

УДК 571.9

**СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ ДЛИНАМИ СВЯЗЕЙ В ВОДОРОДНЫХ МОСТИКАХ  
N—H...N, O—H...O, F—H...F И Cl—H...Cl**© 2009 **Е.Г. Тараканова\***, **Г.В. Юхневич***Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва**Статья поступила 30 октября 2008 г.**С доработки — 19 января 2009 г.*

Исследована применимость формулы  $e^{-((r_1-r_0)/b)^{5/3}} + e^{-((r_2-r_0)/b)^{5/3}} = 1$ , характеризующей соотношение между экспериментальными значениями длин ковалентной ( $r_1$ ) и водородной ( $r_2$ ) связей в мостиках O—H...O, для описания зависимости между измеренными межатомными расстояниями в мостиках N—H...N, а также между рассчитанными методом функционала плотности (B3LYP/6-31++G(d,p)) параметрами фрагментов X—H...X ( $X = O, N, F, Cl$ ) нейтральных, положительно и отрицательно заряженных молекулярных комплексов. Здесь  $r_0$  — среднее значение длины связи X—H в свободных молекулах;  $r_{\text{sym}}$  — расстояние X...H в симметричном мостике;  $b$  — коэффициент, определяемый из уравнения  $b = (r_{\text{sym}} - r_0)/(\ln 2)^{3/5}$ . Установлено, что данная формула позволяет с хорошей точностью описывать соотношение между длинами связей в близких к линейным водородных мостиках, образованных атомами кислорода, азота, фтора и хлора. Таким образом, она носит универсальный характер и может быть использована при изучении широкого круга объектов.

**Ключевые слова:** водородный мостик, длина H-связи, квантово-химический расчет.

**ВВЕДЕНИЕ**

Теоретическое описание соотношения между длинами ковалентной ( $r_1$ ) и водородной ( $r_2$ ) связей в мостиках O—H...O стало возможным после появления экспериментальных значений  $r_1$  и  $r_2$ , полученных методом нейтронографии. Результаты первых двух десятков исследований, в которых были измерены параметры фрагментов O—H...O, реализующихся в разных кристаллических структурах, были проанализированы в работе [1]. Из них следовало, что длина ковалентной связи увеличивается примерно пропорционально прочности водородной связи, в образовании которой она участвует. Дальнейшее обобщение постоянно пополняющихся данных нейтронографических измерений проводили, исходя из двух предположений. Согласно первому из них, кратность связи выражается через ее удлинение в форме обратной экспоненты, а согласно второму — сумма порядков связей  $r_1$  и  $r_2$  на всех этапах переноса протона равна единице (подробнее см. [2]).

Эти предположения легли в основу формулы

$$e^{-(r_1-r_0)/b} + e^{-(r_2-r_0)/b} = 1, \quad (1)$$

традиционно используемой для описания зависимости между длинами связей мостиков O—H...O (см., например, [3, 4]). В ней  $r_1$  и  $r_2$  находятся в эквивалентных положениях. Что же касается параметров  $r_0$  (который, очевидно, должен быть равен длине связи OH в свободных молекулах) и  $b$ , то их изначально пытались определить как константы, правда, подогнанные под ограниченный набор экспериментальных данных [5]. Однако для достижения в каждом конкретном

\* E-mail: egtar@igic.ras.ru

исследовании лучшего согласия теоретической кривой с результатами анализируемых измерений его авторы находили эти параметры путем аппроксимации экспериментальных данных по методу наименьших квадратов. При этом считалось вполне естественным изменение величин  $r_0$  и  $b$  при переходе от одной совокупности кристаллов к другой и сильное отличие  $r_0$  от длины связи ОН в свободных молекулах. Так, например, для неорганических кристаллов в работе [3] получены значения  $r_0$  и  $b$ , равные 0,914 и 0,404 Å, а для органических кристаллов в работе [4] — 0,928 и 0,393 Å. Таким образом, следует признать, что оба входящих в формулу (1) параметра носят подгоночный характер и, строго говоря, не имеют физического смысла.

Результаты теоретического описания эксперимента в исследованиях [3, 4] позволяют также заключить, что соответствующая формуле (1) аналитическая кривая имеет в окрестностях точки перегиба ( $r_1 = r_2$ ) недостаточную кривизну. Этот факт был отмечен в работе [2], в которой на основании анализа параметров 465 мостиков О—Н...О в более чем 200 кристаллах показано, что наилучшее согласие с экспериментом получается при возведении величины  $(r_i - r_0)$  в степень 5/3. Предложенная в [2] формула

$$e^{-((r_1-r_0)/b)^{5/3}} + e^{-((r_2-r_0)/b)^{5/3}} = 1, \quad (2)$$

характеризующая соотношение между экспериментальными значениями длин ковалентной и водородной связей в близких к линейным (с углом, равным 170—180°) мостиках О—Н...О, принципиально отличается от выражения (1) тем, что в ней нет ни одного подгоночного параметра. Она основана на знании двух величин, известных из эксперимента и имеющих четкий физический смысл. Первая из них,  $r_0 = 0,95$  Å, это среднее значение длины О—Н-связи в свободных молекулах (см., например, [6—8]), а вторая,  $r_{\text{sym}} = 1,215$  Å, расстояние О...Н в симметричном водородном мостике, оцененное в работе [2] на основании результатов многочисленных нейтронографических исследований и являющееся практически постоянным для широкого круга дисольватов протона [9—14]. При этом коэффициент  $b$ , являющийся по сути коэффициентом размерности, однозначно находится из уравнения  $b = (r_{\text{sym}} - r_0)/(\ln 2)^{3/5}$ , получающегося из формулы (2) при  $r_1 = r_2 = r_{\text{sym}}$ . Таким образом, функция (2) является физически обоснованной.

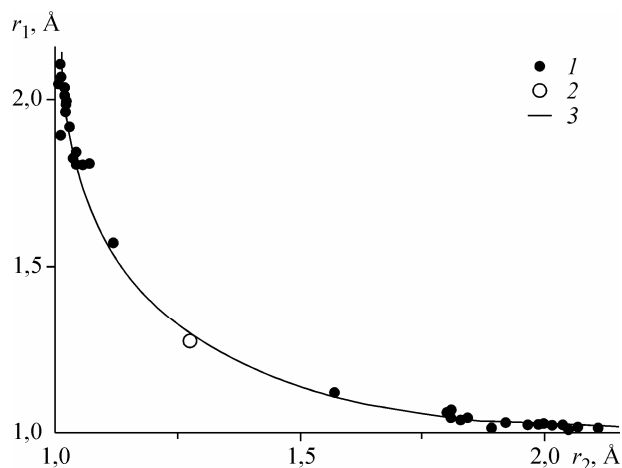
Из приведенных в работе [2] данных следует, что теоретическая кривая, задаваемая формулой (2), хорошо согласуется с результатами практически всех известных на сегодняшний день нейтронографических измерений межатомных расстояний во фрагментах О—Н...О. Поскольку эта формула имеет достаточно общий характер, естественно было предположить, что она позволит адекватно описывать и взаимосвязь между параметрами водородных мостиков, образованных другими атомами. Задача настоящей работы заключалась в проверке такого предположения. С этой целью были сформированы пять независимых наборов данных, каждый из которых включает в себя длины связей X—Н и Н...X в фрагментах X—Н...X (X = O, N, F, Cl), принадлежащих широкому кругу молекулярных систем. Один набор состоит из экспериментальных значений параметров мостиков N—Н...N, а остальные четыре получены при расчете методом функционала плотности нейтральных и заряженных молекулярных комплексов разной топологии, содержащих фрагменты О—Н...О, N—Н...N, F—Н...F и Cl—Н...Cl.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Экспериментальные значения длин связей в близких к линейным (с углом, равным 170—180°) водородных мостиках N—Н...N (рис. 1) были взяты из работ, имеющих в банке данных CSD следующие Rev коды: AMBACO<sub>07</sub>, AMCLPY<sub>11</sub>, AMXBMP<sub>10</sub>, SBOATZ<sub>02</sub>, CYGUAN<sub>01</sub>, HARMID<sub>03</sub>, IMAZOL<sub>04</sub>, IMAZOL<sub>06</sub>, IMAZOL<sub>13</sub>, MEADEN<sub>02</sub>, MELAMI<sub>04</sub>, MELAMI<sub>06</sub>, PYRZOL<sub>02</sub> и XUNCUE. При изображении этих результатов на графике по оси абсцисс откладывали значения длин и ковалентных (N—H), и водородных (H...N) связей. Такой способ представления данных отражает эквивалентность входящих в уравнение (2) величин  $r_1$  и  $r_2$ .

Параметр  $r_0 = 1,01$  Å, необходимый для построения кривой, характеризующей соотношение между длинами ковалентной и водородной связей в фрагментах N—Н...N, был найден, исходя

Рис. 1. Зависимость между экспериментальными значениями длин связей в мостиках N—H...N: 1 — результаты нейтронографических измерений, 2 — данные работы [15], 3 — теоретическая кривая, заданная формулой (2)



из экспериментальных значений длин связей N—H в свободных молекулах NH<sub>3</sub> (1,015 Å), CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> (1,010 Å) и (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH (1,010 Å) [8]. При оценке величины  $r_{\text{sym}} = 1,29$  Å были использованы интерполяция результатов нейтронографических измерений и данные работы [15]. Путем сопоставления спектров высокого разрешения ионного комплекса N<sub>2</sub>...H<sup>+</sup>...N<sub>2</sub> и результатов *ab initio* расчета в ней показано, что этот комплекс содержит симметричный мостик, в котором расстояние  $r_{\text{H...N}}$  равно 1,277 Å (точка 2 на рис. 1).

В силу объективных причин, подробно рассмотренных в работе [2], точность воспроизведения формулой (2) зависимости между измеренными методом нейтронографии длинами ковалентной и водородной связей, образующихся в кристаллических структурах, не может превышать 0,005 Å. Поэтому при задании параметров  $r_0$  и  $r_{\text{sym}}$  в формуле (2), описывающей результаты таких измерений, как правило, достаточно приводить два знака после запятой (табл. 1).

Из представленных на рис. 1 данных видно, что предложенное в работе [2] аналитическое выражение применимо и для водородных мостиков, образованных атомами азота. При этом следует отметить, что во всем изученном диапазоне изменения длин связей N—H и H...N точность воспроизведения теоретической кривой хода экспериментальной зависимости не хуже, чем в случае мостиков O—H...O.

Расчет оптимальных конфигураций всех молекулярных комплексов и самоассоциатов, чьи параметры водородных мостиков были использованы при решении поставленной задачи, был выполнен с применением одного и того же метода и набора базисных функций (B3LYP/6-31++G(*d,p*)) по программе GAUSSIAN-98 [16]. Большинство этих систем было изучено ранее в ряде независимых работ [17—22], посвященных вопросам, не имеющим отношения к предмету настоящего исследования. Полные энергии дополнительно рассчитанных устойчивых молекулярных комплексов и длины связей входящих в их состав фрагментов X—H...X (X = O, N, F, Cl) приведены в табл. 2.

Полученные в итоге наборы данных для 22 водородных мостиков N—H...N, 66 — O—H...O, 51 — F—H...F и 11 — Cl—H...Cl представлены на рис. 2, 3, 4 и 5 соответственно. В первый из этих наборов наряду с мостиками, входящими в состав перечисленных в табл. 2 молекулярных комплексов, включены параметры фрагментов N—H...N в 10 дисольватах протона, рассмотренных в работе [17]. Второй набор данных состоит из длин связей в 7 водородных мостиках O—H...O, приведенных в табл. 1, 16 мостиках в дисольватах протона [17], 30 мостиках в сис-

Т а б л и ц а 1

Значения параметров  $r_0$  (Å) и  $r_{\text{sym}}$  (Å), используемые при получении формулы (2) для описания взаимосвязи между длинами ковалентной и водородной связей в водородных мостиках O—H...O, N—H...N,

F—H...F и Cl—H...Cl

Водородный мостик	$r_0$	$r_{\text{sym}}$	Водородный мостик	$r_0$	$r_{\text{sym}}$
O—H...O (эксперимент)	0,950	1,215	N—H...N (расчет)	1,010	1,280 и 1,300
O—H...O (расчет)	0,965	1,200	F—H...F (расчет)	0,928	1,143
N—H...N (эксперимент)	1,010	1,290	Cl—H...Cl (расчет)	1,287	1,582

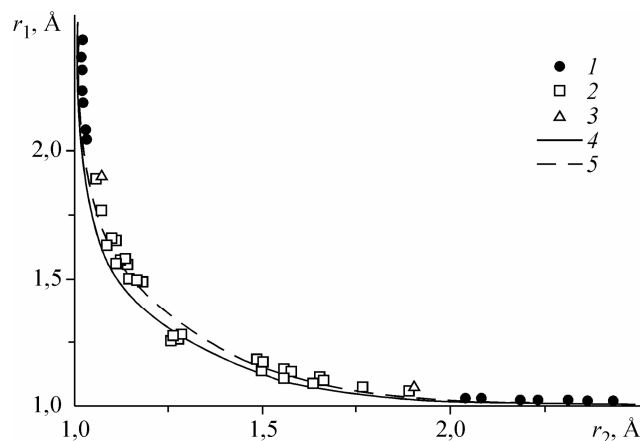
Рассчитанные значения полной энергии ( $E$ , ат. ед.) молекулярных комплексов, содержащих мостики  $X-H...X$  ( $X = O, N, F, Cl$ ), длин ковалентной ( $r_1, \text{Å}$ ) и водородной ( $r_2, \text{Å}$ ) связей в этих мостиках, длин мостиков ( $R_{XX}, \text{Å}$ ) и углов  $XHX$  ( $\alpha$ , град.)

Молекулярный комплекс	$E$	$r_1$	$r_2$	$R$	$\alpha$
PN...H <sup>+</sup> ...NP	-792,49	1,265	1,276	2,541	180
F <sub>3</sub> N—H <sup>+</sup> ...NF <sub>3</sub>	-708,44	1,179	1,490	2,669	180
Cl <sub>3</sub> N—H <sup>+</sup> ...NCl <sub>3</sub>	-2870,74	1,146	1,500	2,646	180
HSN—H <sup>+</sup> ...NSH	-907,30	1,088	1,635	2,723	178
(H <sub>2</sub> N) <sup>-</sup> —H <sup>+</sup> ...(NH <sub>2</sub> ) <sup>-</sup>	-112,50	1,073	1,903	2,874	175
[N—H...NH]* (NH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>3</sub> cycle	-342,49	1,034	2,043	3,075	176
[N—H...NH] (NH <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> branched		1,031	2,086	3,073	160
[N—H...NH] (NH <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> branched	-282,86	1,026	2,189	3,171	160
H <sub>2</sub> N—H...NH <sub>3</sub>	-113,14	1,022	2,231	3,230	166
CH <sub>3</sub> HN—H...NH <sub>3</sub>	-152,44	1,021	2,239	3,252	171
[N—H...NH] (NH <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> branched	-282,86	1,021	2,318	3,333	173
H <sub>2</sub> N—H...NCCH <sub>3</sub>	-189,34	1,018	2,367	3,379	172
OCO...H <sup>+</sup> ...OCO	-377,43	1,195	1,197	2,392	180
HO—H...OHCH <sub>3</sub>	-192,18	0,975	1,886	2,856	172
H <sub>3</sub> CO—H...OHCH <sub>3</sub>	-231,48	0,974	1,896	2,867	175
HO—H...OH <sub>2</sub>	-152,88	0,974	1,917	2,886	173
CH <sub>3</sub> O—H...OH <sub>2</sub>	-192,18	0,972	1,927	2,897	176
[HO—H...OH <sub>2</sub> ] <sub>1</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>3</sub> chain		0,972	1,972	2,921	165
[HO—H...OH <sub>2</sub> ] <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>3</sub> chain	-229,32	0,971	1,982	2,917	161
HF...H <sup>+</sup> ...FH	-201,15	1,155	1,155	2,310	180
F <sup>-</sup> ...H <sup>+</sup> ...F <sup>-</sup>	-200,39	1,146	1,157	2,303	180
F—H...FH	-200,91	0,935	1,799	2,734	178
[F—H...FH] (HF) <sub>4</sub> branched	-401,84	0,935	1,808	2,730	168
[F—H...FH] (HF) <sub>8</sub> branched	-803,70	0,934	1,822	2,756	180
[F—H...FH] (HF) <sub>8</sub> branched	-803,69	0,933	1,847	2,779	177
[F—H...FH] (HF) <sub>7</sub> branched	-703,24	0,933	1,855	2,788	179
[F—H...FH] (HF) <sub>5</sub> branched	-502,31	0,932	1,879	2,811	179
[F—H...FH] (HF) <sub>8</sub> branched	-803,69	0,931	1,895	2,823	174
F—H...FCF <sub>3</sub>	-537,96	0,929	2,078	2,997	170
Cl <sub>2</sub> ...H <sup>+</sup> ...Cl <sub>2</sub>	-1840,94	1,584	1,589	3,173	180
Cl <sup>-</sup> ...H <sup>+</sup> ...Cl <sup>-</sup>	-921,12	1,577	1,577	3,154	180
HCl...H <sup>+</sup> ...ClH	-921,85	1,586	1,587	3,171	176
Cl—H...ClH	-921,61	1,292	2,583	3,867	172
H <sub>3</sub> CCl...H <sup>+</sup> ...ClCH <sub>3</sub>	-1000,51	1,579	1,579	3,158	180

\* В квадратных скобках приведены фрагменты циклического гетеротетрамера (NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>, цепочечного тримера воды и разветвленных молекулярных комплексов (NH<sub>3</sub>)<sub>5</sub>, (HF)<sub>*n*</sub> (*n* = 4, 5, 7, 8).

Примечание. Cycle — циклический, branched — разветвленный, chain — цепочечный.

Рис. 2. Зависимость между рассчитанными значениями длин связей в мостиках N—H...N: 1 — результаты, полученные для нейтральных, 2 — для положительно заряженных, 3 — для отрицательно заряженных молекулярных систем. Теоретическая кривая, заданная формулой (2): 4 — значение  $r_{\text{sym}} = 1,280 \text{ \AA}$ , 5 — значение  $r_{\text{sym}} = 1,300 \text{ \AA}$



темах  $(\text{DMFA})_m\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $m = 0-2$ ,  $n = 0-6$ ) [18], а также в 13 мостиках в гетероассоциатах  $(\text{DMFA})_m \cdot (\text{MCK})_n$  ( $m = 1-2$ ,  $n = 1-2$ ) и заряженных комплексах, образованных при сольватации протона молекулами МСК и ионами  $(\text{H}_3\text{CSO}_3)^-$  [19]. Третий набор данных содержит параметры 41 фрагмента F—H...F, входящего в состав молекулярных комплексов  $(\text{HF})_n \cdot \text{DMFA}$  ( $n = 4-6$ ) [20], и 10 водородных мостиков, представленных в табл. 2. Межатомные расстояния в фрагментах Cl—H...Cl взяты из димера  $(\text{HCl})_2$ , одного отрицательно заряженного и трех положительно заряженных дисольватов протона (см. табл. 2) и шести гетерокомплексов  $(\text{DMFA})_m \cdot (\text{HCl})_n$  ( $m = 1-2$ ,  $n = 2-4$ ) [21, 22].

Величины  $r_0$  и  $r_{\text{sym}}$ , входящие в выражение (2) для всех исследуемых близких к линейным\* фрагментов X—H...X (см. табл. 1), были определены путем детального анализа расчетных данных. При этом параметры  $r_0$  для всех четырех мостиков были найдены однозначно. Значения  $r_{\text{sym}}$  для фрагментов O—H...O и Cl—H...Cl были взяты равными длине связи H...X в симметричных дисольватах протона. Поскольку в случае водородных мостиков F—H...F точки, соответствующие симметричным заряженным структурам, лежат немного выше хорошо согласующихся между собой точек, отвечающих квазисимметричным фрагментам нейтральных молекулярных комплексов (см. рис. 4), величину  $r_{\text{sym}}$  определяли путем интерполяции результатов расчета, полученных для этих фрагментов. На графике зависимости  $r_1(r_2)$ , построенном для мостиков N—H...N, наблюдается наибольший разброс точек, причем точки, относящиеся к симметричным дисольватам протона, расположены заметно ниже кривой, соответствующей несим-

метричным мостикам (см. рис. 2). Поэтому в данном случае результаты расчета были сопоставлены с двумя теоретическими кривыми. При задании одной из них параметр  $r_{\text{sym}}$  был взят равным длине связи H...F в симметричном мостике (см. рис. 2, кривая 4), а при задании другой — оценен пу-

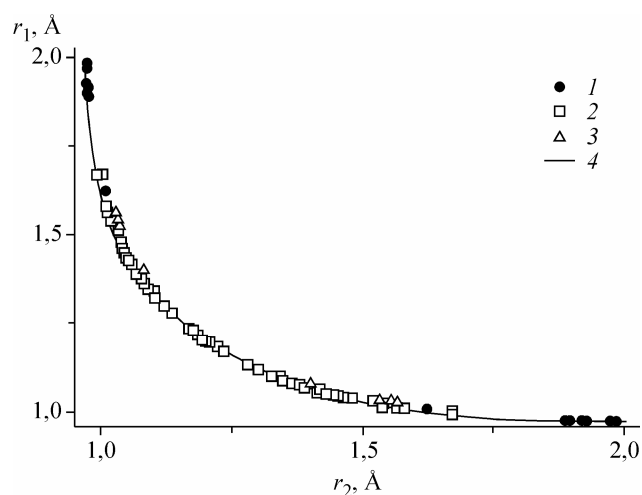


Рис. 3. Зависимость между рассчитанными значениями длин связей в мостиках O—H...O: 1 — результаты, полученные для нейтральных, 2 — для положительно заряженных, 3 — для отрицательно заряженных молекулярных систем; 4 — теоретическая кривая, заданная формулой (2)

\* В отличие от экспериментально изученных H-мостиков, изгиб которых не превышал  $10^\circ$ , при анализе результатов расчета близкими к линейным считали фрагменты X—H...X с углами  $160-180^\circ$ . Выбор такого критерия обусловлен тем, что точки, отвечающие фрагментам с углами, меньшими  $160^\circ$ , систематически отклоняются вверх от точек, соответствующих линейным мостикам.

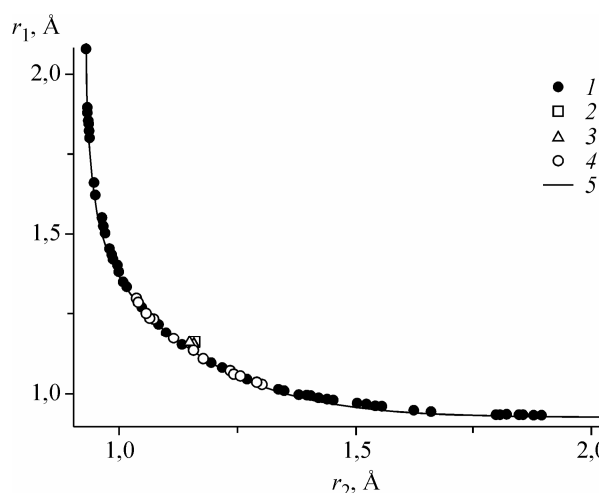


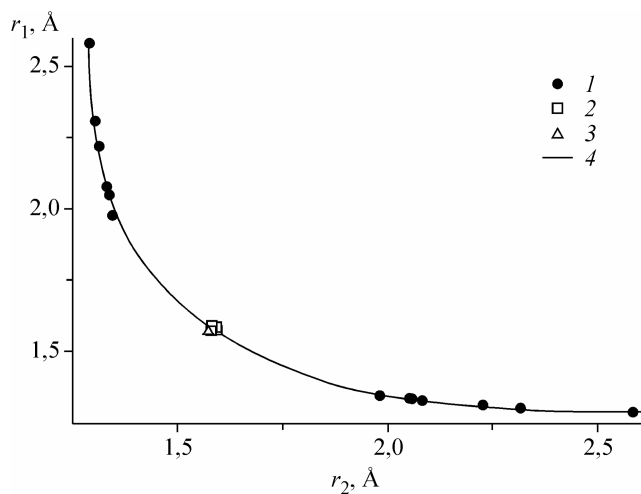
Рис. 4. Зависимость между рассчитанными значениями длин связей в мостиках F—H...F: 1 — результаты, полученные для нейтральных, 2 — для положительно заряженных, 3 — для отрицательно заряженных молекулярных систем, 4 — данные для мостиков, в которых произошел переход протона от одной молекулы водородосвязанного комплекса к другой, 5 — теоретическая кривая, заданная формулой (2)

описывают общий ход зависимости  $r_1(r_2)$ , однако кривая 5 лучше воспроизводит результаты квантово-химического расчета в области относительно сильных водородных связей ( $r_2 = 1,5—1,8 \text{ \AA}$ ). Представленные на рис. 2 результаты являются также наглядной иллюстрацией того, как небольшое отличие (на  $0,02 \text{ \AA}$ ) входящих в уравнение (2) параметров  $r_{\text{sym}}$  влияет на форму задаваемой им теоретической кривой. Из приведенных данных также видно, что длины связей фрагментов N—H...N, принадлежащих нейтральным, положительно и отрицательно заряженным молекулярным комплексам, подчиняются одним и тем же (или очень близким) зависимостям.

Аналогичная ситуация имеет место и в случае водородных мостиков O—H...O (см. рис. 3), F—H...F (см. рис. 4), Cl—H...Cl (см. рис. 5). Теоретические кривые, задаваемые формулой (2), во всей области изменения межатомных расстояний  $r_2$  хорошо ложатся на зависимости  $r_1(r_2)$ , полученные при вычислении структурных характеристик не только нейтральных, но и заряженных систем. Кроме того, из результатов расчета гетероассоциатов (HF)<sub>n</sub>·ДМФА ( $n = 4—6$ ) следует, что эта формула справедлива также для мостиков, в которых произошел переход протона от одной молекулы к другой (см. рис. 4).

Выполненный в настоящей работе анализ возможности описания с помощью уравнения (2) наборов расчетных данных показал, что для адекватного воспроизведения взаимосвязи между вычисленными параметрами фрагментов X—H...X желательно, чтобы точность задания величин  $r_0$  и  $r_{\text{sym}}$  была не ниже  $0,005 \text{ \AA}$ .

Установлено, что формула (2) с хорошей точностью описывает соотношение между длинами ковалентной и водородной связей в мостиках O—H...O, N—H...N, F—H...F и Cl—H...Cl,



образующихся в нейтральных, положительно и отрицательно заряженных молекулярных системах. Она с одинаковым успехом может применяться при анализе особенностей строения близких к линейным фрагментов X—H...X, меж-

Рис. 5. Зависимость между рассчитанными значениями длин связей в мостиках Cl—H...Cl: 1 — результаты, полученные для нейтральных, 2 — для положительно заряженных, 3 — для отрицательно заряженных молекулярных систем, 4 — теоретическая кривая, заданная формулой (2)

атомные расстояния в которых получены из эксперимента и квантово-химических расчетов. Следовательно, данная формула носит универсальный характер и может быть использована при изучении широкого круга объектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 07-03-00329 и № 08-03-00361).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пиментел Дж., Мак-Клеллан О. Водородная связь – М.: Мир, 1964. [*Pimentel G.C., McClellan A.L. The Hydrogen Bond. Ed. Pauling L. – San Francisco, London: Freeman, 1960.*]
2. Юхневич Г.В. // Кристаллография. – 2009. – **54**, № 2. – С. 212.
3. Alig H., Lösel J., Trömel M. // *Z. Kristallogr.* – 1994. – **209**, N 1. – S. 18.
4. Steiner Th., Saenger W. // *Acta Crystallogr.* – 1994. – **B50**. – P. 348.
5. Brown I.D. // *Ibid.* – 1992. – **B48**. – P. 553.
6. Benedict W.S., Gailar N., Plyler E.K. // *J. Chem. Phys.* – 1956. – **24**, N 6. – P. 1139.
7. Lees R.M., Baker J.G. // *Ibid.* – 1968. – **48**, N 12. – P. 5299.
8. Свердлов Л.А., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул – М.: Наука, 1970.
9. Либрович Н.Б., Сакун В.П., Соколов Н.Д. В сб.: Водородная связь / Под ред. Н.Д. Соколова. – М.: Наука, 1981. – С. 174 – 211.
10. Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г., Майоров В.Д. и др. // *Успехи химии.* – 1995. – **64**, № 10. – С. 963.
11. Fridgen T.D., McMahon T.B., MacAleese L. et al. // *J. Phys. Chem. A.* – 2004. – **108**, N 42. – P. 9008.
12. Solca N., Dopfer O. // *J. Amer. Chem. Soc.* – 2004. – **126**, N 31. – P. 9521.
13. Auer A.A., Helgaker T., Klopper W. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2000. – **2**. – P. 2235.
14. Xie Y., Remington R.B., Schaefer H.F. // *J. Chem. Phys.* – 1994. – **101**, N 6. – P. 4878.
15. Verdes D., Linnartz H., Maier J.P. et al. // *Ibid.* – 1999. – **111**, N 18. – P. 8400.
16. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. GAUSSIAN 98 (Revision A.1). – Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
17. Тараканова Е.Г., Цой О.Ю., Юхневич Г.В. и др. // *Хим. физика.* – 2008. – **27**, № 9. – С. 32.
18. Кислина И.С., Либрович Н.Б., Майоров В.Д. и др. // Там же. – 2007. – **26**, № 2. – С. 25. [*Russian J. Phys. Chem. B.* – 2007. – **1**, N 1. – P. 20 (Engl. Transl.)]
19. Tarakanova E.G., Yukhnevich G.V. // III Intern. Conf. Hydrogen Bonding and Molecular Interactions. Book of Abstracts. – Kiev, Ukraine, 2006. – P. 157.
20. Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В. // Тез. докл. IV конф. "Молекулярное моделирование". – М., 2005. – С. 103.
21. Тараканова Е.Г., Цой О.Ю., Юхневич Г.В. и др. // *Кинетика и катализ.* – 2004. – **45**, № 3. – С. 385. [*Kinetics and Catalysis.* – 2004. – **45**, N 3. – P. 359 (Engl. Transl.)]
22. Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г., Цой О.Ю. и др. // *Журн. структур. химии.* – 2005. – **46**, № 1. – С. 18. [*J. Struct. Chem.* – 2005. – **46**, N 1. – P. 16 – 22. (Engl. Transl.)]