

ПРОБЛЕМА СТРОЕНИЯ (СОСТОЯНИЯ ГЕЛИЯ) В МАЛЫХ КЛАСТЕРАХ $\text{He}_N\text{-CO}$

A. V. Потапов^{a,b}, B. A. Панфилов^a, Л. А. Сурин^{a,b}, Б. С. Думеш^a*

^a Институт спектроскопии Российской академии наук
142190, Троицк, Московская обл., Россия

^b I. Physikalisches Institut, University of Cologne
50937, Cologne, Germany

Поступила в редакцию 15 апреля 2010 г.

Теория возмущений второго порядка, развитая для расчета уровней энергии бинарного комплекса $\text{He}-\text{CO}$, была применена для малых кластеров $\text{He}_N\text{-CO}$ с $N = 2\text{--}4$, при этом атомы гелия рассматривались как единый связанный объект. Потенциал взаимодействия между молекулой CO и He_N представлялся в виде линейного разложения по полиномам Лежандра, причем нулевым приближением был выбран предел свободных вращений, а угловая зависимость взаимодействия рассматривалась как малое возмущение. Путем сравнения расчетных вращательных переходов с экспериментальными и подбора параметров потенциала оптимальным образом достигнуто хорошее согласие рассчитанных уровней энергии с определенными из эксперимента (отклонение менее 1%). В результате получен вид угловой анизотропии потенциала взаимодействия для разных кластеров. Оказалось, что положение минимума потенциальной энергии плавно сдвигается от значения угла $\theta = 100^\circ$ между осью CO и осью кластера в $\text{He}-\text{CO}$ к $\theta = 180^\circ$ (кислородный конец) в He_3-CO и He_4-CO . В предположении цилиндрической симметрии распределения атомов гелия относительно оси кластера форму последних можно представить как пирамиду с молекулой CO в вершине.

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение кластеров привлекает к себе большое внимание, поскольку позволяет связать между собой квантовый микромир отдельных атомов и молекул и термодинамический макромир конденсированных сред. Особое место занимают исследования гелиевых нанокапель (состоящих из $10^3\text{--}10^4$ атомов гелия) [1] и малых гелиевых кластеров (содержащих менее 100 атомов гелия) [2] с внедренной молекулой-хромофором, направленные на более глубокое понимание одного из интереснейших квантовомеханических явлений — сверхтекучести жидкого гелия. Ответы на следующие вопросы представляют несомненный фундаментальный интерес:

- 1) сколько нужно атомов гелия для наступления сверхтекучести;
- 2) какова связь между сверхтекучестью и обнаруженным уже для нескольких атомов гелия проскальзыванием вращающейся молекулы с частично

присоединенными к ней атомами гелия относительно остального гелиевого окружения.

Упомянутое проскальзывание было обнаружено методами вращательной и колебательно-вращательной спектроскопии при исследовании малых гелиевых кластеров с внедренной молекулой-хромофором [3–10]. Такие кластеры создаются при расширении в вакуум сверхзвуковой газовой струи, содержащей гелий и молекулы примеси, при конечной температуре струи 0.3–0.1 К. В отличие от линий гелиевых нанокапель, линии разных кластеров легко разрешаются, и можно проследить зависимость различных физических свойств кластеров от их размера или состава. В частности, по спектрам определяется эффективный момент инерции кластера и сдвиг частоты какого-либо фундаментального колебания внедренной молекулы, обусловленный ее взаимодействием с окружающим гелием. К настоящему времени изучены системы $\text{He}_N\text{-X}$, где X — молекула OCS [3], CO₂ [4], N₂O [5, 6], CO [7–9], HCN [10], а значение N плавно меняется от 2 до примерно 70.

*E-mail: potapov@isan.troitsk.ru

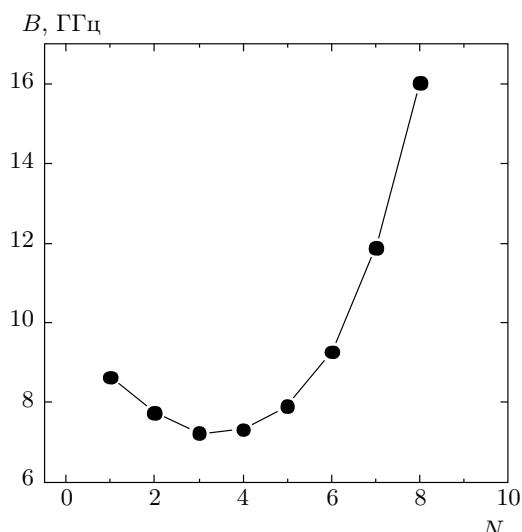


Рис. 1. Зависимость эффективной вращательной константы B от количества атомов гелия в кластере $\text{He}_N\text{-CO}$

Для всех систем получена немонотонная зависимость эффективной вращательной константы B (обратно пропорциональной моменту инерции кластера) от количества присоединенных атомов гелия. Начиная с определенного размера кластера (для молекулы OCS, например, с десяти атомов гелия [3]) наблюдается рост B (уменьшение момента инерции), что означает проскальзывание вращающегося хромофора с гелиевой «шубой» относительно остального кластера. Это явление напоминает эффект Андроникашилии, связанный с неувлечениеием сверхтекучего гелия движущимися в нем телами [11], что и позволило связать проскальзывание с проявлением сверхтекучести на микроскопическом уровне. Здесь «рекордсменом» является система $\text{He}_N\text{-CO}$, в которой рост B при вращении молекулы CO начинается в кластере всего из четырех атомов гелия (рис. 1) [9].

Как показывают эксперименты и теоретические расчеты для кластеров, допированных трехатомными линейными молекулами, первые пять атомов гелия образуют довольно жесткое кольцо в экваториальной плоскости молекулы-хромофора [12–16]. Атомы кольца не колеблются вместе с хромофором, но за счет ван-дер-ваальсова притяжения несколько увеличивают его жесткость, и частота колебания внедренной молекулы растет линейно с количеством присоединенных атомов гелия до $N = 5$. Следующие атомы располагаются на периферии хромофора и дают больший вклад в колеблющуюся массу. Со-

ответственно, частота колебания убывает также линейно, по крайней мере, до заполнения первой координационной сферы ($N \approx 14$ –16). Минимум центробежного искажения для кластеров с пятью атомами гелия [3–6] также указывает на максимальную жесткость этой конфигурации. Таким образом, такое кольцо вращается вместе с хромофором и в основном определяет величину вращательной константы B в больших кластерах и нанокаплях.

Зависимость сдвига частоты колебания молекулы CO от количества атомов гелия имеет совершенно другой вид по сравнению с указанными выше трехатомными молекулами. Частота колебания CO линейно уменьшается для кластеров, содержащих как минимум до девяти атомов [17], что свидетельствует о диффузном характере строения кластера, при котором нет существенных различий в расположении разных атомов. Для получения более полной информации о структуре малых кластеров $\text{He}_N\text{-CO}$ мы измерили дополнительно к вращательным переходам, начинаяющимся с самого нижнего вращательного уровня $J = 0$ [9], и переходы с первого возбужденного вращательного уровня $J = 1$ для $N = 2$ –4 [17]. Далее мы применили теорию возмущений, развитую для бинарного комплекса He–CO [18], для описания схемы энергетических уровней малых кластеров и определения угловой анизотропии потенциала взаимодействия в этих кластерах.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Гелиевые кластеры образуются в холодной сверхзвуковой газовой струе. Для ее получения смесь из газообразного гелия с небольшой (менее 0.1 %) примесью молекул хромофора CO через импульсное сверхзвуковое сопло вытекает в вакуумную камеру, где адиабатически расширяется. При стартовом давлении 50 атм и комнатной температуре сопла конечная вращательная температура в гелиевой струе доходит до 0.3 К, а при охлаждении сопла парами жидкого азота — до 0.1 К [9]. При поиске и регистрации переходов с самого нижнего уровня $J = 0$ стартовое давление составляло 50–80 атм, а температура сопла уменьшалась до 180 К. Для измерения «теплых» переходов с первого возбужденного уровня $J = 1$ охлаждение сопла не использовалось, а давление газовой смеси на входе в сопло составляло 15–20 атм.

Измерения вращательных спектров для кластеров $\text{He}_N\text{-CO}$ с $N = 2$ –4 проводились в диапазоне частот 110–150 ГГц с помощью внутристирезонаторного спектрометра на базе оротрона [19]. Доброт-

ность колебательной системы оротрона (резонатор Фабри–Перо) $Q \approx 10^4$ обеспечивает порядка ста проходов генерируемого оротроном излучения через молекулярный пучок и обуславливает высокую чувствительность, необходимую для данных экспериментов. Точность определения частоты переходов оценивается нами в 50 кГц.

3. ПРЕДЕЛ СВОБОДНЫХ ВРАЩЕНИЙ, КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА И ПРАВИЛА ОТБОРА

Система $\text{He}_N\text{-CO}$ является уникальной среди всех изученных систем He_N -молекула благодаря чрезвычайно малой энергии связи CO с гелием (9 К), сравнимой с химическим потенциалом жидкого гелия (7.5 К). В бинарном комплексе He-CO молекула CO вращается почти свободно [18, 20, 21]. В связи с этим модель квазижесткого волчка не применима для описания его уровней энергии. Альтернативой является модель свободных вращений мономера внутри комплекса. В данной модели существуют два независимых вращения: мономера (в нашем случае CO) с угловым моментом j и всего комплекса как единого целого с угловым моментом l . Энергия уровней в первом приближении не зависит явно от полного момента комплекса $\mathbf{J} = \mathbf{j} + \mathbf{l}$ и определяется только числами j и l :

$$E = Bl(l+1) + bj(j+1), \quad (1)$$

где B и b — вращательные константы соответственно комплекса и мономера. Правила отбора при свободном вращении мономера следующие:

$$\Delta J = 0, \pm 1, \quad \Delta j = \pm 1, \quad \Delta l = 0.$$

Уровни с одинаковыми j и l , но разными J в пределе свободных вращений вырождены, но любое возмущение снимает это вырождение, а смешение волновых функций за счет взаимодействия He и CO приводит к снятию запрета для $\Delta l = \pm 1$. Соответствующая схема вращательных уровней энергии и возможные переходы для комплекса He-CO показаны на рис. 2. Штриховыми линиями обозначены положения уровней энергии комплекса He-CO в пределе свободных вращений.

Как видно из рис. 2, двум видам вращения (мономера и всего комплекса как единого целого) соответствуют и два типа переходов: те, которые включают изменение j (b -типа), и которые включают изменение l (a -типа). Здесь обозначения « a » и « b » соотносятся с соответствующими компонентами диполь-

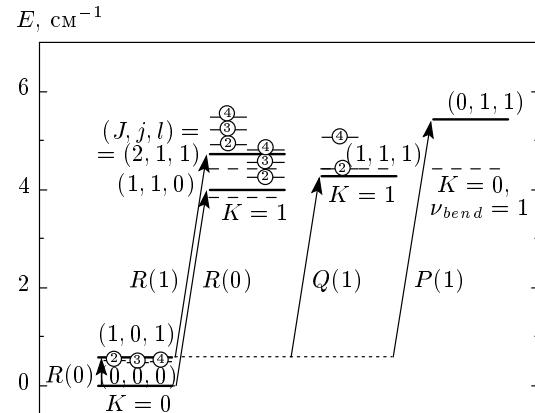


Рис. 2. Схема нижних вращательных уровней энергии кластеров $\text{He}_N\text{-CO}$ с $N = 1\text{--}4$. Сплошными жирными линиями показаны положения уровней бимера He-CO , штриховыми линиями — положения тех же уровней в пределе свободных вращений мономера. Цифрами 2, 3, 4 в кружках отмечены уровни кластеров соответственно их размерам. Стрелками показаны серии переходов R , Q , P , которые соответствуют $\Delta J = 1, 0, -1$ и которые использовались для расчета угловой анизотропии потенциала взаимодействия; K — проекция полного вращательного момента \mathbf{J} на ось колебания; ν_{bend} соответствует изгиблому колебанию

ного момента относительно главных осей инерции комплекса.

В кластерах $\text{He}_N\text{-CO}$ обнаружены также две серии переходов, коррелирующих с переходами a - и b -типа бинарного комплекса [7]. Поскольку переходы a -типа в модели свободных вращений запрещены, в бинарном комплексе He-CO они на порядок слабее переходов b -типа. При увеличении размера кластера происходит перераспределение интенсивности между этими переходами (интенсивность переходов a -типа растет, а b -типа падает). По мере заполнения гелиевой оболочки разделение двух вращений теряет смысл и их частоты должны слиться [9].

4. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Применение теории возмущений для расчета уровней энергии бинарного комплекса He-CO описано в деталях в работе [18]. Здесь мы распространили данный подход на малые кластеры $\text{He}_N\text{-CO}$, рассматривая атомы гелия как единый связанный объект. В нулевом приближении молекула CO в кластере вращается свободно с вращательной константой b , а весь кластер как целое вращается с вращатель-

ной константой B , зависящей от N . Угловая зависимость взаимодействия между молекулой CO и NeN вводится как малое возмущение. Потенциал взаимодействия для каждого размера кластера представляется в виде линейного разложения по полиномам Лежандра до третьего члена:

$$V(R, \theta) = V_0(R) + V_1(R)P_1(\cos \theta) + \\ + V_2(R)P_2(\cos \theta), \quad (2)$$

где член $V_0(R)$ описывает нулевое приближение, P_i — полиномы Лежандра, θ — угол между осью молекулы CO и осью кластера, R — расстояние между центром масс молекулы CO и центром масс атомов гелия (см. вставку на рис. 3).

Теория возмущений второго порядка для вращательных уровней энергии каждого кластера дает следующее выражение:

$$E(J, j, l) = E_{jl}^{(0)} + V_2 f_2(jl, jl; J) - \\ - \sum_{\substack{j'=j \pm 1 \\ l'=l \pm 1}} \frac{|V_1 f_1(j'l', jl; J)|^2}{E_{j'l'}^{(0)} - E_{jl}^{(0)}} - \\ - \sum_{\substack{j'=j, j \pm 2 \\ l'=l, l \pm 2 \\ (j'l') \neq (jl)}} \frac{|V_2 f_2(j'l', jl; J)|^2}{E_{j'l'}^{(0)} - E_{jl}^{(0)}}. \quad (3)$$

Здесь решение в нулевом приближении, $E_{jl}^{(0)}$, дается формулой (1), а f_1 и f_2 — коэффициенты Персивиля — Ситона (Percival—Seaton) выражены нами через $3j$ - и $6j$ -символы:

$$f_\lambda(jl, j'l'; J) = \\ = (-1)^{j+j'-J} \sqrt{(2j+1)(2l+1)(2j'+1)(2l'+1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} j & j' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{3jSym} \begin{pmatrix} l & l' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{3jSym} \times \\ \times \begin{pmatrix} j & l & J \\ l' & j' & \lambda \end{pmatrix}_{6jSym}. \quad (4)$$

Таким образом, имеются три неизвестных (подгночных) параметра, $B(N)$, $V_1(N)$, $V_2(N)$. Для определения этих параметров для каждого размера кластера N необходимы частоты как минимум трех вращательных переходов.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Частоты переходов с двух нижних уровней кластера NeN-CO с $N = 1$ –4 представлены в табл. 1. Все частоты переходов для бинарного комплекса ($N = 1$) измерены в работах [20, 22], а частоты переходов $R(0)$ a - и b -типа для кластеров ($N = 2$ –4) в нашей работе [9]. Частоты «теплых» переходов $R(1)$ и $Q(1)$ b -типа для Ne₂-CO измерены нами в недавней работе [17]. Недостающие частоты переходов для кластеров с $N = 3$ –4 получены из частот соответствующих колебательно-вращательных переходов $R(1)$ и $Q(1)$ ($v_{CO} = 1 \leftarrow 0$) [7]. Предсказания частот переходов проводились с учетом точного значения сдвига частоты колебания CO при добавлении атомов гелия [9].

С помощью частот переходов из табл. 1 энергии вращательных уровней $(J, j, l) = (1, 0, 1), (1, 1, 0), (1, 1, 1), (2, 1, 1)$ для кластеров с $N = 1$ –4 и уровня $(0, 1, 1)$ для Ne₁-CO определяются с экспериментальной точностью, как указано в табл. 2 (в скобках дана ошибка в единицах последнего знака). Эти же уровни для кластеров $N = 1$ –4 представлены выше на рис. 2 вместе с положениями уровней для Ne₁-CO в модели свободных вращений. Как можно видеть, при добавлении атомов гелия наблюдается только плавный сдвиг уровней энергии и схема продолжает соответствовать почти свободным вращениям молекулы CO в кластере, т. е. состояния с $K = 1$ (где K — проекция полного момента \mathbf{J} на ось комплекса) находятся выше основного состояния $K = 0$ на величину порядка $2b$, в два раза выше, чем в случае жесткого ротора, а расщепление уровней с $K = 1$ велико, примерно равно $2B$ [2]. Поэтому можно было предположить, что молекула CO вращается почти свободно, а атомы гелия действуют как единый объект, и применить теорию возмущений для расчета уровней энергии таких кластеров, как описано в предыдущем разделе.

Расчеты до второго порядка теории возмущений показали хорошее согласие с экспериментальными положениями уровней (отклонение менее 1 %), что свидетельствует о правомерности модели, в которой атомы гелия в малом кластере представляют собой единую связанную систему. Значения определенных экспериментально энергий уровней и относительные отклонения расчетных значений приведены в табл. 2.

Полученные кривые угловой зависимости анизотропии потенциала взаимодействия (см. формулу (2)) для всех четырех исследуемых кластеров представлены на рис. 3. Здесь можно отметить две

Таблица 1. Частоты использованных для расчетов переходов (в МГц)

$(J', j', l') - (J'', j'', l'')$	$N = 1$	$N = 2$	$N = 3$	$N = 4$
$(1,0,1) - (0,0,0)$	17277.7268 [22]	15492.5636 [9]	14475.8956 [9]	14641.7260 [9]
$(1,1,0) - (0,0,0)$	119779.385 [20]	127234.352 [9]	136404.470 [9]	144173.088 [9]
$(2,1,1) - (1,0,1)$	124650.642 [20]	132368.279 [17]	141795*	149400*
$(1,1,1) - (1,0,1)$	110663.370 [20]	117414.357 [17]	—	137600*
$(0,1,1) - (1,0,1)$	144321.110 [20]	—	—	—

Примечание. *Предсказаны из ИК-переходов работы [7] с учетом сдвига частоты колебания CO из работы [9].

Таблица 2. Экспериментальные значения энергий уровней кластеров $\text{He}_N\text{-CO}$, $N = 1\text{--}4$ и относительные отклонения расчетных значений

(J, j, l)	$N = 1$		$N = 2$		$N = 3^*$		$N = 4$	
	E_{exp} , см $^{-1}$	$\frac{ \Delta E }{E_{exp}}$, %	E_{exp} , см $^{-1}$	$\frac{ \Delta E }{E_{exp}}$, %	E_{exp} , см $^{-1}$	E_{exp} , см $^{-1}$	$\frac{ \Delta E }{E_{exp}}$, %	
$(1,0,1)$	0.57632293(56)	0.00	0.51677630(56)	0.00	0.48286390(56)	0.48839541(56)	0.00	
$(1,1,0)$	3.9954102(17)	-0.13	4.2440812(17)	0.01	4.5499634(17)	4.8090966(17)	0.30	
$(1,1,1)$	4.2676556(22)	0.69	4.4332977(22)	-0.01	—	5.0782(17)	-0.02	
$(2,1,1)$	4.7342208(22)	-0.50	4.9321068(22)	-0.01	5.2126(17)	5.4718(17)	-0.21	
$(0,1,1)$	5.3903570(22)	0.17	—	—	—	—	—	

Примечание. *Отклонения не могут быть определены, так как в расчетах участвуют только три перехода.

особенности. Во-первых, как видно из рисунка, глубина потенциальной ямы слегка увеличивается при изменении N от 1 до 4. Это поведение согласуется с теоретическим расчетом квантовым методом Монте-Карло энергии связи атомов гелия в кластерах $\text{He}_N\text{-CO}$ в работе [23], в которой показан ее рост до $N = 4, 5$. Во-вторых, оказалось, что положение минимума потенциальной энергии плавно сдвигается от значения угла $\theta = 100^\circ$ в He-CO к $\theta = 180^\circ$ (кислородный конец) в $\text{He}_3\text{-CO}$ и $\text{He}_4\text{-CO}$, т. е. атомы гелия все больше смещаются к атому кислорода. Это поведение также подтверждается теоретическим расчетом распределения плотности гелия в кластерах $\text{He}_N\text{-CO}$ [23], который показал предрасположенность атомов гелия локализоваться у кислородного конца молекулы CO в малых кластерах и постепенное заполнение области углеродного конца при $N = 10\text{--}14$. Недавний анализ изотопических зависимостей переходов a -типа в кластерах $\text{He}_N\text{-}^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $\text{He}_N\text{-}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $\text{He}_N\text{-}^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ [17] дал по-

хожий результат, позволяющий сделать вывод, что атомы гелия аккумулируются вблизи атома кислорода до $N = 6$, а далее занимают позиции в области атома углерода. При $N = 15$ происходит заполнение первой координационной сферы [23]. Также мы можем отметить, что полученное значение $\theta = 126^\circ$ при $N = 2$ хорошо совпадает с соответствующим значением из недавних квантово-химических расчетов для комплекса $\text{He}_2\text{-CO}$ [24].

К недостаткам полученных здесь угловых зависимостей потенциала взаимодействия в $\text{He}_N\text{-CO}$ можно отнести трудности объяснения наблюдающегося роста частоты переходов b -типа («свободное вращение» CO) при присоединении атомов гелия до $N = 6$ [9]. Такой рост предположительно вызван увеличением угловой анизотропии с ростом кластера [7], что не наблюдается явно (см. кривые на рис. 3). Возможно, эти изменения анизотропии слишком малы, чтобы воспроизводиться в рамках данного подхода.

Предполагая цилиндрическую симметрию рас-

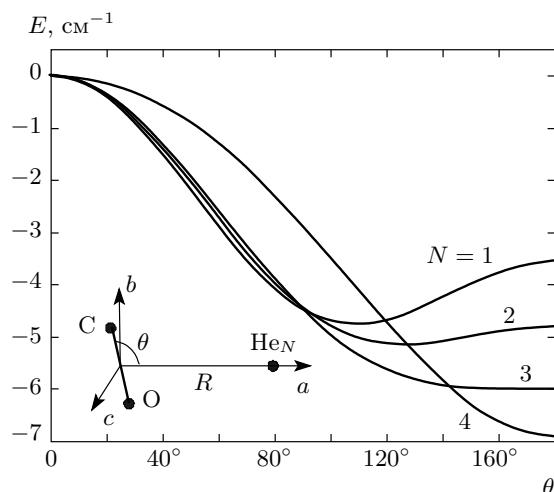


Рис. 3. Угловая анизотропия потенциала взаимодействия для кластеров $\text{He}_N\text{-CO}$ с $N = 1\text{--}4$. На вставке показана геометрия кластера $\text{He}_N\text{-CO}$ и определение угла θ

пределения атомов гелия относительно оси кластера, из полученных зависимостей угловой анизотропии мы можем сделать вывод о том, что кластеры $\text{He}_3\text{-CO}$ и $\text{He}_4\text{-CO}$ имеют форму пирамиды с молекулой CO в вершине. Такая форма кластера способствует почти свободному вращению молекулы CO, так как атомы гелия сближаются друг с другом и взаимодействие He-CO с ростом N уступает место взаимодействию He-He, которое становится определяющим для энергии связи кластера, и вращение молекулы CO остается лишь слегка заторможенным.

Представляется интересным распространить подход теории возмущений, представленный в данной работе, на большие кластеры ($N > 4$) при получении новых экспериментальных данных по «теплым» вращательным переходам. По мере заполнения гелиевой оболочки в кластере следует ожидать уменьшения угловой анизотропии потенциала, т. е. минимум зависимости потенциальной энергии от угла θ должен заметно уплощаться.

Тот факт, что в малых гелиевых кластерах происходит почти свободное вращение молекулы-хромофора лишь с частичным увеличением гелиевого окружения, безусловно, имеет отношение к обсуждаемому в последнее время явлению «микроскопической» сверхтекучести (см., например, работы [5, 9]). Однако вопрос о его связи с макроскопическим эффектом, присущим жидкому гелию, остается открытым. Здесь ситуацию может прояснить исследование аналогичных кластеров из фермионов ${}^3\text{He}$, в

которых при заданных температурах эксперимента сверхтекучесть невозможна.

6. ВЫВОДЫ

Теория возмущений второго порядка применена для расчета нижних вращательных уровней энергии малых гелиевых кластеров $\text{He}_N\text{-CO}$ с $N = 1\text{--}4$. При этом в качестве нулевого приближения используется свободное вращение мономера CO в кластере, а атомы гелия рассматриваются как единый объект. Получено хорошее согласие с соответствующими экспериментальными значениями энергий уровней. Определена угловая зависимость потенциала взаимодействия, из которой следует, что положение минимума потенциальной энергии плавно сдвигается от значения угла между осью молекулы CO и осью кластера $\theta = 100^\circ$ в $\text{He}_3\text{-CO}$ к $\theta = 180^\circ$ (кислородный конец) в $\text{He}_4\text{-CO}$. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что в кластерах $\text{He}_N\text{-CO}$ с $N = 2\text{--}4$, как и в бинарном комплексе, сохраняется почти свободное вращение молекулы-хромофора CO, а атомы гелия действуют как единая связанная система.

А. В. Потапов, В. А. Панфилов и Л. А. Сурин посвящают эту статью памяти Бориса Самуиловича Думеша, который, к сожалению, не успел написать ее сам.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 09-02-00813, 10-02-91337-ННИО_а) и ННИО (гранты SCHL 341/8-1, SU 579/1).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. P. Toennies and A. F. Vilesov, *Angew. Chem. Int. Ed.* **43**, 2622 (2004).
2. Б. С. Думеш, Л. А. Сурин, УФН **176**, 1137 (2006).
3. A. R. W. McKellar, Y. Xu, and W. Jäger, *J. Phys. Chem. A* **111**, 7329 (2007).
4. A. R. W. McKellar, *J. Chem. Phys.* **128**, 044308 (2008).
5. Y. Xu, N. Blinov, W. Jäger et al., *J. Chem. Phys.* **124**, 081101 (2006).
6. A. R. W. McKellar, *J. Chem. Phys.* **127**, 044315 (2007).
7. J. Tang and A. R. W. McKellar, *J. Chem. Phys.* **119**, 754 (2003).

8. A. R. W. McKellar, J. Chem. Phys. **125**, 164328 (2006).
9. L. A. Surin, A. V. Potapov, B. S. Dumes et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 233401 (2008).
10. W. Topic, W. Jäger, N. Blinov et al., J. Chem. Phys. **125**, 144310 (2006).
11. Э. Л. Андроникашвили, ЖЭТФ **16**, 780 (1946); **18**, 424 (1948).
12. J. Tang, A. R. W. McKellar, F. Mezzacapo et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 145503 (2004).
13. S. Moroni, A. Sarsa, S. Fantoni et al., Phys. Rev Lett. **90**, 143401 (2003).
14. F. Paesani and K. B. Whaley, J. Chem. Phys. **121**, 5293 (2004).
15. F. Paesani and K. B. Whaley, J. Chem. Phys. **121**, 4180 (2004).
16. S. Moroni, N. Blinov, and P.-N. Roy, J. Chem. Phys. **121**, 3577 (2004).
17. P. L. Raston, Y. Xu, W. Jäger et al., Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 8260 (2010).
18. C. E. Chuaqui, R. J. Le Roy, and A. R. W. McKellar, J. Chem. Phys. **101**, 39 (1994).
19. L. A. Surin, B. S. Dumes, F. Lewen et al., Rev. Sci. Instrum. **72**, 2535 (2001).
20. L. A. Surin, D. A. Roth, I. Pak et al., J. Chem. Phys. **112**, 4064 (2000); Errata J. Chem. Phys. **112**, 9190 (2000).
21. А. В. Потапов, В. А. Панфилов, Л. А. Сурин, Б. С. Думеш и др., Опт. и спектр. **106**, 215 (2009).
22. A. R. W. McKellar, Yu. Xu, W. Jäger, and C. Bissonnette, J. Chem. Phys. **110**, 10766 (1999).
23. P. Cazzato, S. Paolini, S. Moroni et al., J. Chem. Phys. **120**, 9071 (2004).
24. X.-G. Wang, T. Carrington Jr., and A. R. W. McKellar, J. Phys. Chem. A **113**, 13331 (2009).