

М.А. Булдаков

## Поляризуемость двухатомных гомоядерных молекул: функция межъядерного расстояния

*Институт оптического мониторинга СО РАН, г. Томск*

Поступила в редакцию 1.07.2002 г.

Развит полуэмпирический метод расчета компонентов тензора поляризуемости двухатомных гомоядерных молекул как функции межъядерного расстояния  $R \in [0, \infty)$ . Метод базируется на установленной нами ранее функции поляризуемости молекулы при малых  $R$ , значениях поляризуемости и их производных в равновесном положении ядер молекулы и уточненной функции поляризуемости взаимодействующих ориентированных атомов при больших  $R$ , которая включает в себя учет изменения поляризуемости атомов при их сближении, а также учитывает мультипольные взаимодействия между ними. Учет мультипольного взаимодействия атомов проведен в рамках модели поляризуемости пары взаимодействующих диэлектрических шаров. Предложенный метод проверен на молекуле  $N_2$  и затем применен для расчета функций поляризуемости молекул  $N_2$  и  $O_2$ .

### Введение

Зависимость компонент тензора электронной поляризуемости молекул от взаимного расположения их ядер – одна из фундаментальных характеристик молекул, которая наряду с функцией дипольного момента определяет их оптические и электрические свойства. Нахождение таких зависимостей является сложной задачей даже для двухатомных молекул, тензор электронной поляризуемости которых имеет только две независимые компоненты и, соответственно, есть только две функции поляризуемости  $\alpha_{zz}(R)$  и  $\alpha_{xx}(R) = \alpha_{yy}(R)$ , где  $R$  – межъядерное расстояние, а ось  $Z$  совпадает с осью молекулы.

Современные представления о функциях поляризуемости двухатомных молекул базируются на основе аналитического описания этих функций для отдельных участков межъядерных расстояний и результатах *ab initio* расчетов. Так, в области малых значений  $R$  функции поляризуемости могут быть аналитически описаны с помощью модели объединенного атома [1]. В окрестности равновесного положения ядер молекулы функции поляризуемости принято задавать в виде рядов Тейлора, где параметры разложения (производные компонент тензора поляризуемости) могут быть определены экспериментально из спектров комбинационного рассеяния света [2]. Для описания функции поляризуемости при больших  $R$  используется классическая электростатическая модель Зильберштейна, в которой взаимодействующие атомы рассматриваются как индуцированные внешним электрическим полем точечные диполи, локализованные на ядрах молекулы [3, 4]. Такой подход позволяет вычислять функции поляризуемости молекул по известным значениям поляризуемостей образующих молекулу атомов.

Позднее в работах [5, 6] проведено уточнение модели Зильберштейна, состоящее в учете изменений поляризуемостей самих атомов по мере их сближения.

Квантово-химические же расчеты функций поляризуемости, как правило, проводятся для относительно небольших участков межъядерных расстояний в окрестности равновесного расстояния  $R_e$  двухатомных молекул (например, [7, 8]), и только для молекулы  $N_2$  такие расчеты проведены для всего диапазона изменений  $R$  [9, 10], где использовались специальные *ab initio* методы, применимые только к одно- и двухэлектронным молекулам. Кроме этого имеется значительное количество работ по *ab initio* расчетам функций поляризуемости пар взаимодействующих атомов благородных газов (например, [11] и цитируемые в ней работы).

Эти исследования вызвали интерес к разработке полуэмпирических методов, пригодных для расчета функций поляризуемости любых двухатомных молекул при произвольных межъядерных расстояниях. В настоящее время известны всего три таких метода [12–14], которые различаются степенью и способом использования имеющейся информации. Так, предложенные в [12] формулы хотя и позволяют получить общее представление о функциях поляризуемости молекулы  $N_2$ , но не обеспечивают физически корректного их поведения ни при малых, ни при больших межъядерных расстояниях.

Метод построения функций поляризуемости работы [13] основан на эмпирически найденных авторами закономерностях поведения этих функций в окрестности их максимумов и известных асимптотических зависимостях при больших  $R$  [5, 6]. Однако данный метод не дает корректного поведения функций поляризуемости при малых  $R$ , а универсальность установленных корреляций вызывает сомнение. Метод расчета функций поляризуемости в работе [14] основан на использовании асимптотик этих функций на малых [1] и больших  $R$  [3, 4] и их производных в положении равновесия молекул. К недостаткам этого метода прежде всего следует отнести занижение величин функций поляризуемости в области средних значений  $R$ .

В данной работе предлагается развитие предложенного в [14] полуэмпирического метода, состоящее в уточнении поведения функций поляризуемости в области средних значений  $R$  путем учета изменения поляризуемости атомов при их сближении, а также учета мультипольных взаимодействий между ними.

## Поляризуемость пары взаимодействующих диэлектрических шаров

Для учета мультипольных взаимодействий между двумя идентичными атомами воспользуемся моделью двух взаимодействующих диэлектрических шаров [15, 16]. В этой модели поляризуемость двух диэлектрических шаров радиуса  $r_0$ , расположенных на оси  $Z$  декартовой системы координат на расстоянии  $R$  друг от друга и помещенных в постоянное электрическое поле, может быть представлена в виде [16]:

$$\alpha_{zz}(R) = 2\alpha_0 \frac{\varepsilon+2}{\varepsilon-1} (2\text{sh } \eta_0)^3 \times \sum_{p=0}^{\infty} \left[ \frac{2}{\varepsilon+1} \right]^p \sum_{n=1}^{\infty} n\chi_n^{(p)}(R), \quad (1)$$

$$\alpha_{xx}(R) = 2\alpha_0 \frac{\varepsilon+2}{\varepsilon-1} (2\text{sh } \eta_0)^3 \times \sum_{p=0}^{\infty} \left[ \frac{2}{\varepsilon+1} \right]^p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)}{2} \omega_n^{(p)}(R), \quad (2)$$

где  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость шара;  $\alpha_0$  – поляризуемость шара;  $\text{ch } \eta_0 = R/(2r_0)$ , а коэффициенты  $\chi_n^{(p)}(R)$  и  $\omega_n^{(p)}(R)$  заданы громоздкими рекуррентными соотношениями (27) – (35) в [16]. В рамках данной модели выражения (1), (2) являются точными в диапазоне  $R \in (2r_0, \infty)$ , однако расчет поляризуемостей с их помощью возможен только в численном виде в силу того, что они содержат бесконечные слабосходящиеся ряды.

Для аналитического представления функций поляризуемости  $\alpha_{zz}(R)$  и  $\alpha_{xx}(R)$  в данной статье проведено разложение выражений (1), (2) в степенной ряд по малому параметру  $\delta = r_0/R$ , и после выполнения суммирования по  $p$  и  $n$  получены следующие простые асимптотические соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_{zz}(R)}{2\alpha_0} &= 1 + 2 \frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} \delta^3 + \\ &+ 4 \left( \frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} \right)^2 \delta^6 + 18 \frac{(\varepsilon-1)^2}{(\varepsilon+2)(2\varepsilon+3)} \delta^8 + \\ &+ 8 \left( \frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} \right)^3 \delta^9 + 48 \frac{(\varepsilon-1)^2}{(\varepsilon+2)(3\varepsilon+4)} \delta^{10} + \dots, \quad (3) \\ \frac{\alpha_{xx}(R)}{2\alpha_0} &= 1 - \frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} \delta^3 + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \left( \frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} \right)^2 \delta^6 + 6 \frac{(\varepsilon-1)^2}{(\varepsilon+2)(2\varepsilon+3)} \delta^8 - \\ &- \left( \frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} \right)^3 \delta^9 + 18 \frac{(\varepsilon-1)^2}{(\varepsilon+2)(3\varepsilon+4)} \delta^{10} + \dots. \quad (4) \end{aligned}$$

Воспользовавшись соотношением

$$\alpha_0 = \frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} r_0^3, \quad (5)$$

перепишем выражения (3) и (4) в более удобном виде:

$$\begin{aligned} \alpha_{zz}(R) &= 2\alpha_0 + 4\alpha_0^2 \frac{1}{R^3} + \\ &+ 8\alpha_0^3 \frac{1}{R^6} + 18\alpha_0^3 \left( 1 + \frac{1}{2\varepsilon+3} \right) \frac{r_0^2}{R^8} + \\ &+ 16\alpha_0^4 \frac{1}{R^9} + 32\alpha_0^3 \left( 1 + \frac{2}{3\varepsilon+4} \right) \frac{r_0^4}{R^{10}} + \dots, \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_{xx}(R) &= 2\alpha_0 - 2\alpha_0^2 \frac{1}{R^3} + \\ &+ 2\alpha_0^3 \frac{1}{R^6} + 6\alpha_0^3 \left( 1 + \frac{1}{2\varepsilon+3} \right) \frac{r_0^2}{R^8} - \\ &- 2\alpha_0^4 \frac{1}{R^9} + 12\alpha_0^3 \left( 1 + \frac{2}{3\varepsilon+4} \right) \frac{r_0^4}{R^{10}} + \dots. \quad (7) \end{aligned}$$

Из формул (6), (7) видно, что функции поляризуемости пары взаимодействующих диэлектрических шаров кроме хорошо известных слагаемых модели Зильберштейна содержат дополнительные члены, обусловленные мультипольным взаимодействием. Отметим, что при  $\varepsilon \rightarrow \infty$  полученные выражения соответствуют модели металлических шаров [17].

## Метод построения функций поляризуемости

Метод построения функций поляризуемости двухатомных молекул включает в себя выполнение трех положений.

1. Функции поляризуемости молекулы в области малых значений  $R$  задаются в виде [1]:

$$\alpha_{ii}(R) = \alpha_{ii}^{(0)} + A_{ii}R^2 + B_{ii}R^3 + C_{ii}R^4, \quad (8)$$

где  $\alpha_{ii}^{(0)}$  – компоненты тензора поляризуемости соответствующего состояния объединенного атома, а  $A_{ii}$ ,  $B_{ii}$  и  $C_{ii}$  – константы для данного электронного состояния молекулы, которые находятся из известных значений компонент тензора поляризуемости  $(\alpha_{ii})_e$  и их первых  $(\alpha'_{ii})_e$  и вторых производных  $(\alpha''_{ii})_e$  по  $\xi = (R - R_e)/R_e$  при  $R = R_e$  [1, 14]. Терм объединенного атома определяется по известным правилам корреляции молекулярных термов с термами объединенных атомов.

2. Функции поляризуемости молекулы в области больших значений  $R$  задаются в виде

$$\alpha_{zz}(R) = 2\alpha_{zz}^0 + 4(\alpha_{zz}^0)^2 \frac{1}{R^3} +$$

$$\begin{aligned}
& + \left( 8(\alpha_{zz}^0)^3 + \frac{7\gamma C_6}{9\alpha_0} \right) \frac{1}{R^6} + 18\alpha_0^3 \left( 1 + \frac{1}{2\varepsilon + 3} \right) \frac{r_0^2}{R^8} + \\
& + 16(\alpha_{zz}^0)^4 \frac{1}{R^9} + 32\alpha_0^3 \left( 1 + \frac{2}{3\varepsilon + 4} \right) \frac{r_0^4}{R^{10}}, \quad (9) \\
\alpha_{xx}(R) = & 2\alpha_{xx}^0 - 2(\alpha_{xx}^0)^2 \frac{1}{R^3} + \\
& + \left( 2(\alpha_{xx}^0)^3 + \frac{4\gamma C_6}{9\alpha_0} \right) \frac{1}{R^6} + 6\alpha_0^3 \left( 1 + \frac{1}{2\varepsilon + 3} \right) \frac{r_0^2}{R^8} - \\
& - 2(\alpha_{xx}^0)^4 \frac{1}{R^9} + 12\alpha_0^3 \left( 1 + \frac{2}{3\varepsilon + 4} \right) \frac{r_0^4}{R^{10}}, \quad (10)
\end{aligned}$$

где  $\alpha_{ii}^0$  – компоненты тензора поляризуемости атомов, на которые распадается молекула [14], а поляризуемость шара  $\alpha_0$  равна средней поляризуемости каждого из этих атомов. Члены в (9) и (10), содержащие коэффициент ван-дер-ваальсовского взаимодействия  $C_6$  и среднюю вторую гиперполяризуемость  $\gamma$ , введены Букингемом в [6] и отражают изменения поляризуемости атомов при их сближении за счет дисперсионных взаимодействий между ними.

3. Сшивание функций поляризуемости, задаваемых соотношениями (8) – (10), проводится с помощью полиномов пятой степени, коэффициенты которых находятся из условий равенства в точках сшивания ( $r_1$  и  $r_2$ ) значений полиномов и функций поляризуемости, а также их первых и вторых производных. Выбор точек сшивания допускает некоторый произвол, приводящий к небольшим изменениям функций поляризуемости между точками сшивания.

## Функции поляризуемости молекул $H_2$ , $N_2$ и $O_2$

Проверка описанного выше метода была проведена на молекуле  $H_2$ , для которой известны надежные ab initio расчеты функций поляризуемости [10]. На рис. 1 приведены рассчитанные функции поляризуемости молекулы  $H_2$ , различающиеся полнотой учета межатомных взаимодействий в выражениях (9) и (10).

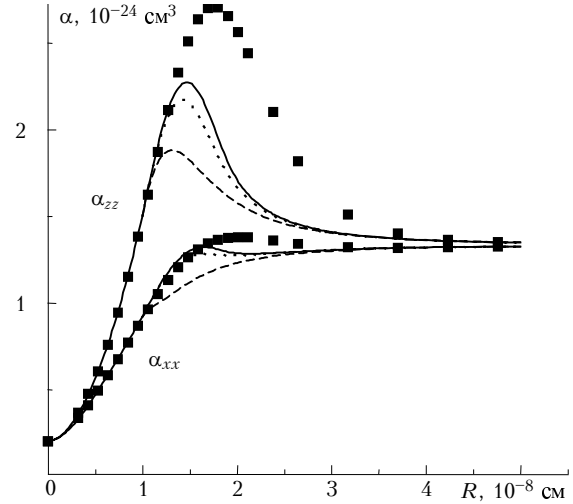


Рис. 1. Функции поляризуемости молекулы  $H_2$ : штриховые линии – расчет [14]; пунктирные линии – данная работа при  $r_0 = 0$ ; сплошные линии – данная работа при  $r_0 \neq 0$ ; точки – ab initio расчет [10]

Значения атомных и молекулярных констант, использованные при расчетах, представлены в таблице.

Параметры для расчета функций поляризуемости молекул  $H_2$ ,  $N_2$  и  $O_2$

Молекула	$H_2$	$N_2$	$O_2$	
Терм	$^1\Sigma_g^+$	$^1\Sigma_g^+$	$^3\Sigma_g^-$	
$(\alpha_{xx})_e, \text{Å}^3$	0,679 <sup>a</sup>	1,53 [2]	1,25 [2]	
$(\alpha'_{xx})_e, \text{Å}^3$	0,669 <sup>a</sup>	1,12 [2]	0,70 [2]	
$(\alpha''_{xx})_e, \text{Å}^3$	0,121 <sup>a</sup>	0,33 [2]	0,80 <sup>б</sup>	
$(\alpha_{zz})_e, \text{Å}^3$	0,947 <sup>a</sup>	2,24 [2]	2,33 [2]	
$(\alpha'_{zz})_e, \text{Å}^3$	1,372 <sup>a</sup>	3,35 [2]	3,89 [2]	
$(\alpha''_{zz})_e, \text{Å}^3$	1,221 <sup>a</sup>	2,93 [2]	8,60 <sup>б</sup>	
Объединенный атом	He	Si	S	
Терм	$^1S$	$^1D (M_L = 0)$	$^3P (M_L = 0)$	
$\alpha_{xx}^{(0)}, \text{Å}^3$	0,205 [18]	5,62 [19]	2,68 [19]	
$\alpha_{zz}^{(0)}, \text{Å}^3$	0,205 [18]	7,50 [19]	3,35 [19]	
Изолированный атом	H	N	O	
Терм	$^1S$	$^4S$	$^3P (M_L = 0)$	$^3P (M_L = \pm 1)$
$\alpha_{xx}^0, \text{Å}^3$	0,6668 [18]	1,101 <sup>в</sup>	0,755 <sup>в</sup>	0,825 <sup>в</sup>
$\alpha_{zz}^0, \text{Å}^3$	0,6668 [18]	1,101 <sup>в</sup>	0,895 <sup>в</sup>	0,755 <sup>в</sup>
$\alpha_0, \text{Å}^3$	0,6668	1,101	0,802	
$r_0, \text{Å}$	1,1 [20]	1,5 [20]	1,4 [20]	
$\varepsilon$	4,01 <sup>г</sup>	2,45 <sup>г</sup>	2,24 <sup>г</sup>	
$\gamma C_6, \text{Å}^{12}$	4,18 <sup>д</sup>	10,51 <sup>д</sup>	5,03 <sup>д</sup>	
$r_1, \text{Å}$	1,0	1,1	1,2	
$r_2, \text{Å}$	1,9	2,0	2,0	

<sup>a</sup> Рассчитано из данных [10]; <sup>б</sup> значения, уточненные авторами работы [2]; <sup>в</sup> взято из таблицы работы [14]; <sup>г</sup> вычислено по формуле (5); <sup>д</sup> значения  $\gamma$  и  $C_6$  для H взяты из [6],  $\gamma$  для N и O – из [21],  $C_6$  для N и O – из [22].

Анализ полученных зависимостей показывает, что учет дисперсионных и мультипольных взаимодействий между атомами Н заметно улучшает по сравнению с [14] функции поляризуемости в области средних значений  $R$  и приближает их к точным *ab initio* значениям [10], при этом функция  $\alpha_{zz}(R)$  более чувствительна к учету дисперсионных и мультипольных взаимодействий, чем  $\alpha_{xx}(R)$ . Следует отметить, что в рамках данной модели полного совпадения с *ab initio* расчетами достичь невозможно из-за неучета обменных взаимодействий между атомами.

Предложенный метод расчета функций поляризуемости был также применен к молекулам  $N_2$  и  $O_2$  (рис. 2 – 5), при этом для молекулы кислорода рассмотрены оба канала ее распада. Найденные функции поляризуемости для данных молекул показывают, что учет дисперсионных и мультипольных взаимодействий также приводит к увеличению их значений в диапазоне межъядерных расстояний  $1 \div 3 \text{ \AA}$ .

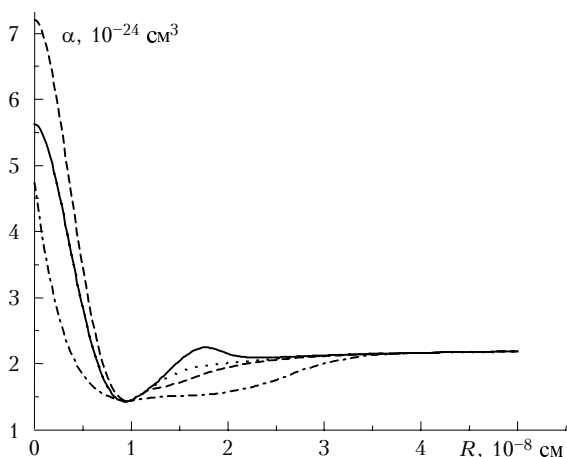


Рис. 2. Функция поляризуемости  $\alpha_{xx}(R)$  молекулы  $N_2$ : штриховая линия – расчет [14]; пунктирная линия – данная работа при  $r_0 = 0$ ; сплошная линия – данная работа при  $r_0 \neq 0$ ; штрихпунктирная линия – расчет [13]

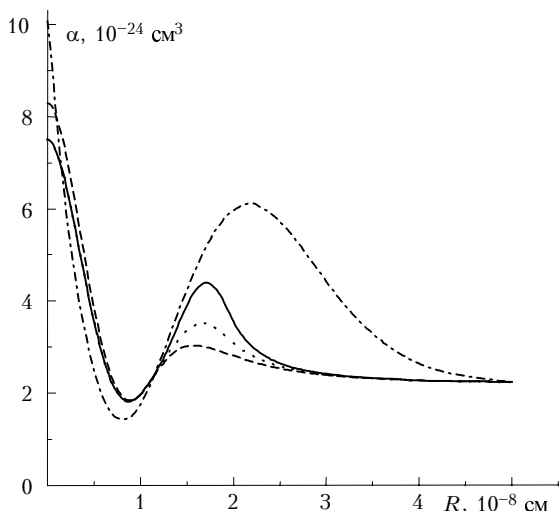


Рис. 3. Функция поляризуемости  $\alpha_{zz}(R)$  молекулы  $N_2$ : штриховая линия – расчет [14]; пунктирная линия – данная работа при  $r_0 = 0$ ; сплошная линия – данная работа при  $r_0 \neq 0$ ; штрихпунктирная линия – расчет [13]

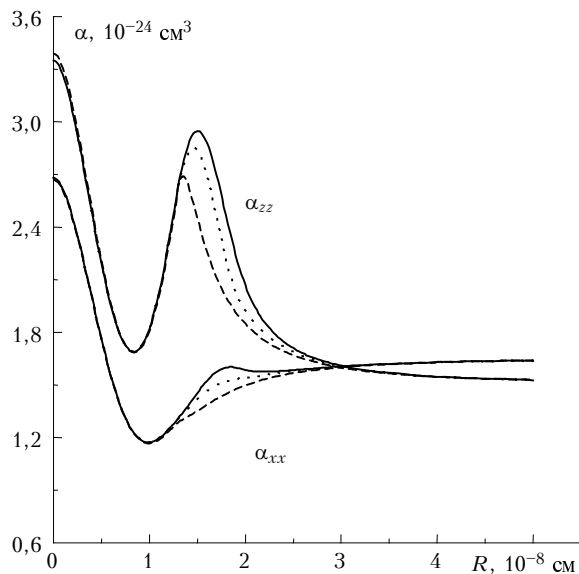


Рис. 4. Функции поляризуемости молекулы  $O_2$  (атомы О в состояниях с  $|M_L| = 1$ ): штриховые линии – расчет [14]; пунктирные линии – данная работа при  $r_0 = 0$ ; сплошные линии – данная работа при  $r_0 \neq 0$

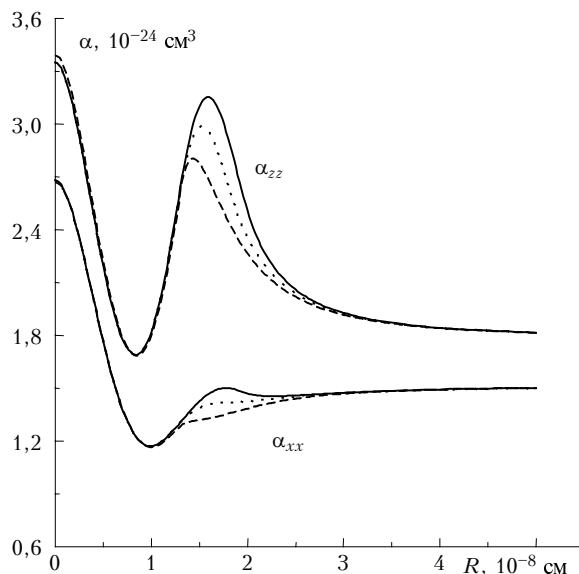


Рис. 5. Функции поляризуемости молекулы  $O_2$  (атомы О в состояниях с  $|M_L| = 0$ ): штриховые линии – расчет [14]; пунктирные линии – данная работа при  $r_0 = 0$ ; сплошные линии – данная работа при  $r_0 \neq 0$

Исходя из анализа функций поляризуемости молекулы  $N_2$ , полагаем, что и для молекул  $N_2$  и  $O_2$  полученные функции поляризуемости в области средних значений  $R$  надо рассматривать, скорее, как их нижние границы. Некоторые различия полученных функций поляризуемости с функциями из [14] в области малых  $R$  связаны с использованием в данной работе других значений поляризуемостей объединенных атомов Si и S.

Представляет интерес сравнить полученные функции поляризуемости молекулы  $N_2$  с рассчитанными альтернативным методом, в котором сделана попытка

учесть обменные взаимодействия с помощью найденных корреляционных соотношений [13]. Отвлекаясь от некоторых различий функций поляризуемости в области малых  $R$ , связанных с различным выбором значений  $\alpha_{xx}^{(0)}$  и  $\alpha_{zz}^{(0)}$  атома Si, обращает на себя внимание неоправданное занижение  $\alpha_{xx}(R)$  для  $R \approx 1 \div 3 \text{ \AA}$  (см. рис. 2). Причиной этого, по нашему мнению, является необоснованное распространение на атомы азота корреляций, обнаруженных для молекул, которые состоят преимущественно из атомов первой группы Периодической системы элементов Д.И. Менделеева. Функции поляризуемости из [12] на рис. 2, 3 не приведены, так как в настоящее время они представляют только исторический интерес.

### Заключение

В данной статье показано, что уточнение предложенного в [14] полуэмпирического метода расчета функций поляризуемости двухатомных молекул, состоящее в учете дисперсионных и мультипольных взаимодействий между отдельными атомами, позволяет заметно улучшить функции поляризуемости в области средних значений  $R$ . К сожалению, использование модели поляризуемости двух взаимодействующих одинаковых диэлектрических шаров для учета мультипольных взаимодействий между атомами ограничивает область применения метода только двухатомными гомоядерными молекулами. Несмотря на то что предложенный метод ориентирован на молекулы, распадающиеся на атомы в  $S$ -состояниях, он может давать разумные результаты и для случая, когда атомы не обладают сферически симметричным распределением заряда (например, молекула кислорода).

1. Булдаков М.А., Васильев Н.Ф., Матросов И.И. Поляризуемость двухатомной молекулы при малых межъядерных расстояниях // Оптика и спектроскопия. 1993. Т. 75. № 3. С. 597–603.
2. Buldakov M.A., Ippolitov I.I., Korolev B.V., Matrosov I.I., Cheglov A.E., Cherepanov V.N., Makushkin Yu.S., Ulenikov O.N. Vibration rotation Raman spectroscopy of gas media // Spectrochimica Acta. Part A. 1996. V. 52. N 8. P. 995–1007.
3. Silberstein L. Molecular refractivity and atomic interaction. 1 // Phil. Mag. 1917. V. 33. N 193. P. 92–128.
4. Silberstein L. Molecular refractivity and atomic interaction. 2 // Phil. Mag. 1917. V. 33. N 198. P. 521–533.

#### *M.A. Buldakov. Polarizability of diatomic molecules: internuclear dependence.*

The semiempirical calculation method of the polarizability tensor components for diatomic homonuclear molecules as a function of internuclear distance  $R \in [0, \infty)$  was developed. The method is based on the known polarizability function of a molecule for small  $R$ , the polarizability values and their derivatives at the equilibrium internuclear distance and improved polarizability functions of oriented interacting atoms at large  $R$ . The latter takes into account the change of the atom polarizabilities at the approach of atoms and the atomic multipole interactions. The atomic multipole interactions were taken into account using the dielectric sphere couple model. The method proposed was tested with the  $H_2$  molecule as a case study and applied to calculation of the polarizability functions of  $N_2$  and  $O_2$  molecules.

5. Buckingham A.D. The polarizability of a pair of interacting atoms // Trans. Faraday Soc. 1956. V. 52. N 8. P. 1035–1041.
6. Buckingham A.D., Clarke K.L. Long-range effects of molecular interactions on the polarizability of atoms // Chem. Phys. Lett. 1978. V. 57. N 3. P. 321–325.
7. Langhoff S.R., Bauschlicher C.W. Jr., Chong D.P. Theoretical study of the effects of vibrational-rotational interactions on the Raman spectrum of  $N_2$  // J. Chem. Phys. 1983. V. 78. N 9. P. 5287–5292.
8. Hettema H., Wormer S.P.S., Jorgensen P., Jensen H.J.Aa., Heldaker T. Frequency-dependent polarizabilities of  $O_2$  and van der Waals coefficients of dimers containing  $O_2$  // J. Chem. Phys. 1994. V. 100. N 2. P. 1297–1302.
9. Kolos W., Wolniewicz L. Polarizability of the hydrogen molecule // J. Chem. Phys. 1967. V. 46. N 4. P. 1426–1432.
10. Ruchlewski J. An accurate calculation of the polarizability of the hydrogen molecule and its dependence on rotation, vibration and isotopic substitution // Mol. Phys. 1980. V. 41. N 4. P. 833–842.
11. Meinander N., Tabisz G.C., Zoppi M. Moment analysis in depolarized light scattering: Determination of a single-parameter empirical pair polarizability anisotropy for Ne, Ar, Kr, Xe, and  $CH_4$  // J. Chem. Phys. 1985. V. 84. N 6. P. 3005–3013.
12. Temkin A. Internuclear dependence of the polarizability of  $N_2$  // Phys. Rev. A. 1978. V. 17. N 3. P. 1232–1235.
13. Varandas A.J.C., Rodrigues S.P.J. Internuclear dependence of static dipole polarizability in diatomic molecules // Chem. Phys. Lett. 1995. V. 245. N 1. P. 66–74.
14. Булдаков М.А., Матросов И.И. Поляризуемость двухатомной молекулы как функция межъядерного расстояния // Оптика и спектроскопия. 1995. Т. 78. № 1. С. 26–30.
15. Goyette A., Navon A. Two dielectric spheres in an electric field // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. N 10. P. 4320–4327.
16. Godet J.L., Dumon B. Dielectric-sphere-couple model for noble-gas pair polarizability // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. N 9. P. 5680–5686.
17. Levine H.B., McQuarrie D.A. Dielectric constant of simple gases // J. Chem. Phys. 1968. V. 49. N 9. P. 4181–4187.
18. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 240 с.
19. Andersson K., Sadley A.J. Electric dipole polarizabilities of atomic valence states // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. N 5. P. 2356–2362.
20. Полинг Л., Полинг П. Химия. М.: Мир, 1978. 688 с.
21. Das A.K., Thakkar A.J. Static response properties of second-period atoms: coupled cluster calculations // J. Phys. B. 1998. V. 31. N 10. P. 2215–2223.
22. Zeiss G.D., Meath W.J. Dispersion energy constants  $C_6(A, B)$ , dipole oscillator strength sums and refractivities for Li, N, O,  $H_2$ ,  $NH_3$ ,  $H_2O$ , NO and  $N_2O$  // Mol. Phys. 1977. V. 33. N 4. P. 1155–1176.