

М.А. Булдаков¹, В.Н. Черепанов², Н.С. Нагорнова²**Поляризуемость ван-дер-ваальсовских комплексов N₂...Y и O₂...Y (Y=He, Ne, Ar, Kr, Xe).****II. Неустойчивые конфигурации**¹ *Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск*² *Томский государственный университет*

Поступила в редакцию 5.10.2004 г.

Теоретически исследованы аналитические зависимости поляризуемости комплексов X₂...Y от расстояния между атомом Y и молекулой X₂, межъядерного расстояния молекулы X₂ и ее ориентации в комплексе. Расчеты поляризуемости комплекса проведены в рамках модифицированной модели взаимодействующих индуцированных диполей, в которой молекула в комплексе представляется в виде двух эффективных анизотропных атомов. Поляризуемости этих эффективных атомов определялись поляризуемостью молекулы X₂ и ее ориентацией в димере. Рассчитаны поляризуемости комплексов X₂...Y (X₂=N₂, O₂ и Y=He, Ne, Ar, Kr, Xe).

Введение

Характерной особенностью ван-дер-ваальсовских комплексов является слабое взаимодействие компонентов комплексов, проявляющееся в их небольших (~100 см⁻¹) энергиях связи. Как правило, поверхность потенциальной энергии комплексов имеет очень сложный вид, обладая одним или несколькими минимумами, которые и задают устойчивые конфигурации комплексов [1, 2]. Однако даже небольшое колебательно-вращательное возбуждение комплексов приводит к тому, что их компоненты совершают внутренние движения большой амплитуды, в результате чего комплексы находятся большую часть времени в неустойчивых конфигурациях. Очевидно, что комплексы в устойчивых конфигурациях играют преобладающую роль только при очень низких температурах газа. При повышении температуры роль комплексов в неустойчивых конфигурациях возрастает и становится весьма заметной при атмосферных температурах.

В первой части работы [3] были рассчитаны поляризуемости ван-дер-ваальсовских комплексов X₂...Y, находящихся в устойчивых конфигурациях. Для неустойчивых конфигураций комплексов используемый в [3] метод расчета поляризуемостей дает очень громоздкие выражения, практически не пригодные для анализа. По этой причине в данной работе будет использован итерационный метод расчета, который менее точен, но позволяет получить достаточно компактные аналитические выражения для компонентов и инвариантов тензора поляризуемости комплексов X₂...Y для их произвольных конфигураций.

Аналитическое представление поляризуемости комплекса X₂...Y

Для расчета поляризуемости молекулярных комплексов использовалась модель индуцированных

точечных диполей, сформулированная Зильберштейном для системы взаимодействующих атомов [4, 5] и модифицированная в [6] для молекулярных систем. В рамках модифицированной модели каждая молекула комплекса представляется в виде совокупности эффективных атомов, поляризуемость которых зависит от межъядерных расстояний в молекуле. При этом взаимодействие между эффективными атомами одной молекулы отсутствует, а их суммарная поляризуемость совпадает с поляризуемостью самой молекулы. В результате атомно-молекулярный комплекс может быть представлен в виде совокупности взаимодействующих реальных и эффективных атомов, а тензор поляризуемости такого комплекса $\alpha_{\alpha\beta}$ записан в форме ряда [6]:

$$\alpha_{\alpha\beta} = \sum_{m=1}^N \alpha_{\alpha\beta}^m + \sum_{m,n=1}^N \alpha_{\alpha\delta}^m T_{\delta\gamma}^{mn} \alpha_{\gamma\beta}^n + \sum_{m,n,k=1}^N \alpha_{\alpha\delta}^m T_{\delta\gamma}^{mn} \alpha_{\gamma\epsilon}^n T_{\epsilon\beta}^{nk} \alpha_{\beta\beta}^k + \dots, \quad (1)$$

где $\alpha_{\alpha\beta}^m$ — тензор поляризуемости реального или эффективного атома m ; N — общее число реальных и эффективных атомов комплекса. Индексы $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon$ и ρ принимают значения X, Y, Z декартовой системы координат (по повторяющимся греческим индексам проводится суммирование). Тензор $T_{\beta\gamma}^{mn}$ в выражении (1) имеет вид

$$T_{\beta\gamma}^{mn} = -\frac{1}{(r^{mn})^5} \left(3r_{\beta}^{mn} r_{\gamma}^{mn} - (r^{mn})^2 \delta_{\beta\gamma} \right). \quad (2)$$

Здесь r^{mn} — расстояние между атомами m и n ; r_{β}^{mn} — компоненты вектора \mathbf{r}^{mn} . Выражение (1) описывает тензор поляризуемости любых атомно-молекулярных комплексов в их произвольных конфигурациях.

Для расчета поляризуемости комплекса $X_2...Y$ введем две декартовы системы координат: система координат X, Y, Z , связанная с комплексом (ось Z проходит через центр молекулы X_2 и атом Y), и система координат x, y, z , связанная с молекулой X_2 (ядра молекулы расположены на оси z). Ориентация молекулы в комплексе задается углами Эйлера θ и φ (рис. 1). В выбранных таким образом системах координат поляризуемость комплекса $X_2...Y$ зависит от расстояния R между атомом Y и центром молекулы X_2 , расстояния r между ядрами молекулы X_2 , ориентации молекулы X_2 в комплексе (углы θ и φ), а также от поляризуемости α сферически симметричного атома Y и тензора поляризуемости $\alpha_{ii}^M(r)$ молекулы X_2 .

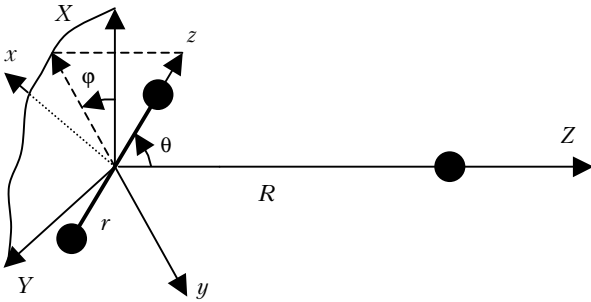


Рис. 1. Декартовы системы координат, используемые в данной работе

Расчет компонент тензора поляризуемости комплекса $X_2...Y$ проведен по формулам (1), (2) с точностью до членов R^{-6} включительно. В результате расчета получены следующие аналитические выражения:

$$\begin{aligned} \alpha_{XX}(r, R, \theta, \varphi) &= \alpha_{xx}^M(r)(1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi) + \\ &+ \alpha_{zz}^M(r) \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \alpha - \\ &- \frac{2\alpha}{R^3} \left[\alpha_{xx}^M(r)(1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi) + \alpha_{zz}^M(r) \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \right] + \\ &+ \frac{3r^2 \alpha}{4R^5} \left\{ \alpha_{xx}^M(r)(15 \cos^2 \theta \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - \right. \\ &\quad \left. - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 5 \cos^2 \theta + 1) - \right. \\ &\quad \left. - 3\alpha_{zz}^M(r) \sin^2 \theta \cos^2 \varphi (5 \cos^2 \theta - 1) \right\} + \\ &+ \frac{\alpha}{R^6} \left\{ (\alpha_{xx}^M(r))^2 (3 \cos^2 \theta \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + 1) + \right. \\ &\quad \left. + (\alpha_{zz}^M(r))^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi (3 \cos^2 \theta + 1) - \right. \\ &\quad \left. - 6\alpha_{xx}^M(r) \alpha_{zz}^M(r) \cos^2 \theta \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \right. \\ &\quad \left. + \alpha \alpha_{xx}^M(r) (1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi) + \alpha \alpha_{zz}^M(r) \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \right\}; \quad (3) \\ \alpha_{YY}(r, R, \theta, \varphi) &= \alpha_{xx}^M(r)(1 - \sin^2 \theta \sin^2 \varphi) + \\ &+ \alpha_{zz}^M(r) \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \alpha - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &- \frac{2\alpha}{R^3} \left[\alpha_{xx}^M(r)(1 - \sin^2 \theta \sin^2 \varphi) + \alpha_{zz}^M(r) \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \right] + \\ &+ \frac{3r^2 \alpha}{4R^5} \left\{ \alpha_{xx}^M(r)(15 \cos^2 \theta \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - \right. \\ &\quad \left. - \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - 5 \cos^2 \theta + 1) - \right. \\ &\quad \left. - 3\alpha_{zz}^M(r) \sin^2 \theta \sin^2 \varphi (5 \cos^2 \theta - 1) \right\} + \\ &+ \frac{\alpha}{R^6} \left\{ (\alpha_{xx}^M(r))^2 (3 \cos^2 \theta \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + 1) + \right. \\ &\quad \left. + (\alpha_{zz}^M(r))^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi (3 \cos^2 \theta + 1) - \right. \\ &\quad \left. - 6\alpha_{xx}^M(r) \alpha_{zz}^M(r) \cos^2 \theta \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \right. \\ &\quad \left. + \alpha \alpha_{xx}^M(r) (1 - \sin^2 \theta \sin^2 \varphi) + \alpha \alpha_{zz}^M(r) \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \right\}; \quad (4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_{ZZ}(r, R, \theta) &= \alpha_{xx}^M(r) \sin^2 \theta + \alpha_{zz}^M(r) \cos^2 \theta + \alpha + \\ &+ \frac{4\alpha}{R^3} (\alpha_{xx}^M(r) \sin^2 \theta + \alpha_{zz}^M(r) \cos^2 \theta) + \\ &+ \frac{3r^2 \alpha}{R^5} \left\{ \alpha_{xx}^M(r)(4 \cos^2 \theta \sin^2 \theta - \sin^4 \theta) - \right. \\ &\quad \left. - \alpha_{zz}^M(r)(3 \cos^2 \theta \sin^2 \theta - 2 \cos^4 \theta) \right\} + \\ &+ \frac{\alpha}{R^6} \left\{ (\alpha_{xx}^M(r))^2 (\cos^2 \theta \sin^2 \theta + 4 \sin^4 \theta) + \right. \\ &\quad \left. + (\alpha_{zz}^M(r))^2 (\cos^2 \theta \sin^2 \theta + 4 \cos^4 \theta) + \right. \\ &\quad \left. + 6\alpha_{xx}^M(r) \alpha_{zz}^M(r) \cos^2 \theta \sin^2 \theta + \right. \\ &\quad \left. + 4\alpha \alpha_{xx}^M(r) \sin^2 \theta + 4\alpha \alpha_{zz}^M(r) \cos^2 \theta \right\}; \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_{XY}(r, R, \theta, \varphi) &= \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi \times \\ &\times \left\{ (\alpha_{zz}^M(r) - \alpha_{xx}^M(r)) - \frac{2\alpha}{R^3} (\alpha_{zz}^M(r) - \alpha_{xx}^M(r)) + \right. \\ &+ \frac{3r^2 \alpha}{4R^5} \left[\alpha_{xx}^M(r)(15 \cos^2 \theta - 1) - \alpha_{zz}^M(r)(15 \cos^2 \theta - 3) \right] + \\ &\quad \left. + \frac{\alpha}{R^6} (\alpha_{zz}^M(r) - \alpha_{xx}^M(r)) \times \right. \\ &\quad \left. \times [\alpha_{zz}^M(r)(3 \cos^2 \theta + 1) - \alpha_{xx}^M(r)(3 \cos^2 \theta - 1) + \alpha] \right\}; \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_{XZ}(r, R, \theta, \varphi) &= \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \left\{ (\alpha_{zz}^M(r) - \alpha_{xx}^M(r)) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha}{R^3} (\alpha_{zz}^M(r) - \alpha_{xx}^M(r)) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{3r^2 \alpha}{8R^5} \left[\alpha_{xx}^M(r)(5 \cos^2 \theta + 7) - \alpha_{zz}^M(r)(5 \cos^2 \theta - 9) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha}{R^6} (\alpha_{zz}^M(r) - \alpha_{xx}^M(r)) \times \right. \\ &\quad \left. \times [\alpha_{zz}^M(r)(3 \cos^2 \theta + 1) - \alpha_{xx}^M(r)(3 \cos^2 \theta - 4) - 2\alpha] \right\}; \quad (7) \end{aligned}$$

$$\alpha_{YZ}(r, R, \theta, \varphi) = \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \left\{ \alpha_{zz}^m(r) - \alpha_{xx}^m(r) + \right. \\ \left. + \frac{\alpha}{R^3} (\alpha_{zz}^m(r) - \alpha_{xx}^m(r)) - \right. \\ \left. - \frac{3r^2 \alpha}{8R^5} [\alpha_{xx}^m(r) (5 \cos^2 \theta + 7) - \alpha_{zz}^m(r) (5 \cos^2 \theta - 9)] + \right. \\ \left. + \frac{\alpha}{R^6} (\alpha_{zz}^m(r) - \alpha_{xx}^m(r)) \times \right. \\ \left. \times [\alpha_{zz}^m(r) (3 \cos^2 \theta + 1) - \alpha_{xx}^m(r) (3 \cos^2 \theta - 4) - 2\alpha] \right\}. \quad (8)$$

В некоторых случаях представляют интерес не отдельные компоненты тензора поляризуемости комплекса, а его инварианты, такие как средняя поляризуемость

$$\alpha(r, R, \theta) = \frac{1}{3} [\alpha_{XX}(r, R, \theta, \varphi) + \alpha_{YY}(r, R, \theta, \varphi) + \alpha_{ZZ}(r, R, \theta, \varphi)] \quad (9)$$

и квадрат анизотропии поляризуемости

$$\gamma^2(r, R, \theta) = \frac{1}{2} \left\{ [\alpha_{XX}(r, R, \theta, \varphi) - \alpha_{YY}(r, R, \theta, \varphi)]^2 + \right. \\ \left. + [\alpha_{YY}(r, R, \theta, \varphi) - \alpha_{ZZ}(r, R, \theta, \varphi)]^2 + \right. \\ \left. + [\alpha_{ZZ}(r, R, \theta, \varphi) - \alpha_{XX}(r, R, \theta, \varphi)]^2 + \right. \\ \left. + 6[\alpha_{XY}(r, R, \theta, \varphi)]^2 + 6[\alpha_{YZ}(r, R, \theta, \varphi)]^2 + \right. \\ \left. + 6[\alpha_{XZ}(r, R, \theta, \varphi)]^2 \right\}. \quad (10)$$

Отметим, что в $\alpha(r, R, \theta)$ и $\gamma^2(r, R, \theta)$ отсутствует зависимость от угла φ , поскольку инварианты тензора поляризуемости не зависят от ориентации комплекса в пространстве как целого. В результате расчета получены следующие аналитические выражения для инвариантов тензора поляризуемости комплекса $X_2 \dots Y$:

$$\alpha(r, R, \theta) = \alpha^m(r) + \alpha + \frac{2\alpha\gamma^m(r)}{3R^3} (3 \cos^2 \theta - 1) + \\ + \frac{r^2 \alpha \gamma^m(r)}{4R^5} (35 \cos^4 \theta - 30 \cos^2 \theta + 3) + \\ + \frac{\alpha}{3R^6} \left\{ 6(\alpha^m(r))^2 + 6\alpha\alpha^m(r) + \gamma^m(r) (2\alpha^m(r) + \alpha) \times \right. \\ \left. \times (3 \cos^2 \theta - 1) + (\gamma^m(r))^2 (\cos^2 \theta + 1) \right\}, \quad (11)$$

$$\gamma^2(r, R, \theta) = (\gamma^m(r))^2 + \frac{2\alpha\gamma^m(r)}{R^3} (3\alpha^m(r) + \gamma^m(r)) \times \\ \times (3 \cos^2 \theta - 1) + \frac{3r^2 \alpha \gamma^m(r)}{4R^5} (3\alpha^m(r) + \gamma^m(r)) \times \\ \times (35 \cos^4 \theta - 30 \cos^2 \theta + 3) + \frac{\alpha}{R^6} \left\{ 36\alpha(\alpha^m(r))^2 + \right. \\ \left. + \alpha(\gamma^m(r))^2 (36 \cos^4 \theta - 33 \cos^2 \theta + 7) + \right.$$

$$\left. + 6\alpha^m(r) (\gamma^m(r))^2 (\cos^2 \theta + 1) + \right. \\ \left. + 3\alpha^m(r) \gamma^m(r) (5\alpha + \alpha^m(r)) (3 \cos^2 \theta - 1) + \right. \\ \left. + (\gamma^m(r))^3 (3 \cos^2 \theta + 1/3) \right\}, \quad (12)$$

где

$$\alpha^m(r) = \frac{1}{3} [\alpha_{xx}^m(r) + \alpha_{yy}^m(r) + \alpha_{zz}^m(r)]$$

– средняя поляризуемость молекулы X_2 и

$$\gamma^m(r) = \alpha_{xx}^m(r) - \alpha_{zz}^m(r)$$

– анизотропия ее тензора поляризуемости.

Результаты расчета поляризуемости комплекса $X_2 \dots Y$

Приведенные выше аналитические выражения были использованы для расчета компонентов и инвариантов тензора поляризуемости комплексов $X_2 \dots Y$ ($X=N$, O и $Y=He$, Ne , Ar , Kr , Xe) как функций углов θ и φ при равновесных расстояниях r_e и R_e , соответствующих наиболее устойчивой конфигурации комплекса. При расчетах использовались компоненты тензора поляризуемости молекул N_2 и O_2 $\alpha_{yy}(r) = \alpha_{xx}(r)$ и $\alpha_{zz}(r)$ из [7] и значения поляризуемости α атомов инертных газов из работ [8–11]. В качестве примера на рис. 2 приведены компоненты тензора поляризуемости комплекса $N_2 \dots Ar$ как функции углов θ и φ . Хорошо видно, что поляризуемость комплекса сильно изменяется при изменении ориентации молекулы N_2 , при этом диапазон изменения диагональных компонентов тензора поляризуемости значительно (примерно в 10 раз) превышает диапазон изменения его недиагональных компонентов. Приведенные на рис. 2 зависимости характерны и для других исследованных комплексов.

Представляет интерес рассмотреть характер изменения инвариантов тензора поляризуемости комплекса при различных углах θ . Для этого, по аналогии с работой [3], введем неаддитивные части инвариантов тензора поляризуемости комплекса

$$\Delta\alpha(r_e, R_e, \theta) = \alpha(r_e, R_e, \theta) - \alpha^m(r_e) - \alpha \quad (13)$$

и

$$\Delta\gamma^2(r_e, R_e, \theta) = \gamma^2(r_e, R_e, \theta) - (\gamma^m(r_e))^2. \quad (14)$$

Рассчитанные зависимости $\Delta\alpha(r_e, R_e, \theta)$ и $\Delta\gamma^2(r_e, R_e, \theta)$ от угла θ для комплексов $N_2 \dots Y$ ($Y=He$, Ne , Ar , Kr , Xe) приведены на рис. 3.

Анализ приведенных зависимостей позволяет сделать следующие выводы:

1. Величины инвариантов тензора поляризуемости комплекса в его наиболее устойчивой конфигурации ($\theta = 90^\circ$) меньше, чем суммы соответствующих величин инвариантов тензоров поляризуемости атома и молекулы, не взаимодействующих между собой.

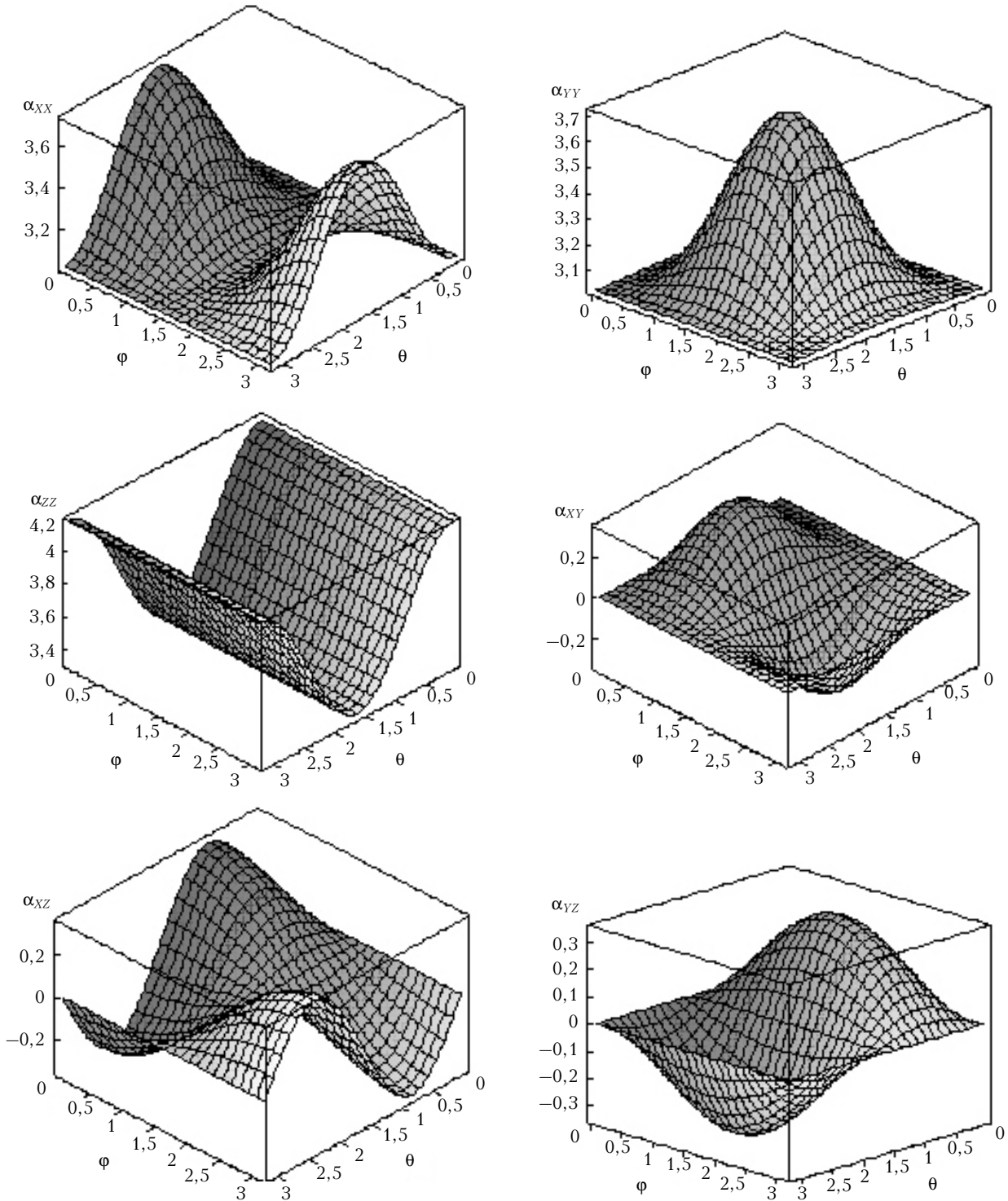


Рис. 2. Компоненты тензора поляризуемости (в \AA^3) комплекса $N_2 \dots Ag$ при $R = R_e$ и $r = r_e$. Углы θ и φ приведены в радианах

2. Значения инвариантов тензора поляризуемости комплекса увеличиваются при изменении его геометрии от T -конфигурации ($\theta = 90^\circ$) к L -конфигурации ($\theta = 0^\circ$).

3. Диапазон возможных изменений инвариантов тензора поляризуемости комплексов возрастает с увеличением поляризуемости α атома инертного газа.

4. Относительное изменение средней поляризуемости комплекса значительно меньше (на 1–2 порядка) относительного изменения его квадрата анизотропии поляризуемости:

$$\frac{(\Delta\alpha(r_e, R_e, \theta = 0^\circ) - \Delta\alpha(r_e, R_e, \theta = 90^\circ)) / (\alpha^N(r_e) + \alpha) \ll \ll (\Delta\gamma^2(r_e, R_e, \theta = 0^\circ) - \Delta\gamma^2(r_e, R_e, \theta = 90^\circ)) / (\gamma^N(r_e))^2.$$

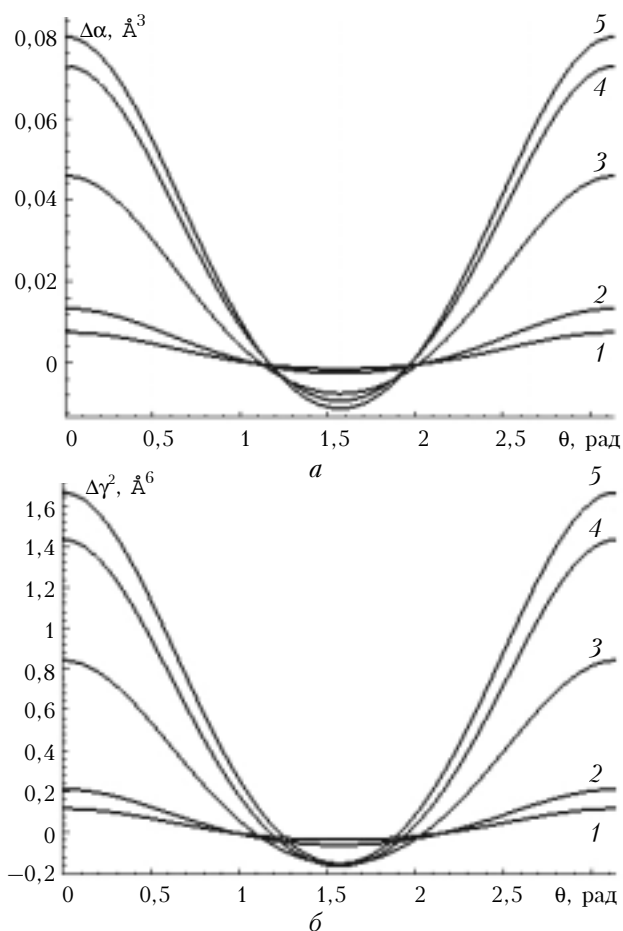


Рис. 3. Изменение неаддитивной части средней поляризуемости (а) и квадрата анизотропии поляризуемости (б) комплексов $N_2...Y$ при $R = R_e$ и $r = r_e$: 1 – $N_2...He$; 2 – $N_2...Ne$; 3 – $N_2...Ar$; 4 – $N_2...Kr$; 5 – $N_2...Xe$

Проведенный расчет компонентов и инвариантов тензора поляризуемости комплексов по формулам (3)–(8) и (11), (12) содержит погрешность, обусловленную ограничением ряда (1) членами $\sim R^{-6}$. Величины этих погрешностей для рассмотренных комплексов (при $R = R_e$) составляют $\sim 0,001 \text{ \AA}^3$ для компонентов тензора поляризуемости и средней поляризуемости и $\sim 0,01 \text{ \AA}^6$ для квадрата анизотропии поляризуемости. Следует отметить, что рассмотренные величины погрешностей не включают в себя погрешности, присущие модифицированной модели индуцированных точечных диполей. Однако проверка этой модели на примере комплекса $N_2...N_2$ показала, что она позволяет получать надежные значения поляризуемости ван-дер-ваальсовских комплексов [6].

M.A. Buldakov, V.N. Cherepanov, N.S. Nagornova. Polarizability of the van der Waals complexes $N_2...Y$ and $O_2...Y$ ($Y=He, Ne, Ar, Kr, Xe$). II. Unstable configurations.

The analytical dependence of the polarizability of the molecular complexes $X_2...Y$ on the distance between the atom Y and the molecule X_2 , on the internuclear separation of the molecule X_2 , and the orientation of the molecule X_2 in the complex has been theoretically investigated. The polarizability calculations of the complex were carried out within the framework of modified DID model, in which the molecule forming the dimer is represented as two anisotropic effective atoms. The polarizability of these effective atoms was determined by the polarizability of the molecule X_2 and its orientation in the dimer. The polarizabilities of the complexes $X_2...Y$ ($X_2=N_2, O_2$ and $Y=He, Ne, Ar, Kr, Xe$) have been calculated.

Поляризуемость ван-дер-ваальсовских комплексов $N_2...Y$ и $O_2...Y$ ($Y=He, Ne, Ar, Kr, Xe$). II.

Заклучение

В рамках модифицированной теории Зильберштейна получены аналитические выражения для поляризуемости комплексов $X_2...Y$. Полученные выражения отражают закономерности трансформации тензора поляризуемости этих комплексов в зависимости от межъядерного расстояния молекулы X_2 , расстояния между атомом Y и молекулой X_2 , а также от ориентации молекулы X_2 в комплексе. Результаты данной работы могут быть использованы для изучения влияния ван-дер-ваальсовских комплексов на свойства газовых сред при различных термодинамических условиях и, в частности, для определения роли комплексов $X_2...Y$ в физико-химических процессах атмосферы Земли.

1. *Van der Avoird A., Wormer P.E.S., Moszynski R.* From intermolecular potentials to the spectra of van der Waals molecules, and vice versa // *Chem. Rev.* 1994. V. 94. N 7. P. 1931–1974.
2. *Wormer P.E.S., van der Avoird A.* Intermolecular potentials, internal motions, and spectra of van der Waals and hydrogen-bonded complexes // *Chem. Rev.* 2000. V. 100. N 11. P. 4109–4143.
3. *Булдаков М.А., Черепанов В.Н., Нагорнова Н.С.* Поляризуемость ван-дер-ваальсовских комплексов $N_2...Y$ и $O_2...Y$ ($Y=He, Ne, Ar, Kr, Xe$). I. Устойчивые конфигурации // *Оптика атмосфер. и океана.* 2005. Т. 18. № 1–2. С. 17–22.
4. *Silberstein L.* Molecular refractivity and atomic interaction. 1 // *Phil. Mag.* 1917. V. 33. N 193. P. 92–128.
5. *Silberstein L.* Molecular refractivity and atomic interaction. 2 // *Phil. Mag.* 1917. V. 33. N 198. P. 521–533.
6. *Булдаков М.А., Королев Б.В., Матросов И.И., Черепанов В.Н.* Поляризуемость двух взаимодействующих молекул N_2 и O_2 // *Оптика и спектроскопия.* 2003. Т. 94. № 2. С. 214–219.
7. *Булдаков М.А., Черепанов В.Н.* Электронная поляризуемость молекул N_2 и O_2 : роль обменных взаимодействий // *Оптика атмосфер. и океана.* 2003. Т. 16. № 11. С. 1015–1020.
8. *Bishop D.M., Pipin J.* Static electric properties of H and He // *Chem. Phys. Lett.* 1995. V. 236. N 1–2. P. 15–18.
9. *Bishop D.M., Cybulski S.M.* Calculation of electromagnetic properties of the noble gases // *Chem. Phys. Lett.* 1993. V. 211. N 2–3. P. 255–258.
10. *Kumar A., Meath W.J.* Integrated dipole oscillator strengths and dipole properties for Ne, Ar, Kr, Xe, HF, HCl and HBr // *Can. J. Chem.* 1985. V. 63. N 7. P. 1616–1630.
11. *Maroulis G., Thakkar A.J.* Quadrupole polarizabilities and hyperpolarizabilities of Kr and Xe from fourth-order many-body perturbation theory calculations // *J. Chem. Phys.* 1988. V. 89. N 12. P. 7320–7323.