

ВЛИЯНИЕ ВЕКТОРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ ПРИ ВРАЩАТЕЛЬНО-ПОСТУПАТЕЛЬНОМ ОБМЕНЕ НА ОПТИЧЕСКУЮ АНИЗОТРОПИЮ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ГАЗАХ

А. П. Блохин*, В. А. Толкачёв

УДК 535.37+535.338.42

Институт физики НАН Беларуси,
220072, Минск, просп. Независимости, 68-2, Беларусь; e-mail: lsfm@imaph.bas-net.by

(Поступила 10 августа 2018)

Разработана модель образования вращательно-неравновесных ансамблей молекулярных комплексов в газовой фазе с учетом векторной динамики поступательно-вращательного обмена и его проявления в анизотропии поглощения и испускания света. На основе предложенной модели рассчитана оптическая анизотропия ансамбля молекулярных комплексов в зависимости от изменения парциальных угловых моментов и соотношения моментов инерции исходных фрагментов и образующихся комплексов. Показано, что рост величины дополнительного углового момента за счет индуцированных при вращательно-поступательном обмене моментов может вызывать как уменьшение, так и увеличение анизотропии в зависимости от формы эллипсоидов инерции комплексов.

Ключевые слова: молекулярные комплексы, вращательно-поступательный обмен, анизотропия поглощения и испускания света, динамика молекулярного вращения.

A model of the formation of rotationally nonequilibrium ensembles of molecular complexes in the gas phase is developed taking into account the vector dynamics of translational-rotational exchange and its manifestation in the anisotropy of light absorption and emission. On the basis of the proposed model, the optical anisotropy of the ensemble of molecular complexes is calculated depending on the magnitude of the change in partial angular moments and the ratio of the moments of inertia of the initial fragments and the resulting complexes. It is shown that the increase in the value of the additional angular momentum, due to the moments induced during the rotational-translational exchange, can cause both a decrease in anisotropy and its increase depending on the shape of the ellipsoids of inertia of the complexes.

Keywords: molecular complexes, rotational-translational exchange, anisotropy of light absorption and emission, dynamics of molecular rotation.

Введение. Для выяснения механизмов фотораспада и образования молекулярных комплексов эффективно используются методы поляризационной спектроскопии в газовой фазе [1—11]. При оп-ределении стереодинамики процессов обычно учитывается неравновесность в распределении по вращательным степеням свободы, поскольку из-за векторных корреляций между угловыми моментами при вращательно-поступательном обмене распределение возникающих и распадающихся комплексов может стать вращательно-неравновесным, несмотря на то что распределение исходных молекул равновесно. Рассматриваются два источника неравновесности — дополнительный угловой момент за счет энергии образования или разрыва молекулярной связи между фрагментами, а также изменение моментов инерции. Для фотодиссоциации малых молекул превалирует первый источник [3, 7]. В то же время поляризационные исследования фоторазложения многоатомных молекул в газах показали доминирование влияния свободного вращения исходных молекул и зависимости анизотропии от соотношения моментов инерции молекулярного комплекса и его фрагментов [2, 6]. В реальности не-

EFFECT OF VECTOR CORRELATIONS IN ROTATIONAL-TRANSLATIONAL EXCHANGE ON THE OPTICAL ANISOTROPY OF MOLECULAR COMPLEXES IN THE GAS

A. P. Blokhin*, V. A. Tolkachev (B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, 68-2 Nezavisimosti Prosp., Minsk, 220072, Belarus; e-mail: lsfm@imaph.bas-net.by)

обходимо учитывать обе причины возникновения вращательной неравновесности. Как показано далее для процесса комплексообразования, обе причины взаимосвязаны.

Процесс образования молекулярных комплексов, когда к исходной молекуле присоединяется молекулярный фрагмент, можно представить как полустолкновение или как полностью неупругий удар. При этом тензор момента инерции \mathbf{I}_p и угловой момент \mathbf{J}_p исходной молекулы изменяются и становятся равными \mathbf{I} и \mathbf{J} . Процессы перераспределения вращательной и поступательной энергий могут занимать определенный промежуток времени. Важно, что поляризационные характеристики светового излучения, взаимодействующего с молекулярным ансамблем, определяются лишь векторными корреляциями угловых моментов и ориентационной релаксацией образующихся молекулярных комплексов. Моментом образования можно считать время начала движения с мгновенной угловой скоростью, общей для всего молекулярного образования. Такое же предположение обычно используется для обоснования векторных корреляций при фотодиссоциации молекул в импульсной модели [3, 6]. Поэтому между угловыми моментами и тензорами инерции должно выполняться соотношение

$$\omega = \mathbf{J}_p / \mathbf{I}_p = \mathbf{J} / \mathbf{I}.$$

В результате из-за возникающих моментов сил при столкновении молекулярный комплекс приобретает дополнительный угловой момент. Если считать массу фрагмента сосредоточенной в точке на расстоянии \mathbf{R}_f от центра масс комплекса, то дополнительный момент фактически равен векторной сумме орбитальных моментов исходной молекулы и фрагмента

$$\mathbf{L} = M_p[\mathbf{R}_p \times \mathbf{V}_p] + M_f[\mathbf{R}_f \times \mathbf{V}_f],$$

где M_p — масса; \mathbf{R}_p — вектор, соединяющий центры масс исходной молекулы и комплекса; \mathbf{V}_p — вектор относительной линейной скорости молекулы; M_f , \mathbf{R}_f , \mathbf{V}_f — соответствующие параметры фрагмента. Поскольку в динамику вращения комплекса вносят вклад только \mathbf{J}_p и \mathbf{L} , из закона сохранения полного углового момента следует соотношение [3, 4, 6, 7]

$$\mathbf{J} = \mathbf{G}\mathbf{J}_p + \mathbf{L}, \quad (1)$$

$$\mathbf{G} = \mathbf{I}\mathbf{R}(\Xi) / \mathbf{I}_p,$$

где $\mathbf{R}(\Xi)$ — матрица поворота системы главных осей инерции, если происходит такое изменение. В системе главных осей инерции (x', y', z') исходной молекулы выражение (1) имеет вид

$$J_k = \sum_{n=x_p, y_p, z_p} G_{kn} J_{p,n} + L_k. \quad (2)$$

Если фрагмент присоединяется вдоль одной из главных осей инерции исходной молекулы, то системы осей молекулы (x', y', z') и комплекса (x, y, z) совпадают и матрица \mathbf{G} диагонализуется

$$J_k = (I_k / I_{p,k}) J_{p,k} + L_k. \quad (3)$$

В этом случае вклад вращательного движения исходной молекулы обратно пропорционален отношению старых и новых моментов ее инерции. Тогда общую задачу можно рассмотреть, предполагая присоединение фрагмента вдоль осей меньшего, большего или среднего моментов инерции или изменяя параметры эллипсоида инерции. Если вращательная энергия исходной молекулы

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_{k=x,y,z} \frac{J_{p,k}^2}{I_{p,k}}, \quad (4)$$

то энергия образующегося комплекса из-за связи угловых моментов (3)

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=x,y,z} \frac{I_{p,k} (J_k - L_k)^2}{I_k^2}. \quad (5)$$

Если вращательное распределение исходных молекул равновесное

$$\rho_p(J_{p,k}) = (Z_{p,\text{rot}})^{-1} \exp \left\{ - \sum_{k=x,y,z} (J_{p,k})^2 / 2kT I_{p,k} \right\} \quad (6)$$

со статистической суммой $Z_{p,\text{rot}} = (2\pi kT)^{3/2} (I_{p,x} I_{p,y} I_{p,z})^{1/2}$, то после образования комплексов оно становится неравновесным:

$$\rho(J_k) = (Z_{\text{rot}})^{-1} \exp \left\{ - \sum_{k=x,y,z} I_{p,k} (J_k - L_k)^2 / 2kT I_k^2 \right\}. \quad (7)$$

Для того чтобы найти статистическую сумму для распределения (7), в качестве вращательного фазового пространства можно выбрать смешанное представление $\Gamma(\Omega, J_k)$, где Ω — углы Эйлера, J_k — компоненты угловых моментов:

$$Z_{\text{rot}} = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^{\pi} \sin\beta d\beta \prod_{k=x,y,z} \int_{-\infty}^{\infty} dJ_k \exp\left\{-\sum_k I_{p,k} (J_k - L_k)^2 / 2kT I_k^2\right\} = (2\pi kT)^{3/2} \prod_{k=x,y,z} (I_{p,k}^{1/2} / I_k^2). \quad (8)$$

Если к исходной молекуле с осевой симметрией эллипсоида инерции вдоль оси z присоединяется дополнительный фрагмент, то $I_x = I_y = I_{\perp}$, $I_{p,x} = I_{p,y} = I_{p,\perp}$, $I_z = I_{p,z} = I_{\parallel}$. Для сохранения вектора полного углового момента в соответствии с (3) должны выполняться соотношения

$$J_x = (I_{\perp}/I_{p,\perp})J_{p,x} + L_x, \quad J_y = (I_{\perp}/I_{p,\perp})J_{p,y} + L_y, \quad J_z = J_{p,z}. \quad (9)$$

Компонента дополнительного момента вдоль оси z равна нулю, а передаваемая энергия поступательного движения в этом направлении превращается в колебательную и поступательную энергию молекулярного комплекса. Моменты сил и компоненты дополнительного углового момента отличны от нуля лишь в перпендикулярных оси z направлениях. Поэтому выберем новые переменные, сделав преобразования

$$L_x = L_{\perp} \sin l, \quad L_y = L_{\perp} \cos l, \quad L_z = 0, \quad (10)$$

$$J_x = J \sin \beta_z \sin \varphi_z, \quad J_y = J \sin \beta_z \cos \varphi_z, \quad J_z = J \cos \beta_z, \quad J = |\mathbf{J}|, \quad (11)$$

где L_{\perp} — дополнительный угловой момент в плоскости xy системы главных осей инерции; l — азимутальный угол его ориентации; β_z и φ_z — полярный и азимутальный углы оси z относительно вектора полного углового момента. Подставив (9) в (5), можно получить выражение для вращательной энергии молекулярного комплекса в новых переменных:

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{I_{p,\parallel} J^2 \cos^2 \beta_z}{I_{\parallel}^2} + \frac{I_{p,\perp} J^2 \sin^2 \beta_z}{I_{\perp}^2} + \frac{I'_{\perp} L_{\perp}^2}{I_{\perp}^2} - \frac{2I'_{\perp} J L_{\perp} \cos(\varphi_z - l)}{I_{\perp}^2} \right). \quad (12)$$

Как и следовало ожидать, из-за осевой симметрии энергия зависит только от косинуса разности углов, т. е. не зависит от их знаков. Таким образом, неравновесное вращательное распределение в данном случае

$$\rho(J, \beta_z, \varphi_z, L, l) = Z_{\text{rot}}^{-1} \exp \left\{ -\frac{1}{2kT} \left(\frac{I_{p,\parallel} J^2 \cos^2 \beta_z}{I_{\parallel}^2} + \frac{I_{p,\perp} J^2 \sin^2 \beta_z}{I_{\perp}^2} + \frac{I_{p,\perp} L_{\perp}^2}{I_{\perp}^2} - \frac{2I_{p,\perp} J L_{\perp} \cos(\varphi_z - l)}{I_{\perp}^2} \right) \right\}. \quad (13)$$

Как известно, вращательная релаксация анизотропии люминесценции (или величина, аналогичная для дихроизма поглощения) [6]

$$r(t) = \frac{2}{5} \sum_{k,l=-2}^2 D_{0k}^2(-\Omega_{\mu_1}) C_{kl}^2(t) D_{l0}^2(\Omega_{\mu_2}) \quad (14)$$

определяется компонентами ориентационной корреляционной функции второго ранга

$$C_{kl}^2(t) = \left\langle D_{kl}^2(\Delta\Omega(t)) \right\rangle, \quad (15)$$

где Ω_{μ_i} — углы ориентации дипольных моментов переходов μ_i с поглощением $i = 1$ и испусканием (или поглощением второго кванта) $i = 2$ в молекуле (в данном случае в системе главных осей инерции молекулярного комплекса); $\Delta\Omega(t)$ — углы поворота молекулярной системы координат. Для ансамбля свободных симметричных волчков с равновесным вращательным распределением компоненты ориентационной корреляционной функции задаются следующим выражением [6, 12]:

$$C_{kl}^2(t) = \left\langle \sum_{n=-2}^2 D_{kn}^2(-\varphi_z, -\beta_z, 0) D_{nl}^2(\omega_J t, \beta_z, \varphi_z + \omega_z t) \right\rangle_{\Gamma_z}, \quad (16)$$

где $\omega_J = J/I_{\perp}$ и $\omega_z = J \cos \beta_z (I_{\perp} - I_{\parallel}) / I_{\perp} I_{\parallel}$ — частоты вращения вокруг углового момента и оси z , усреднение выполняется по переменным $\Gamma_z = J, J_z, \varphi_z$. Фактически усредняемая матрица определяет поворот молекулы за время t в системе координат углового момента. После усреднения по φ_z получаем

$$C_k^2(t) = C_{00}^2(\infty) + \left\langle \sum_{n=1,2} (d_{kn}^2(\beta_z))^2 \cos(k\omega_z t + n\omega_J t) \right\rangle_{J, J_z}. \quad (17)$$

Поскольку средние времена переориентации свободных молекул — порядка нескольких пикосекунд, в обычном квазистационарном поляризационном эксперименте в газах анизотропия

$$r(\infty) = (2/5)C_{00}^2(\infty)d_{00}^2(\Theta_1)d_{00}^2(\Theta_2) \quad (18)$$

определяется только сохраняющимся во времени асимптотическим значением ориентационной корреляционной функции

$$C_{00}^2(\infty) = \langle (d_{00}^2(\beta_z))^2 \rangle_{J,J_z}, \quad (19)$$

где $d_{00}^2(\beta_z) = (3\cos^2\beta_z - 1)/4$.

Анизотропия в неравновесных ансамблях молекулярных комплексов определяется выражением (18) с ориентационной корреляционной функцией, усредненной по распределению (13):

$$C_{00}^2(\infty) = \langle (d_{00}^2(\beta_z))^2 \rangle_{J,J_z,L_\perp,l}.$$

При усреднении корреляционной функции по неравновесному распределению добавляются переменные L_\perp, l . Появляющийся дополнительный угловой момент L_\perp можно считать варьируемым параметром, а по азимутальному углу l можно провести интегрирование. Поскольку зависимость от l имеется лишь в экспоненте (13), усреднение выполняется независимо и можно найти

$$\langle \dots \rangle_{\Gamma_z,l} = \langle \dots \rangle_{\Gamma_z} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dl \exp\left\{ \frac{I_{p,\perp} L_\perp \cos(\varphi_z - l)}{I_\perp^2 kT} \right\} = \langle \dots \rangle_{\Gamma_z} I_0\left(\frac{I_{p,\perp} J L_\perp}{I_\perp^2 kT} \right), \quad (20)$$

где $I_0(x)$ — модифицированная функция Бесселя. В дальнейшем удобно перейти к редуцированным величинам

$$J^* = J / \sqrt{I_\perp^* kT}, \quad \delta \equiv L_\perp^* = L_\perp / \sqrt{I_\perp^* kT}, \quad I_\perp^* = I_\perp^2 / I_{p,\perp}, \quad I_\parallel^* = I_\parallel^2 / I_{p,\parallel}.$$

Здесь J^*, L_\perp^* — безразмерные величины, I_\perp^*, I_\parallel^* имеют размерность моментов инерции. После усреднения в (20) получаем выражение для асимптотического значения корреляционной функции

$$C_{00}^2(\infty) = \left(\frac{2(1+b_c)}{\pi} \right)^{1/2} \int_0^1 du \int_0^\infty J^{*2} dJ^* I_0(J^* L_\perp^* (1-u^2)) \exp\left\{ -\frac{1}{2} [J^{*2} (1+(b_c^2-1)u^2) - L_\perp^{*2}] \right\} (d_{00}^2(\beta_z))^2, \quad (21)$$

где $b_c = (1-\chi)/(1-\chi_c)^2$, $u = \cos\beta_z$, $\chi = 1 - I_\parallel/I_\perp'$, $\chi_c = 1 - I_\parallel/I_\perp$. Параметры χ, χ_c , изменяясь от -1 ($I_\parallel = 2I_\perp$) для плоских молекул до 1 ($I_\parallel = 0$), определяют весь диапазон изменения эллипсоидов моментов инерции молекул от сплюснутых до вытянутых. Если считать, что присоединение по оси z фрагмента приводит только к увеличению вытянутости эллипсоида инерции молекулярного комплекса вдоль оси z , то χ_c может изменяться лишь от χ до 1 .

Для того чтобы выяснить влияние дополнительного момента $\delta \equiv L_\perp^*$ на анизотропию, представим усреднение в (21) в виде суммы усредняемых степеней $u = \cos\beta_z$ косинусов углов оси z молекулярного комплекса на сохраняющийся в пространстве вектор полного углового момента:

$$C_{00}^2(\infty) = (1/4)[\langle u^0 \rangle - 6\langle u^2 \rangle + 9\langle u^4 \rangle],$$

$$\langle u^n \rangle = \left(\frac{2(1+b_c)}{\pi} \right)^{1/2} \int_0^1 du \int_0^\infty J^{*2} dJ^* I_0(J^* L_\perp^* (1-u^2)) \exp\left\{ -(1/2)[J^{*2} (1+(b_c^2-1)u^2) - L_\perp^{*2}] \right\} \frac{u^n}{4}. \quad (22)$$

Эффект абсолютно неупругих столкновений, как и обычных столкновений, направленных перпендикулярно какой-либо оси молекулы, должен приводить к хаотизации этой оси в пространстве по конусу относительно первоначального. Чем больше прикладываемые моменты сил и передаваемые угловые моменты, тем сильнее эффект и больше угол раствора конуса. На рис. 1 приведены рассчитанные средние косинусы углов оси молекулы $\langle u^n \rangle$ на сохраняющийся в пространстве вектор полного углового момента в зависимости от δ для $n = 0, 2, 4$. Как и следовало ожидать, с увеличением δ эти средние величины плавно уменьшаются при любых изменениях моментов инерции для сплюснутых (кривые 1, 2) и вытянутых (кривые 3, 4) эллипсоидов инерции молекулярных комплексов. Для очень вытянутых молекулярных комплексов угловой момент все более близок перпендикулярным оси z направлениям при любой вращательной энергии и дополнительный угловой момент вызывает малые возмущения динамики вращения.

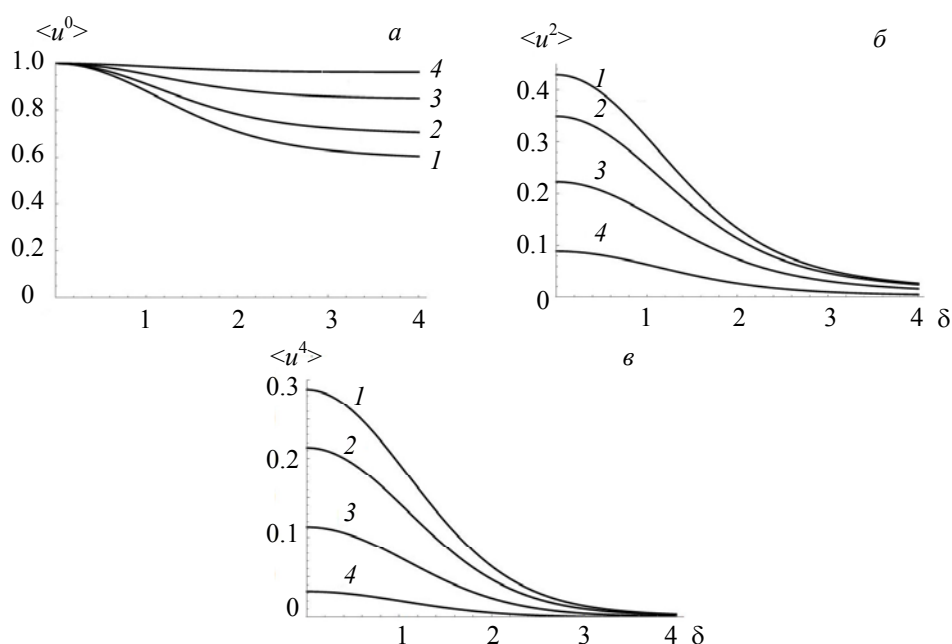


Рис. 1. Зависимость функций $\langle u^n \rangle$ при $n = 0$ (а), 2 (б, в) от дополнительного углового момента δ для $\chi = -1$ и $\chi_c = -1$ (1), -0.5 (2), 0.1 (3), 0.6 (4)

Анизотропия как более сложная усредняемая функциональная зависимость от углов изменяется, как представлено на рис. 2. Кривые 1 демонстрируют “чистый” эффект дополнительного момента, когда соотношение моментов инерции не изменяется и симметрия эллипсоида инерции сохраняется. Кривые 2–4 соответствуют ситуациям, когда эллипсоид инерции молекул становится все более вытянутым вдоль оси z . Любопытно, что в некоторых случаях анизотропия может увеличиваться с ростом момента сил толчка, испытываемого при неупругом столкновении. Для сплюснутых эллипсоидов инерции исходных молекул (рис. 2, а–в) анизотропия сначала падает, а затем повышается (кривые 1, 2). Если эллипсоид молекулярного комплекса из сплюснутого трансформируется в вытянутый, то рост δ увеличивает только анизотропию. Для вытянутых молекулярных волчков (рис. 2, г) эти тенденции менее выражены. Это понятно из предыдущего рассмотрения.

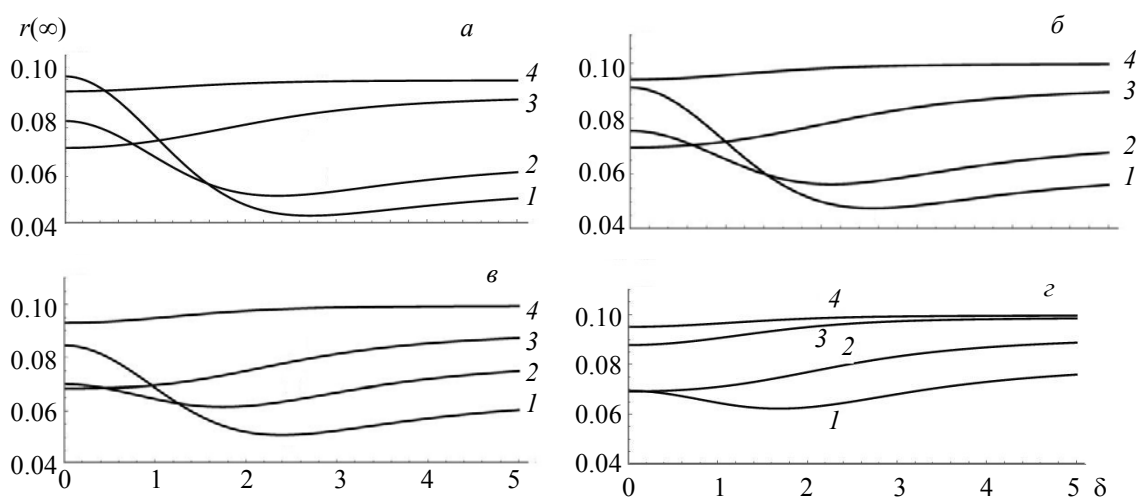


Рис. 2. Влияние дополнительного углового момента сил δ на анизотропию $r(\infty)$: $\chi = -1$, $\chi_c = -1$ (1), -0.5 (2), 0.5 (3), 0.9 (4) (а); $\chi = -0.5$, $\chi_c = -0.5$ (1), -0.1 (2), 0.5 (3), 0.9 (4) (б); $\chi = -0.2$, $\chi_c = -0.2$ (1), 0.2 (2), 0.5 (3), 0.9 (4) (в); $\chi = 0.5$, $\chi_c = 0.5$ (1), 0.7 (2), 0.9 (3), 0.95 (4) (г)

В реальной ситуации для расчета необходимо использовать передаваемый средний угловой момент. Эта величина для конкретных молекул и фрагментов определяется долей поступательной энергии, превращенной во вращательную. Если считать, что температуры для поступательного и вращательного движения равны, то нормированная на $\sqrt{I_{\perp}^* kT}$ величина δ должна быть порядка нормированного углового момента J^* . На рис. 3 для $\delta = 0, 1, 2$ приведены рассчитанные зависимости анизотропии от соотношения моментов инерции образовавшихся молекулярных комплексов для сплюснутых ($\chi = -1, -0.2$) и вытянутых ($\chi = 0.2, 0.8$) исходных молекулярных волчков. Кривыми 1 показаны предельные величины анизотропии для равновесных ансамблей свободных молекул с соотношением моментов инерции, как у комплексов. Кривые 2 определяют анизотропию, если образование комплексов происходит без возникновения дополнительного углового момента. Кривые 3 и 4 соответствуют ситуации, когда комплексообразование сопровождается участием дополнительного углового момента ($\delta = 1, 2$). В отсутствие дополнительных моментов анизотропии для равновесных и неравновесных ансамблей (кривые 1 и 2) существенно различаются. При небольших изменениях соотношения моментов инерции и дополнительных моментах сил анизотропия уменьшается для вытянутых и увеличивается для сплюснутых исходных молекулярных волчков.

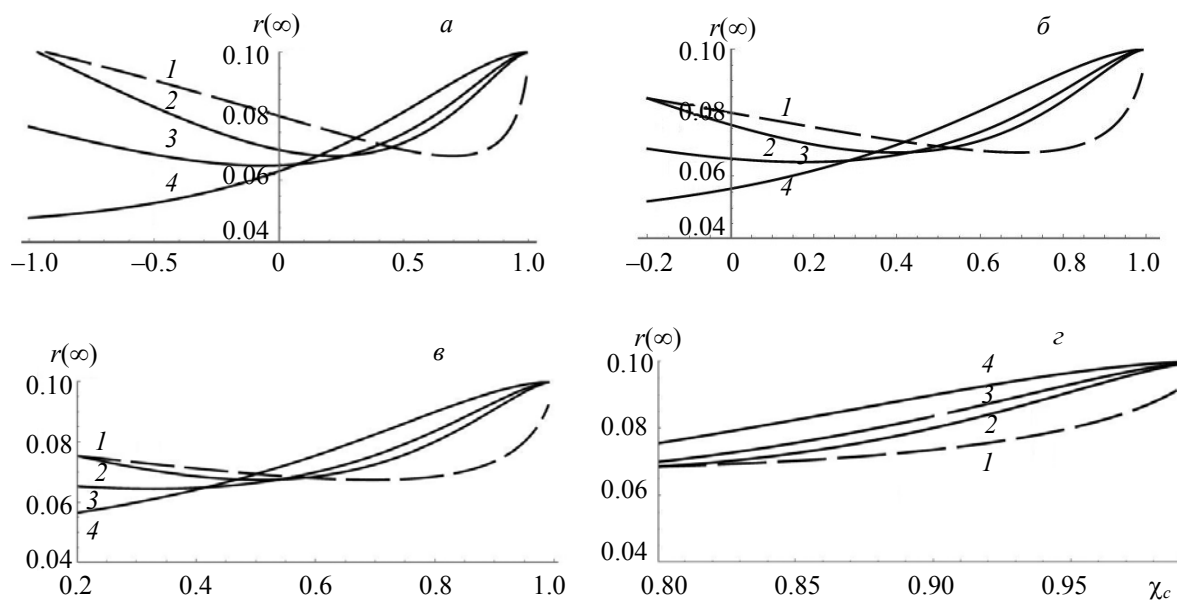


Рис. 3. Зависимости анизотропии $r(\infty)$ от соотношения моментов инерции молекулярного комплекса χ_c : $\chi = -1$ (а), -0.2 (б), 0.2 (в), 0.8 (г); $\delta = 0$ (1, 2), 1 (3), 2 (4)

Заключение. Как показали фемтосекундные поляризационные исследования ориентационной релаксации в газовой фазе при атмосферных давлениях [14–16], когда вращение молекул совершается свободно, по инерции, и столкновения практически не влияют на этот процесс, даже при высоких давлениях посторонних газов [17, 18] существуют промежутки времени почти свободного вращения. Поэтому в этих временных интервалах неравновесное распределение может сохраняться достаточно долго, чтобы проявиться в процессе релаксации анизотропии флуоресценции или при измерениях дихроизма поглощения второго пробного кванта света. Поляризационные эксперименты с неравновесными ансамблями молекулярных комплексов в областях спектров, допускающих их выделение, могут быть особенно полезны при изучении структуры комплексов, кинетики их образования и деградации для химически активных молекулярных газов в атмосфере, давая дополнительную информацию к интегральным характеристикам химических реакций [19, 20].

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта №Ф18А3-024.

-
- [1] T. Nagata, T. Kondow, R. Zare. *Mol. Phys.*, **70** (1990) 1158—1162
- [2] В. А. Поведайло, А. П. Блохин, М. Ф. Гелин, В. А. Толкачев. *Опт. и спектр.*, **73**, № 3 (1992) 547—552 [V. A. Povedailo, A. P. Blokhin, M. F. Gelin, V. A. Tolkachev. *Opt. Spectrosc.*, **73**, N 3 (1992) 320—323]
- [3] J. S. Baskin, A. H. Zewail. *J. Phys. Chem.*, **105** (1994) 3337—3351
- [4] A. P. Blokhin, M. F. Gelin. *J. Lumin.*, **72-74** (1997) 840—841
- [5] U. Marvet, Q. Zhang, E. J. Brown, M. Dantus. *J. Chem. Phys.*, **109** (1998) 4415—4442
- [6] A. P. Blokhin, M. F. Gelin, I. I. Kalosha, S. A. Polubisok, V. A. Tolkachev. *J. Chem. Phys.*, **110** (1999) 978—993
- [7] J. S. Baskin, A. H. Zewail. *J. Phys. Chem. A.*, **105** (2001) 3680—3692
- [8] U. Marvet, M. Dantus. *Chem. Phys. Lett.*, **245** (1995) 393—399
- [9] А. П. Блохин. *Журн. прикл. спектр.*, **80**, № 3 (2013) 58—64 [A. P. Blokhin. *J. Appl. Spectr.*, **80**, N 1 (2013) 54—60]
- [10] А. П. Блохин, М. Ф. Гелин. *Опт. и спектр.*, **88**, № 5 (2000) 806—813 [A. P. Blokhin, M. F. Gelin. *Opt. Spectrosc.*, **88**, N 5 (2000) 806—813]
- [11] A. P. Blokhin, M. F. Gelin. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **4** (2002) 3356—3364
- [12] A. G. Pierre, W. A. Steele. *Phys. Rev.*, **184** (1969) 172—186
- [13] A. V. Myers, P. L. Holt, M. A. Pereira, R. M. Hochstrasser. *Chem. Phys. Lett.*, **130** (1986) 265—270
- [14] N. S. Scherer, L. R. Khundkar, T. S. Rose, A. H. Zewail. *J. Chem. Phys.*, **91** (1987) 6478—6483
- [15] N. A. Borisevich, E. V. Khoroshilov, I. V. Kryukov, P. G. Kryukov, A. V. Sharkov, A. P. Blokhin, G. V. Tolstorogev. *Chem. Phys. Lett.*, **191** (1992) 225—237
- [16] А. П. Блохин, М. Ф. Гелин, Е. В. Хорошилов, И. В. Крюков, А. В. Шарков. *Опт. и спектр.*, **95**, № 3 (2003) 371—378 [A. P. Blokhin, M. F. Gelin, E. V. Khoroshilov, I. V. Kryukov, A. V. Sharkov. *Opt. Spectrosc.*, **95**, N 3 (2003) 560—572]
- [17] J. S. Baskin, M. Chachisvilis, M. Gupta, A. H. Zewail. *J. Phys. Chem. A*, **102** (1998) 4158—4171
- [18] А. П. Блохин, М. Ф. Гелин, О. В. Буганов, В. А. Дубовский, С. А. Тихомиров, Г. Б. Толсторожев. *Журн. прикл. спектр.*, **70**, № 1 (2003) 66—72 [A. P. Blokhin, M. F. Gelin, O. V. Buganov, V. A. Dubovski, S. A. Tihomirov, G. B. Tolstorogev. *J. Appl. Spectr.*, **70**, N 3 (2003) 378—384]
- [19] Feiyao Qing, Qin Gao, Liang Chen, Hengdao Quan, Junji Mizukado. *Chem. Phys. Lett.*, **706** (2018) 93—98
- [20] R. G. Gibilisco, I. Barnes, P. Wiesen. *Chem. Phys. Lett.*, **705** (2018) 38—43