

УДК 539.194 : 621.373

Г. В. МАЙЕР, В. Я. АРТЮХОВ, Т. Н. КОПЫЛОВА, И. В. СОКОЛОВА,  
О. К. БАЗЫЛЬ

### ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ФОТОПРОЦЕССОВ В ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ, СОЗДАНИЕ НОВЫХ АКТИВНЫХ СРЕД И ЛАЗЕРОВ НА КРАСИТЕЛЯХ

Представлен обзор работ, выполненных в области спектроскопии и фотоники многоатомных молекул Сибирского физико-технического института в 1991 г. Обсуждается методика теоретического прогнозирования спектрально-люминесцентных и генерационных свойств молекул органических соединений. Рассмотрены возможности квантово-химических методов при исследовании сверхбыстрых фотофизических и фотохимических процессов в многоатомных молекулах. Представлены результаты в области создания новых активных сред лазеров на красителях с высоким ресурсом работы, приведены технические характеристики мощного узкополосного лазера на красителях «МЖЛ-03».

Фундаментальной проблемой физики молекул является установление закономерностей связи спектрально-люминесцентных, физико-химических и генерационных свойств молекул сложных органических соединений (красителей) с особенностями внутри- и межмолекулярных взаимодействий и возбуждающего электромагнитного поля. От разрешения этой проблемы зависит прогресс в отраслях науки и техники, в которых электронно-возбужденные молекулы выступают в качестве объекта исследований или рабочей среды (спектроскопия и люминесценция многоатомных молекул, фотохимия, квантовая электроника, производство люминофоров, красителей, сцинтилляторов для ядерно-физических исследований, концентраторов солнечной энергии, окрашенных полимеров и т. д.).

Определяющей тенденцией исследований в этой области на настоящий момент является создание методов прогнозирования молекул веществ с заданными оптическими и физико-химическими свойствами. Например, к молекулам красителей, применяемым в качестве активных сред жидкостных лазеров, предъявляется ряд жестких требований, существенно ограничивающих использование известных красителей. Прогресс в этой области связан с целенаправленным синтезом новых лазерно-активных сред.

Такая же ситуация характерна и для других областей применения красителей: при создании сцинтилляторов, светоконцентраторов солнечной энергии, фотостойких красителей и т. д.

Ясно, что методы прогнозирования могут быть созданы только на основе понимания закономерностей связи свойств и строения молекул.

Известно, что в молекулах красителей после поглощения кванта света протекают процессы излучательного распада (люминесценция), а также безызлучательные процессы внутренней (между состояниями

одной мультиплетности) и интеркомбинационной (между состояниями различной мультиплетности, синглетными и триплетными) конверсии, фотохимические реакции, процессы поглощения света в электронно-возбужденных состояниях ( $S \rightarrow S$ - и  $T \rightarrow T$ -поглощение). В этом контексте проблема установления закономерностей связи спектрально-люминесцентных, физико-химических и генерационных свойств органических соединений с их строением трансформируется в проблему установления влияния молекулярного строения на механизмы внутримолекулярных релаксационных (фотофизических и фотохимических) процессов. На следующем этапе производится учет специфических и универсальных межмолекулярных взаимодействий и характеристик возбуждающего электромагнитного поля.

### 1. Разработка метода прогнозирования спектрально-люминесцентных и генерационных свойств молекул органических соединений

Ясно, что любой метод прогнозирования должен в существенной мере опираться на теоретические модели, непосредственно связывающие свойства молекул с параметрами, характеризующими внутримолекулярное строение (сорт атомов, геометрия молекул и т. д.). Традиционно в этом смысле применение методов квантовой химии, позволяющих рассчитать энергии и волновые функции электронных состояний и, что самое главное, оперативно проследить за изменением этих характеристик при изменении строения молекул. В то же время традиционное применение методов квантовой химии в спектроскопии и люминесценции многоатомных молекул долгое время ограничивалось расчетом энергетического спектра молекул и соответствующих интенсивностей электронных переходов (что позволяет дать лишь интерпретацию спектров поглощения), оставляя в стороне оценку констант скоростей релаксационных процессов.

На основе современной теории процессов безызлучательной конверсии [1, 2] нами была разработана [3, 4] методика оценки констант скоростей внутримолекулярных релаксационных процессов и на основе созданной спектрально-ориентированной программы квантово-химического расчета по методу INDO/S [5] разработан комплекс программ, позволяющий рассчитать схему электронно-возбужденных состояний, распределение электронной плотности, заселенности связей и дипольные моменты в основном и электронно-возбужденных состояниях, молекулярный электростатический потенциал (позволяющий оценивать вероятность и места отрыва и присоединения протона в основном и электронно-возбужденных состояниях), матричные элементы оператора спин-орбитального взаимодействия в одно- и многоцентровом приближении (что позволяет оценивать константы скорости процесса синглет-триплетной конверсии между состояниями разной и одинаковой орбитальной природы), спектры поглощения в электронно-возбужденных состояниях (спектры  $S \rightarrow S$ - и  $T \rightarrow T$ -поглощения). Комплекс программ позволяет давать теоретическую интерпретацию спектрально-люминесцентных и генерационных свойств органических соединений и, ввиду оперативности квантово-химических расчетов, решать задачи прогнозирования оптических свойств многоатомных молекул.

Систематическое применение разработанного комплекса программ позволило установить общие принципы формирования схемы электронно-возбужденных состояний органических соединений и разработать спектрально-люминесцентную классификацию  $\pi$ -электронных молекул [6], установить механизмы фотофизических процессов в нескольких классах органических соединений (ароматические углеводороды, по-

лифенилы, гетероциклические цепочечные соединения) [4], а также разработать комплексный подход по исследованию и прогнозу лазерной активности органических соединений в конденсированной и газовой фазах [3—5, 7, 8] и заложить основы построения классификации органических соединений по генерационным свойствам [4].

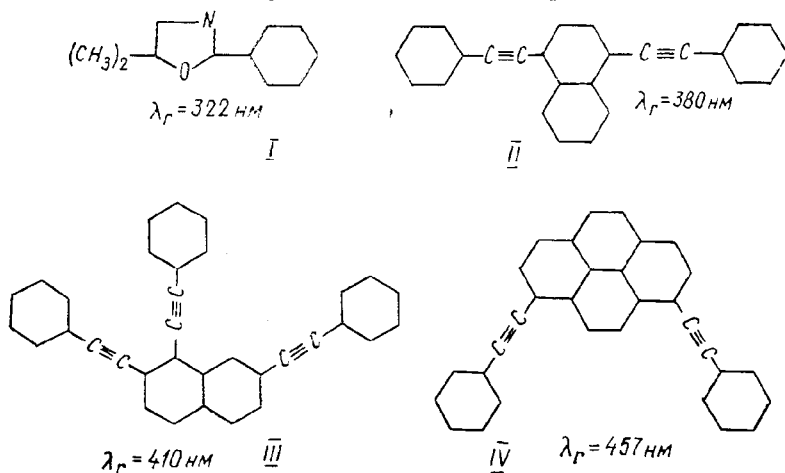


Рис. 1. Новые активные среды УФ и видимого диапазонов спектра

На рис. 1 приведен ряд генерационноспособных молекулярных структур, которые были предсказаны, а затем синтезированы. Следует отметить, что с использованием соединения I получено наиболее коротковолновое из известных на настоящее время лазерное излучение красителей с  $\lambda = 322 \text{ нм}$ .

## 2. Теоретическое исследование быстропротекающих релаксационных процессов в многоатомных молекулах

В настоящее время одной из определяющих тенденций в области фотоники молекул является исследование релаксационных процессов пико- и фемтосекундной длительности. Этому способствует развитие соответствующей экспериментальной техники, а также то обстоятельство, что многие первичные фотофизические и фотохимические процессы, определяющие дальнейшие фотопревращения, осуществляются с очень большими скоростями.

В этой связи представляет интерес рассмотрение возможностей теоретического исследования быстропротекающих релаксационных процессов в многоатомных молекулах, основанного на применении обсужденного выше комплекса квантово-химических программ.

Нами совместно с экспериментаторами Института атомной и молекулярной физики АНБ было проведено исследование [9] внутримолекулярных релаксационных процессов пикосекундной длительности в молекулах феназинов. Экспериментальные исследования на автоматизированном пикосекундном лазерном спектрометре с временным разрешением 6 пс показали, что спектры наведенного (триплет-триплетного) поглощения феназина существенно трансформируются в течение первых 20—30 пс. В начальный момент времени (порядка 10 пс после возбуждения) спектр представляет полосу с максимумом в области 500 нм, в дальнейшем (через 50 пс) интенсивность длинноволновой

полосы уменьшается, но растет интенсивность в коротковолновой области спектра (порядка 420 нм). После 50 пс спектры стабилизируются и становятся совпадающими по форме со спектрами  $T \rightarrow T$ -поглощения, измеренными японскими исследователями [10]. Отсутствие в работе [10] каких-либо трансформаций спектров наведенного поглощения на ранних стадиях обусловлено, вероятней всего, недостаточным временным разрешением экспериментальной установки (25 пс). В то же время в молекуле дибензфеназина описанная выше трансформация спектра наведенного поглощения отсутствует: не происходит изменения максимума спектра  $T \rightarrow T$ -поглощения, который формируется в течение 2 пс.

Проведенные нами квантово-химические расчеты схем электронно-возбужденных состояний и матричных элементов оператора спин-орбитального взаимодействия позволили дать теоретическую интерпретацию эффекта трансформации спектра наведенного поглощения в феназинах.

Установлено, что после оптического возбуждения в  $S_{2\pi\pi}$ -возбужденное состояние осуществляется сверхбыстрый (со скоростью порядка  $10^{12} \text{ с}^{-1}$ ) безызлучательный переход в  $T_{2\pi\pi}$ -состояние и в течение первых 10 пс формируется спектр  $T_2 \rightarrow T_n$ -поглощения, который в течение следующих 50 пс, в результате внутренней  $T_2 \rightarrow T_1$ -конверсии в системе триплетных состояний, трансформируется в спектр  $T_{1\pi\pi} \rightarrow T_m$ -поглощения с соответствующим спектральным сдвигом максимума поглощения. Расчет также показал, что изменение молекулярного строения (переход от феназина к дибензфеназину) приводит к существенному уменьшению величины спин-орбитального взаимодействия  $S_{2\pi\pi}$ - и  $T_{2\pi\pi}$ -состояний (вследствие увеличения при изменении строения пространственной локализации  $S_{2\pi\pi}$ - и  $T_{2\pi\pi}$ -состояний на разных фрагментах молекулы), что приводит к резкому падению (на 2—3 порядка) скорости заселения  $T_{2\pi\pi}$ -состояния. Таким образом, в молекуле дибензфеназина осуществляются быстрые релаксационные процессы по каналу  $S_{2\pi\pi} \rightarrow S_{1\pi\pi} \rightarrow T_{1\pi\pi}$  (в феназине по каналу  $S_{2\pi\pi} \rightarrow T_{2\pi\pi} \rightarrow T_{1\pi\pi}$ ), что и объясняет отсутствие трансформации спектра  $T \rightarrow T$ -поглощения (поскольку и в начальный, и в последующие моменты времени он сформирован поглощением в  $T_1$ -состоянии). Описанное выше, по-видимому, является первым случаем, когда экспериментально зарегистрировано и теоретически доказано поглощение света в высоковозбужденном короткоживущем электронном состоянии. Возможности применения методов квантовой химии при исследовании механизмов сверхбыстрых релаксационных процессов в молекулах органических соединений в различных фазовых состояниях продемонстрированы также и в других наших работах [11, 12].

Следующим классом быстропротекающих процессов, в отличие от рассмотренных выше фотофизических являются первичные фотохимические реакции.

В частности, в последнее время стали появляться экспериментальные работы по исследованию реакций фотодиссоциации с использованием пикосекундной техники [13].

В связи с созданием метода прогнозирования фотостойкости органических соединений возникает необходимость разработки методики применения квантовой химии при установлении механизмов фотодиссоциации и влияния молекулярного строения на этот первичный фотохимический процесс.

В основу предлагаемого подхода положено следующее: на первом этапе проводятся квантово-химические расчеты и определяется природа электронно-возбужденных состояний и степень локализации энергии электронного возбуждения на отдельных связях молекулы.

В качестве характеристики, отвечающей за прочность связи, выбраны индексы заселенности связи между атомами  $A$  и  $B$

$$P_{AB} = \sum_i \sum_{\mu, \nu} c_{i\mu}^{(A)} c_{i\nu}^{(B)} S_{\mu\nu}, \quad (1)$$

где  $c_{i\mu}^{(A)}$ ,  $c_{i\nu}^{(B)}$  — коэффициенты разложения  $i$ -й молекулярной орбитали (МО) по  $\mu$ -й и  $\nu$ -й атомным орбиталам (АО);  $S_{\mu\nu}$  — интеграл перекрывания АО (вычисляется деортогонализацией атомного базиса по методу Левдина);  $N$  — число валентных электронов атомов.

Уменьшение  $P_{AB}$  при соответствующем электронном переходе указывает на ослабление связи  $A-B$ .

Анализ природы электронно-возбужденных состояний, степени локализации энергии электронного возбуждения на отдельных связях и вычисление индексов  $P_{AB}$  позволяет установить электронно-возбужденные состояния, в которых происходит ослабление отдельных молекулярных связей, т. е. потенциально возможен разрыв этих связей.

Нам рассмотрена реакция фотодиссоциации бисульфидов ( $R_1-Ph-S-S-Ph-R_2$ ), для которой был экспериментально установлен разрыв  $S-S$ -связи со скоростью порядка  $10^{12} \text{ c}^{-1}$  при оптическом возбуждении [13]. Квантово-химические расчеты показали, что наибольшее уменьшение величины  $P_{AB}$  при электронном возбуждении (что связывается с ослаблением прочности связи  $A-B$ ) характерно для состояний  $\pi\sigma$ -типа, локализованных преимущественно на связях  $C-S$  и  $S-S$  (т. е.  $\pi\sigma_{CS}$ - и  $\pi\sigma_{SS}$ -состояний):  $\Delta P_{CS} = 0,5$ ;  $\Delta P_{SS} = 0,7$ .

На втором этапе проводились квантово-химические расчеты схем электронно-возбужденных состояний с варьированием длин связей  $C-S$  и  $S-S$ , что позволило построить соответствующие потенциальные кривые электронно-возбужденных состояний.

При этом потенциальные кривые основного состояния моделировались потенциалом Морзе [14]

$$E(R) = D \{e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}\}, \quad x = \frac{R - R_0}{R_0}, \quad \alpha = 2\pi c \omega R_0 \sqrt{\frac{M}{2D}}, \quad (2)$$

где  $D$  — энергия диссоциации;  $R_0$  — равновесная длина связи;  $\omega$ ,  $M$  — частота колебаний и приведенная масса осциллятора.

Использовались следующие экспериментальные значения  $D$  и  $\omega$  и рассчитанные значения  $\alpha$ : для связи  $S-S$   $\omega = 500 \text{ см}^{-1}$  [15],  $R_0 = 2,04 \text{ \AA}$  [16],  $D = 63,1 \text{ ккал/моль}$  [17],  $\alpha = 6,2$ ; для связи  $C-S$   $\omega = 700 \text{ см}^{-1}$  [15],  $R_0 = 1,81 \text{ \AA}$  [13],  $D = 84,5 \text{ ккал/моль}$  [18],  $\alpha = 6,34$ .

Соответствующие потенциальные кривые основного и некоторых электронно-возбужденных состояний молекулы дифенилдисульфида приведены на рис. 2. На рис. 2, а в качестве координаты реакции использовалось изменение длины  $S-S$ -связи (основанием для выбора именно этой координаты послужило значительное уменьшение заселенности связи  $S-S$  в  $\pi\sigma_{SS}$ -состояниях). Из рис. 2, а следует, что кривая, описывающая зависимость энергии синглетных и триплетных  $\pi\sigma_{SS}$ -состояний, является отталкивательной кривой. Поскольку наряду с  $S-S$ -связью при электронном возбуждении происходит существенное уменьшение заселенности  $C-S$ -связи, были получены аналогичные зависимости при варьировании длины  $C-S$ -связи (рис. 2, б). Видно, что все кривые рис. 2, б имеют минимум и не являются кривыми распада (аналогично поведение соответствующих  $\pi\sigma$ -,  $\pi\sigma_{SS}$ - и  $\pi\sigma_{CS}$ -триплетных состояний).

Расчеты распределений электронной плотности показывают, что по мере роста длины S—S-связи в  $\pi\sigma_{SS}$ -состоянии происходит значительное увеличение электронного заряда на атомах S, т. е. при удлинении связи S—S отчетливо прослеживается тенденция образования радикалов  $\dot{S}-R$ ; при варьировании длины C—S-связи в  $\pi\sigma_{CS}$ -состояниях изменения распределения электронной плотности значительно меньше (то же относится и к  $\pi\pi$ -состояниям).

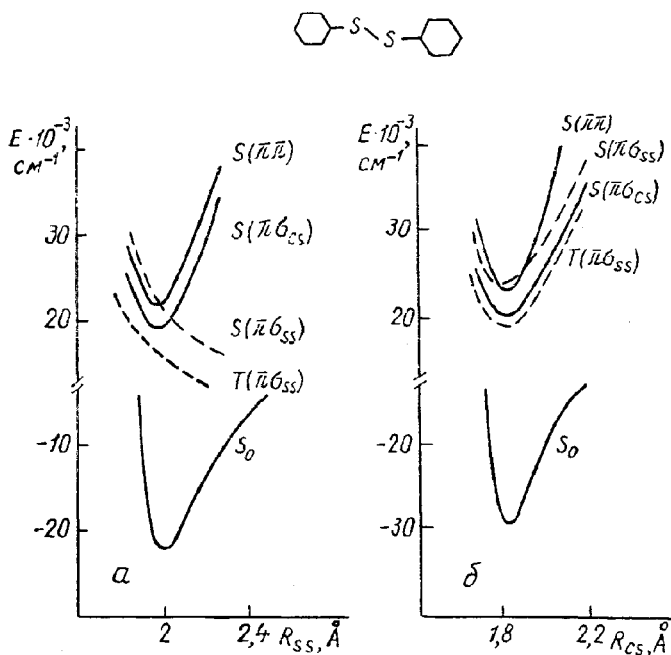


Рис. 2. Потенциальные кривые электронно-возбужденных состояний молекулы дифенилдисульфида: а — варьирование длины S—S-связи; б — варьирование длины C—S-связи

Таким образом, анализ всей вышеперечисленной совокупности расчетных данных позволяет сделать вывод о том, что диссоциация молекулы дифенилдисульфида происходит в  $\pi\sigma_{SS}$ -состоянии по механизму преддиссоциации.

Однако вопрос о мультиплетности реакционноспособного состояния требует дальнейшего исследования. Авторы [13] делают вывод о том, что диссоциация идет в синглетном состоянии; в пользу этого утверждения свидетельствует факт высокой эффективности процесса геминальной рекомбинации. В то же время нельзя исключить фотодиссоциации в  $T_{\pi\sigma_{SS}}$ -состоянии по следующей схеме:  $S_0 \rightarrow S_{\pi\pi} \rightarrow S_{\pi\sigma_{CS}} \rightarrow T_{\pi\sigma_{SS}} \rightarrow$  фрагментация. В пользу такого механизма свидетельствует большая величина спин-орбитального взаимодействия  $S_{1\pi\sigma_{CS}}$  и  $T_{\pi\sigma_{SS}}$ -состояний (около  $30 \text{ см}^{-1}$ ), что означает эффективный процесс интеркомбинационной конверсии (со скоростью порядка  $10^{12} \text{ с}^{-1}$ ), способный лимитировать скорость фотохимической реакции.

Ход потенциальных кривых на рис. 2 объясняет качественно также факт зависимости выхода фотораспада от частоты возбуждающего кванта вследствие уменьшения барьера реакции по мере возбуждения

более высоких электронных состояний, поскольку отталкивательная кривая пересекает вышележащие состояния в точках, соответствующих меньшему значению активационного барьера.

Отметим, что аналогичным образом были проведены квантово-химические исследования реакций фотодиссоциации молекул *l*-аминофенилтиола и фенола. Полученные теоретические результаты (значительное уменьшение заселенностей связей S—H и O—H при электронном возбуждении, локализация возбуждения на этих связях и отталкивательный характер кривых, описывающих зависимость энергий  $\rho\sigma_{\text{H}}$ - и  $\rho\sigma_{\text{OH}}$ -состояний от длины S—H- и O—H-связей) согласуются с экспериментальными данными о механизмах фотодиссоциации этих молекул.

Анализ результатов такого подхода позволяет определить реакционную способность многоатомных молекул в различных электронно-возбужденных состояниях, установить механизмы фотореакции, сформулировать требования к источнику возбуждения для осуществления или предотвращения реакции фотодиссоциации.

### 3. Разработка и создание новых фотостойких активных сред лазеров на красителях с накачкой излучением эксимерных лазеров

Использование мощного УФ-излучения эксимерных лазеров при возбуждении красителей вызывает процессы фотохимических превращений и, следовательно, обуславливает падение энергетических характеристик перестраиваемых лазеров на красителях (главным образом КПД и ресурса работы). Так, по имеющимся отечественным и зарубежным данным ресурс работы активных сред сине-зеленого диапазона спектра не превышает 1,5 МДж/л, тогда как, например, ресурс активных сред, требующихся для экологических ДПР-лидаров по обнаружению NO<sub>2</sub>, должен составлять не менее 5÷10 МДж/л. Прогресс в этом направлении в значительной мере тормозится отсутствием принципов создания фотостойких активных сред. В этой связи одной из актуальных проблем в области создания лазеров на красителях является установление закономерностей связи фотохимических свойств со строением

Характеристики генерации этанольных растворов некоторых лазерно-активных сред сине-зеленого диапазона спектра при возбуждении излучением XeCl-лазера

№ п/п	Соединение (концентрация, моль/л)	Добавка, моль/л	$\lambda_{\text{ген}}$ , нм	КПД, %	Ре- сурс, Дж/ /см <sup>3</sup>
1	Кумарин 102 (8·10 <sup>-3</sup> )	—	475	32	300
2	Кумарин 102 (8·10 <sup>-3</sup> )	DABCO (5·10 <sup>-2</sup> )	476	33	1700
3	АСЗФ (8·10 <sup>-3</sup> )	—	497	29	800
4	АСЗФ (8·10 <sup>-3</sup> )	DABCO (5·10 <sup>-2</sup> )	497	31	3000
5	Т 698 (8·10 <sup>-3</sup> )	—	497	32	850
6	Т 698 (8·10 <sup>-3</sup> )	DABCO (5·10 <sup>-2</sup> )	497	31	3200
7	МК 4871 (8·10 <sup>-3</sup> )	—	480	30	860
8	МК 4871 (8·10 <sup>-3</sup> )	DABCO (5·10 <sup>-2</sup> )	480	30	8600

молекул, исследование механизмов первичных фотохимических процессов и формулирование принципов создания фотостойких при мощном лазерном возбуждении органических соединений.

Для красителей сине-зеленого диапазона спектра (в частности, кумаринов) проведено систематическое исследование механизмов фото-

процессов при накачке излучением ХеСl\*-лазера. Установлено, что при таком возбуждении возможно протекание нескольких фотохимических реакций: окисление метильных групп, дезалкилирование диэтиламиногрупп и других, приводящих к появлению не менее четырех фотопродуктов, поглощающих как в области накачки, так и в области генерации красителей [19].

Установление механизмов первичных фотопроцессов и образования фотопродуктов позволило предсказать ряд молекулярных структур с увеличенной фотостабильностью (таблица), которые были синтезированы; эксперимент подтвердил теоретический прогноз увеличения фотостабильности [20, 21].

Проведены также исследования влияния межмолекулярных взаимодействий и добавок диазобизциклооктана (ДАВСО) на фотостабильность (ресурс работы) большого круга активных сред из класса кумаринов (синтезированных под руководством Ильченко А. Я., Резниченко А. В., Кирпиченка М. А.) и найдены эффективные фотостабильные среды (например, ресурс соединения МК 4871 (образец 8 в таблице) составляет 8,6 МДж/л).

#### 4. Разработка мощного узкополосного лазера на красителях «МЖЛ-03»

Лазер выполнен в виде отдельных модулей: излучателя и блока прокачки активных сред. В качестве источника накачки может быть использован эксимерный лазер типа «Лида-101» с энергией импульса 1 Дж (разработка ИСЭ СО РАН) либо более мощные эксимерные лазеры. Блок излучателя содержит задающий генератор и два усилителя (кюветы-призмы полного внутреннего отражения, позволяющие преобразовывать мощное излучение эксимерных лазеров). Второй модуль предназначен для прокачки раствора красителя через кюветы и состоит из насоса с магнитным приводом, системы регенерации, резервуара и блока питания. Проведенные исследования показали, что с использованием ряда органических и неорганических сорбентов возможно создание высокоэффективных систем регенерации лазерно-активных сред на основе органических соединений, позволяющих увеличить ресурс работы лазеров на 1—2 порядка.

Основные технические характеристики «МЖЛ-03»:

спектральный диапазон, нм	— 330—800;
ширина линии излучения, нм	— 0,01—15;
энергия импульса излучения, мДж	— 150;
длительность импульса, нс	— 50—100;
расходимость выходного излучения, мрад	— 1÷2;
ресурс работы, имп.	— 10 <sup>7</sup> —10 <sup>8</sup> .

Разработанный лазер «МЖЛ-03» может применяться в качестве излучателя экологического ДПР-лидара с большой глубиной зондирования для определения, в частности, концентраций NO<sub>2</sub>, а также при решении других научно-технических задач.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Freed K., Jortner J.//J. Chem. Phys. — 1969. — V. 50. — P. 2916—2931.
2. Плотников В. Г. Дис. докт. физ.-мат. наук. — Обнинск, 1980. — 369 с.
3. Майер Г. В., Данилова В. И. Квантовая химия, строение и фотоника молекул. — Томск: Изд-во ТГУ, 1984. — 218 с.
4. Майер Г. В. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Томск, 1987. — 128 с.
5. Артюхов В. Я. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Томск, 1987. — 128 с.
6. Майер Г. В.//Изв. АН СССР. Сер. физ. — 1990. — Т. 54. — № 3. — С. 413—417.



7. Копылова Т. Н. Дис. ...канд. физ.-мат. наук. — Томск, 1981. — 178 с.
8. Базыль О. К. Дис. ...канд. физ.-мат. наук. — Томск, 1983. — 196 с.
9. Добриневский С. Ф., Карыпов А. В., Майер Г. В. и др.//ЖПС. — 1991. — Т. 55. — № 1. — С. 89—94.
10. Higata Y., Tanaka I.//Chem. Phys. Lett. — 1976. — V. 43. — № 3. — P. 568—570.
11. Майер Г. В., Данилова В. И., Галеева А. И.//Сверхбыстрые процессы в спектроскопии. — Минск, 1984. — С. 344—347.
12. Майер Г. В., Галеева А. И.//ЖПС. — 1986. — Т. 45. — № 2. — С. 270—274.
13. Борисевич Н. А. и др.//Изв. АН СССР. Сер. хим. — 1990. — № 3. — С. 540—543.
14. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1974. — С. 191.
15. Беллами Л. Инфракрасные спектры молекул. — М.: ИЛ, 1957. — С. 406.
16. Китайгородский А. И., Зоркий П. М., Бельский В. К. Строение органических веществ. — М.: Наука, 1980. — С. 413.
17. Эггинс Б. Химическая структура и реакционная способность твердых веществ. — М.: Химия, 1976. — С. 112.
18. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону/Под ред. Кондратьева В. Н. — М.: Наука, 1974. — С. 92.
19. Самсонова Л. Г., Фофонова Р. М., Кузнецова Р. Т. и др.//Квант. электроника (Киев). — 1991. — Т. 41. — С. 146—149.
20. Васильева Н. Ю., Соколова И. В., Дегтяренко К. М., Кропачев А. В.//Изв. вузов. Физика. — 1990. — № 7. — С. 123—125.
21. Васильева Н. Ю., Соколова И. В., Васильев Н. Ф.//Изв. вузов. Физика. — 1991. — № 10. — С. 31—43.

Сибирский физико-технический институт им. В. Д. Кузнецова при Томском госуниверситете

Поступила в редакцию 22.05.92.