A29**. – P. 266 – 282.
9. *Zachariasen W.H.* // *J. Less-Common Met.* – 1978. – **62**. – P. 1 – 7.
10. *Brown I.D., Altermatt D.* // *Acta Crystallogr.* – 1985. – **B41**. – P. 244 – 247.
11. *Zocchi F.* // *Chem. Phys. Lett.* – 2006. – **421**. – P. 277 – 280.
12. *Sidey V.* // *Acta Crystallogr.* – 2009. – **B65**. – P. 99 – 101
13. *Jules J.L., Lombardi J.R.* // *J. Phys. Chem.* – 2003. – **A107**. – P. 1268 – 1273.
14. *Pettifor D.G.* *Bonding and Structures of Molecules and Solids.* – Oxford: Clarendon Press, 1995.
15. *Brese N.E., O'Keeffe M.* // *Acta Crystallogr.* – 1991. – **B47**. – P. 192 – 197.
16. *Trzescowska A., Kruszynski R., Bartczak T.J.* // *Ibid.* – 2004. – **B60**. – P. 174 – 178; – 2006. – **B62**. – P. 745 – 753.
17. *Ефремов В.А.* // *Успехи химии.* – 1990. – **59**. – С. 1085 – 1110.
18. *Urusov V.S.* // *Acta Crystallogr.* – 1995. – **B51**. – P. 641 – 649.
19. *Nag S., Banerjee K., Datta D.* // *New J. Chem.* – 2007. – **31**. – P. 832 – 834
20. *Hull S., Berastegui P.* // *J. Phys. Cond. Matter.* – 1998. – **10**. – P. 7945 – 7956.
21. *Гурвич Л.В., Ежов Ю.С., Осина Е.Л., Шенявская Е.А.* // *Журн. физ. химич.* – 1999. – **73**. – С. 401 – 414.
22. *Belsky A., Hellenbrandt M., Karen V.L., Luksch P.* // *Acta Crystallogr.* – 2002. – **B58**. – P. 364 – 369; *Kaduk J.A.* // *Ibid.* – P. 370 – 379.
23. *Бацанов С.С.* // *Журн. структур. химии.* – 2005. – **46**. – С. 314 – 322.
24. *Batsanov S.S.* *Experimental Foundations of Structural Chemistry.* Moscow: Moscow Univ. Press, 2008.
25. *Reynard L.M., Evans C.J., Gerry M.C.L.* // *J. Mol. Spectroscop.* – 2001. – **205**. – P. 344 – 346.
26. *Yagi T.* // *J. Phys. Chem. Solids.* – 1978. – **39**. – P. 563 – 571.
27. *Hofmeister A.M.* // *Phys. Rev.* – 1997. – **B56**. – P. 5835 – 5855.
28. *Ghandehari K., Luo H., Ruoff A.L. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – **74**. – P. 2264 – 2267.
29. *Bauschlicher C.W., Partridge H.* // *Chem. Phys. Lett.* – 2001. – **342**. – P. 441 – 446.
30. *Bridgeman A.J., Zhiyong J.* // *J. Chem. Soc., Dalton.* – 2000. – P. 211 – 218.
31. *Thompson J.M., Ziurys L.M.* // *Chem. Phys. Lett.* – 2001. – **344**. – P. 75 – 84.
32. *Aiuchi K., Shibuya K.* // *J. Molec. Spectroscop.* – 2000. – **204**. – P. 235 – 247.
33. *Winkel R.J., Davis S.P., Abrams M.C.* // *Appl. Opt.* – 1996. – **35**. – P. 2874 – 2878.
34. *Vaitheeswaran G., Kanchana V., Heathman S. et al.* // *Phys. Rev.* – 2007. – **B75**. – P.184108.
35. *Cooke A.A., Gerry M.C.L.* // *J. Chem. Phys.* – 2004. – **121**. – P. 3486 – 3486.
36. *Gregoryanz E., Sanloup Ch., Somayazulu M. et al.* // *Nature Mater.* – 2004. – **3**. – P. 294 – 297.
37. *Ono S., Kikegawa T., Ohishi Y.* // *Solid State Comm.* – 2005. – **133**. – P. 55 – 59.
38. *Shayesteh A., Yu S., Bernath P.F.* // *Chem. Eur. J.* – 2005. – **11**. – P. 4709 – 4712.
39. *Сенин М.Д., Ахачинский В.В., Маркушин Ю.Е. et al.* // *Неорган. матер.* – 1993. – **29**. – С. 1582 – 1586.
40. *Троянов С.Л.* // *Журн. неорган. химии.* – 2000. – **45**. – С. 1619 – 1624.
41. *Hostettler M., Birkedal H., Schwarzenbach D.* // *Acta Crystallogr.* – 2002. – **B58**. – P. 903 – 913.
42. *Howard C.J., Kennedy B.J., Curfs C.* // *Phys. Rev.* – 2005. – **B72**. – P. 214114.
43. *Kennedy B.J., Howard C.J.* // *Ibid.* – 2004. – **B70**. – P. 144102.
44. *Reffy B., Marsden C.J., Hargittai M.* // *J. Phys. Chem.* – 2003. – **A107**. – P. 1840 – 1849.
45. *Kovacs A., Konings R.J.M.* // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* – 2004. – **33**. – P. 377 – 404.
46. *Pauling L.* *The Nature of the Chemical Bond.* 3rd ed. – N.Y.: Cornell Univ. Press, 1960.