

# Schwingungsspektren und Normalkoordinatenanalyse des $P_2Se_6^{4-}$ -Anions in den konformeren staggered- und eclipsed-Anordnungen in $Tl_4P_2Se_6$ und $Na_4P_2Se_6$

M. Paresen und W. Brockner

Institut für Anorganische Chemie, Technische Universität Clausthal

B. N. Cyvin und S. J. Cyvin

Institutt for fysikalsk kjemi, Norges tekniske høyskole, Universitetet i Trondheim, N-7034 Trondheim-NTH, Norway

Z. Naturforsch. **41 a**, 1233–1237 (1986); eingegangen am 5. Juli 1986

**Keywords:**  $Tl_4P_2Se_6$ ,  $Na_4P_2Se_6$ , Vibration Spectra, Normal Coordinate Analysis, Conformation Isomery

*Vibrational Spectra and Normal Coordinate Analysis of the  $P_2Se_6^{4-}$  Anion in the Isomeric "Staggered" and "Eclipsed" Forms Verified in  $Tl_4P_2Se_6$  and  $Na_4P_2Se_6$*

$Na_4P_2Se_6$  has been prepared by elemental synthesis at high temperatures and characterized by vibrational spectroscopy. The vibrational frequencies of  $Na_4P_2Se_6$  are assigned on the basis of eclipsed  $P_2Se_6^{4-}$  conformers with  $D_{3h}$  symmetry, those of  $Tl_4P_2Se_6$  on the basis of staggered  $P_2Se_6^{4-}$  units with  $D_{3d}$  symmetry. A normal coordinate analysis has been performed for both conformers. The refined force field, potential energy distribution (PED), mean amplitudes of vibration and Coriolis coupling constants are given.

## Einleitung

Von den Hexaselenidohypodiphosphaten des Typs  $Me_4P_2Se_6$  konnte bisher lediglich von  $Ag_4P_2Se_6$  [1, 2] und  $Tl_4P_2Se_6$  [3] die jeweilige Kristallstruktur röntgenographisch bestimmt werden.

Beiden Hexaselenidohypodiphosphaten gemeinsam sind die äthananalogen  $P_2Se_6^{4-}$ -Anionen, während sich die Koordination der Kationen auffallend unterscheidet. Die Schwingungsfrequenzen des  $Tl_4P_2Se_6$  und ihre Zuordnung wurden vor kurzem von uns publiziert [3].

Um den Einfluß der Kationenart und -größe auf den strukturellen Feinbau und das Schwingungsverhalten der  $P_2Se_6^{4-}$ -Gruppierung zu untersuchen, konnte in Erweiterung der stofflichen Basis  $Na_4P_2Se_6$  dargestellt und schwingungsspektroskopisch charakterisiert werden [4].

Zur Spektreninterpretation, um weitergehende und mit den Thiohypodiphosphaten vergleichbare Daten zu erhalten, wurde eine Normalkoordinatenanalyse durchgeführt und Kraftkonstanten, Poten-

tialenergieverteilung, mittlere Schwingungsamplituden und Coriolis-Kopplungskonstanten berechnet.

## Experimentelles

Die Darstellung des hellgelben  $Na_4P_2Se_6$  erfolgte durch vorsichtiges Erhitzen eines stöchiometrischen Gemisches der Elemente (Na-Kirsche; roter Phosphor: Hoechst AG, Werk Knapsack; Se puriss. Fluka) in einer evakuierten und abgeschmolzenen Quarzampulle auf 750 °C und anschließendem langsamen Abkühlenlassen der Schmelze (24 h auf Raumtemperatur). Das Rohprodukt wurde durch Sublimation bei 450 °C gereinigt. Die analytische Zusammensetzung wurde durch eine Gesamtanalyse (Mikroanalyt. Laboratorium Beller, Göttingen) sichergestellt: Na 14,39 Gew.-% (theoret. 14,65%), P 9,83% (9,86%) und Se 74,81% (75,49%). Die Darstellung des  $Tl_4P_2Se_6$  ist in [3] beschrieben.

Die Raman-Spektren des  $Na_4P_2Se_6$  wurden mit einem Coderg-PHI-Spektrographen und Laserlichtanregung (Krypton-Ionen-Laser, Spectra Physics 165/01 bei 647,1 nm) aufgenommen. Die Registrierung der Raman-Streustrahlung erfolgte senkrecht zur Einstrahlrichtung. Das Raman-Spektrometer

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. W. Brockner, Institut für Anorganische Chemie, Technische Universität Clausthal, Paul-Ernst-Straße 4, D-3392 Clausthal-Zellerfeld, FRG.

0340-4811 / 86 / 1000-1233 \$ 01.30/0. – Please order a reprint rather than making your own copy.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

und die benutzte modifizierte Probenanordnung wurden an anderer Stelle beschrieben [5, 6]. Die FIR/IR-Spektren von  $Na_4P_2Se_6$ -Polyethylen-Preßlingen wurden mit einem Beckman-Interferometer FS 720 aufgezeichnet. Die  $Tl_4P_2Se_6$ -Schwingungsfrequenzen sind in [3] angegeben.

### Schwingungsspektrum des $Na_4P_2Se_6$

In Abb. 1 sind das FIR/IR- und das Raumtemperatur-Raman-Spektrum des  $Na_4P_2Se_6$  aufgeführt. Tabelle 1 enthält die Schwingungsfrequenzen ( $cm^{-1}$ ) mit ihren Intensitätsangaben.

### Diskussion und Normalkoordinatenanalyse

In den Hexaselenidohypodiphosphaten ist das  $P_2Se_6^{4-}$ -Anion (Äthantyp) die schwingungsspektroskopisch relevante Baueinheit. Die innere Rotation der  $PSe_3$ -Gruppen gegeneinander kann behindert sein, so daß eine „staggered“-Anordnung („auf Lücke“, Punktgruppe  $D_{3d}$ ) und eine „eclipsed“-Konformation („auf Deckung“, Punktgruppe  $D_{3h}$ ) möglich ist. Eine Unterscheidung der Konformationen ist aufgrund der Auswahlregeln möglich, denn für die  $D_{3d}$ -Form werden 6 und für die  $D_{3h}$ -Anordnung 9 Raman-aktive Grundschnwingungen erwartet [7]. Rotieren die  $PSe_3$ -Gruppen beispielsweise bei hohen Temperaturen schnell gegeneinander, resultiert die Punktgruppe  $D_3$ . Schematisch dargestellt ist das Gesagte im Korrelationsdiagramm (Tabelle 2).

Eine Schwingungsanalyse für die jeweilige  $P_2Se_6^{4-}$ -Konformation ergibt [8]

$$\Gamma_{\text{vib}}(D_{3d}) = 3A_{1g}(\text{RE}) + A_{1u}(\text{ia}) + 2A_{2u}(\text{IR}) + 3E_g(\text{RE}) + 3E_u(\text{IR}),$$

wobei  $2A_{1g} + A_{2u} + E_g + E_u$  Valenzschwingungen und die verbleibenden Deformationen sind und das Alternativverbot gültig ist;

$$\Gamma_{\text{vib}}(D_{3h}) = 3A'_1(\text{RE}) + A''_1(\text{v, ia}) + 2A'_2(\text{IR}) + 3E'(\text{RE, IR}) + 3E''(\text{RE})$$

mit  $2A'_1 + A'_2 + E' + E''$  als Valenzschwingungen.

Die für die Normalkoordinatenanalyse des  $P_2Se_6^{4-}$ -Anions benutzten Strukturparameter sind gemittelte Werte des  $Tl_4P_2Se_6$  [3] und lauten:  $P-P = 2,256 \text{ \AA}$ ,  $P-Se = 2,176 \text{ \AA}$ ; die Winkel um die  $PSe_3$ -

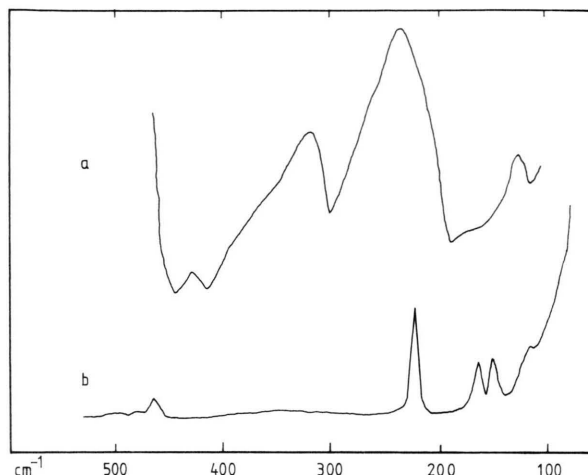


Abb. 1. Schwingungsspektrum des festen  $Na_4P_2Se_6$ .  
a: FIR/IR-Raumtemperaturspektrum;  
b: Raumtemperatur-Raman-Spektrum.

Tab. 1. Schwingungsfrequenzen ( $cm^{-1}$ ) des festen  $Na_4P_2Se_6$  mit Intensitätsangaben und ihrer Zuordnung.

Raman 20 °C	FIR/IR 20 °C	Zuordnung ( $D_{3h}$ )
108 vw	106 w-m	$\nu_9$ ( $E'$ )
114 w		$\nu_3$ ( $A'_1$ )
157 m		$\nu_8$ ( $E'$ )
170 m		$\nu_{11}$ ( $E''$ )
	185 vw, br	Komb., ?
227 vs		$\nu_2$ ( $A'_1$ )
	305 ms	$\nu_6$ ( $A'_2$ )
	425 w-m	$\nu_5$ ( $A'_2$ )
467 vw, sh	458 m	$\nu_7$ ( $E'$ )
472 w-m		$\nu_1$ ( $A'_1$ )
485 w, br		$\nu_{10}$ ( $E''$ )

s = strong, m = medium, w = weak, v = very, br = broad, sh = shoulder.

Tab. 2. Korrelationsdiagramm.

$D_{3d}$	$D_3$	$D_{3h}$
$3A_{1g}(\text{RE})$	$4A_1(\text{RE})$	$3A'_1(\text{RE})$
$A_{1u}(\text{v, ia})$		$A''_1(\text{v, ia})$
$2A_{2u}(\text{IR})$	$2A_2(\text{IR})$	$2A'_2(\text{IR})$
$3E_g(\text{RE})$	$6E(\text{RE, IR})$	$3E'(\text{RE, IR})$
$3E_u(\text{IR})$		$3E''(\text{RE})$

Gruppen wurden als tetraedrisch angenommen. Mit Ausnahme des Dieder-Winkels wurden sowohl für die staggered- als auch für die eclipsed-Anordnung identische Strukturparameter verwendet.

Die gebrauchten Symmetriekoordinaten sind praktisch identisch dem Standardsatz in [9]. Diese Koordinaten wurden auch bei der Normalkoordinatenanalyse des  $P_2S_6^{4-}$  [10] benutzt.

Es sei angemerkt, daß die aufgestellten Linear-kombinationen der Symmetriekoordinaten [9] für die  $D_{3d}$ - und  $D_{3h}$ -Modelle formal die gleichen oder nur solche mit umgekehrtem Vorzeichen sind. Auf diese Weise kommt eine direkte Korrelation zwischen diesen beiden Punktgruppen zustande. Im besonderen korreliert  $E_g(D_{3d})$  mit  $E'(D_{3h})$ , da beide Schwingungstypen im Hinblick auf die beiden  $PS_3$ -Gruppierungen in-Phase sind. Gleichermäßen ist  $E_u(D_{3d})$  mit  $E''(D_{3h})$  korreliert entsprechend den aus-Phase-Schwingungstypen. Allgemeiner ausgedrückt sind die genannten entarteten Species nicht direkt miteinander korreliert (Tabelle 2). Es ist außerdem genauso korrekt,  $E_u$  mit  $E'$  vom experimentellen Standpunkt aus zu korrelieren, da beide Species ultrarot-aktive Fundamentalschwingungen enthalten.

Mit einem einfachen Diagonal-Valenzkraftfeld konnte keine vernünftige Übereinstimmung mit den experimentellen Frequenzwerten erreicht werden. Die Einführung einiger Nicht-Diagonal-Kraftkonstanten, die Substitution der Deformationskoordinaten durch Keating's Deformationen (siehe unten) und die Verwendung einer konventionellen „least-squares“-Angleichung an die beobachteten Frequenzwerte führten zu den nachfolgend genannten Valenzkraftkonstanten (m dyne/Å), die als Eingangskraftkonstanten annehmbar waren:

$$f_{P-Se} = 2,327; \quad f_{P-P} = 1,313;$$

$$f_{Se-P-Se} = f_{Se-P-P} = 0,4308; \quad f_{torsion} = 0,0137;$$

$$f_{P-Se/P-Se} \text{ (gleiche Gruppen)} = f_{P-Se/P-P} = -0,1594;$$

$$f_{P-Se/P-Se} \text{ (verschiedene Gruppen)} = -0,4661;$$

$$f_{P-Se/Se-P-Se} = f_{P-Se/Se-P-P} = 0,2943.$$

Es wird darauf hingewiesen, daß auch die Torsionskraftkonstante wegen ihres Einflusses auf die  $E_u$ - (für staggered) und die  $E''$ -Schwingungsfrequenz (für eclipsed) angeglichen wurde. Es ergab sich für  $P_2Se_6^{4-}$  ein extrem niedriger Wert von rund 0,01 m dyne/Å im Gegensatz zu 0,1 m dyne/Å für  $P_2S_6^{4-}$  [10]. Leider kann die Torsionsfrequenz weder in der

Klasse  $A_u$  (staggered) noch in  $A'_1$  (eclipsed) zur Überprüfung der Richtigkeit beobachtet werden, da beide Raman-verboten und ultrarot-inaktiv sind.

Die Schwingungsfrequenzen ( $cm^{-1}$ ) der beiden  $P_2Se_6^{4-}$ -Konformeren, die mit den oben aufgeführten Kraftkonstanten berechnet wurden, sind in Tab. 3 unter a zusammengefaßt.

Keating [11] benutzt bei der Analyse von Schwingungen in Kristallen einen neuen Typ innerer Koordinaten. Cyvin [12] bezog sich in seiner Anwendung der Theorie der Molekülschwingungen in der Standardformulierung von Wilson [8] darauf als Keating's Deformation. Die Nützlichkeit von Keating's De-

Tab. 3. Berechnete und experimentelle Schwingungsfrequenzen ( $cm^{-1}$ ) des  $P_2Se_6^{4-}$ -Anions in der staggered- ( $D_{3d}$ ) und eclipsed-Konformation ( $D_{3h}$ ) mit ihrer Zuordnung und Potentialenergieverteilung (PED). a: Aus dem Eingangskraftfeld berechnet; b: Aus dem Endkraftfeld berechnet; c: Experimentelle Frequenzen des  $Tl_4P_2Se_6$  [3],  $D_{3d}$ -Zuordnung; d: Experimentelle Frequenzen des  $Na_4P_2Se_6$ ,  $D_{3h}$ -Zuordnung; e: PED-Terme unter 20 sind nicht aufgeführt.

Zuordnung		Schwingungsfrequenzen			PED-Terme <sup>e</sup>
		a	b	c	
$D_{3d}$ /staggered	$A_{1g}$				
	$\nu_1$	462	452	452	90d + 33 $\alpha$ + 25r
	$\nu_2$	223	217	217	69r + 56 $\alpha$
	$\nu_3$	106	116	116	31 $\alpha$ + 24d
$A_u$	$\nu_4$	26	26 (70)	—	100 $\tau$
$A_{2u}$	$\nu_5$	436	440	440	78r + 22 $\alpha$
	$\nu_6$	255	283	283	78 $\alpha$ + 22r
$E_g$	$\nu_7$	476	474	474	94r + 46 $\beta$
	$\nu_8$	231	213	213	41 $\beta$ + 32 $\alpha$
	$\nu_9$	142	150	150	66 $\alpha$ + 23 $\beta$
$E_u$	$\nu_{10}$	473	478	478	104r
	$\nu_{11}$	186	173	173	98 $\alpha$
	$\nu_{12}$	92	93	132	106 $\beta$
$D_{3h}$ /eclipsed		a	b	d	PED-Terme <sup>e</sup>
$A'_1$	$\nu_1$	462	452	472	90d + 33 $\alpha$ + 25r
	$\nu_2$	223	217	227	69r + 56 $\alpha$
	$\nu_3$	106	116	114	31 $\alpha$ + 24d
$A'_1$	$\nu_4$	26	26 (70)	—	100 $\tau$
$A'_2$	$\nu_5$	436	440	425	78r + 22 $\alpha$
	$\nu_6$	255	283	305	78 $\alpha$ + 22r
$E'$	$\nu_7$	471	464	467	101r
	$\nu_8$	183	184	157	91 $\alpha$
	$\nu_9$	91	89	108	109 $\beta$
$E''$	$\nu_{10}$	483	500	485	91r + 44 $\beta$
	$\nu_{11}$	233	228	170	35 $\beta$ + 22 $\alpha$
	$\nu_{12}$	143	135		76 $\alpha$ + 28 $\beta$

formation wurde für verschiedene planare  $XY_3$ -Moleküle [13–17], planare zyklische Kohlenwasserstoffe (benzoide Aromaten) [18, 19] und für einige käfigstrukturierte Ionen [20, 21] demonstriert.

Ein letztendlicher Symmetriekraftkonstantensatz wurde durch Anpassung der allermeisten Frequenzwerte der staggered-Form an die beobachteten Frequenzen erreicht. Test-Rechnungen mit  $\nu_{12} = 132\text{ cm}^{-1}$  endeten mit unannehmbaren  $E''$ -Frequenzwerten (eclipsed), besonders in einem zu hohen  $\nu_{10}$ -Wert. Als Kompromiß wurde ein  $\nu_{12}(E_u)$ -Wert errechnet, der sehr nahe dem mit dem Eingangskraftfeld be-

rechneten Frequenzwert liegt, während sich  $\nu_{12}(E'')$  zu  $135\text{ cm}^{-1}$  ergab.

Die so erhaltenen Symmetriekraftkonstanten sind in Tab. 4 angegeben. Ein alternativer Wert um  $0,1\text{ m dyne/\AA}$ , der mit  $\nu_4 = 70\text{ cm}^{-1}$  konsistent ist, ist mit in Klammern aufgeführt. Bemerkenswert ist besonders, daß dieselben Kraftkonstantenblocks (Tab. 4) für die Species  $E_g$  und  $E'$  benutzt werden (wie auch ein anderer Block sowohl für  $E_u$  als auch für  $E''$ ) im Einklang mit der oben erwähnten Konstruktion der Symmetriekoordinaten. Konsequenterweise erhalten die beiden Kraftkonstantenblocks von  $E_u$  und  $E'$  substantiell unterschiedliche Kraftkonstanten, obgleich beide ultrarot-aktive Schwingungen enthalten.

Erfreulich ist, wie gut diese Kraftfelder die Haupttrends der beobachteten Frequenzen (Tab. 3) wiedergeben. Die höchsten  $E_g$ - und  $E_u$ -Frequenzwerte aus  $D_{3d}$  ( $\nu_7$  und  $\nu_{10}$ ) liegen sehr dicht beieinander ( $474$  und  $478\text{ cm}^{-1}$ ). Beim Übergang zum  $D_{3h}$ -Modell wird ein beträchtliches Aufspalten erhalten:  $\nu_7$  fällt ab und  $\nu_{10}$  steigt in perfekter Übereinstimmung mit den berechneten  $\nu_7(E')$ - und  $\nu_{10}(E'')$ -Frequenzwerten.

Die Potentialenergieverteilung (PED) der  $P_2Se_6^{4-}$ -Fundamentalschwingungen (Tab. 3) wurde mit den Kraftkonstanten der Tab. 4 berechnet [22]. Diese PED-Werte zeigen, daß die allermeisten Schwin-

Tab. 4. Letztendliche Symmetriekraftkonstanten ( $\text{m dyne/\AA}$ ) des  $P_2Se_6^{4-}$ -Anions in der staggered- und eclipsed-Konformation.

$A_{1g}/A'_1$	2,140 0,343 – 0,275	1,723 – 0,495	0,963
$A_u/A'_1$	0,0137 (0,101)		
$A_{2u}/A'_2$	4,227 – 0,013	1,033	
$E_g/E'$	2,305 – 0,214 0,232	0,438 0,052	0,416
$E_u/E''$	2,513 – 0,243 0,261	0,388 – 0,019	0,435

Tab. 5. Berechnete mittlere Schwingungsamplituden ( $\text{\AA}$ ) der beiden  $P_2Se_6^{4-}$ -Konformeren bei verschiedenen Temperaturen (Spalte 2 in Klammern: Gleichgewichtsabstand).

Staggered-Konformation/ $D_{3d}$				
Abstandstyp		mittlere Schwingungsamplituden *		
		$T = 0$	298 K	773 K
P–Se	(2,18)	0,042	0,049	0,070
P–P	(2,26)	0,051	0,060	0,088
Se ... Se	(3,55)	0,044	0,066	0,103
P ... Se	(3,62)	0,050	0,074	0,113
Se ... Se	(4,24)	0,066 (0,061)	0,169 (0,122)	0,271 (0,195)
Se ... Se	(5,53)	0,048	0,076	0,119
Eclipsed-Konformation/ $D_{3h}$				
P–Se	(2,18)	0,042	0,049	0,070
P–P	(2,26)	0,051	0,060	0,088
Se ... Se	(3,55)	0,044	0,066	0,103
P ... Se	(3,62)	0,050	0,074	0,113
Se ... Se	(3,71)	0,065	0,136	0,218
Se ... Se	(5,13)	0,057 (0,053)	0,137 (0,097)	0,219 (0,155)

\* Berechnet für  $\nu_4(A_u) = 26\text{ cm}^{-1}$ ; abweichende Werte für  $\nu_4 = 70\text{ cm}^{-1}$  in Klammern.

Tab. 6. Die wichtigsten Coriolis-Kopplungskonstanten der  $P_2Se_6^{4-}$ -Konformeren.

Staggered-Konformation			Eclipsed-Konformation		
$E_g \times E_g$	$\zeta_7$	0,903	$E' \times E'$	$\zeta_7$	0,803
	$\zeta_8$	- 0,490		$\zeta_8$	- 0,863
	$\zeta_9$	- 0,045		$\zeta_9$	0,059
$E_u \times E_u$	$\zeta_{10}$	0,769	$E'' \times E''$	$\zeta_{10}$	- 0,921
	$\zeta_{11}$	- 0,814		$\zeta_{11}$	0,462
	$\zeta_{12}$	0,045		$\zeta_{12}$	0,090

gungsmoden stark gekoppelt sind und eine konventionelle Beschreibung der Normalschwingungen deshalb unbefriedigend ist. Analoges wurde von uns [10] für  $P_2S_6^{4-}$  gefunden.

Mit dem Endkraftfeld wurden als weitere „molekulare“ Konstanten des  $P_2Se_6^{4-}$  die mittleren Schwin-

gungsamplituden (Tab. 5) für alle interatomaren Abstände und verschiedene Temperaturen und die wichtigsten Coriolis-Kopplungskonstanten (Tab. 6) der beiden  $P_2Se_6^{4-}$ -Konformeren berechnet [22].

Aufgrund der Unbestimmtheit der nichtbeobachteten Torsionsschwingung  $\nu_4(A_u)$  sind die alternativen mittleren Schwingungsamplituden (für  $\nu_4 = 70 \text{ cm}^{-1}$ ) in Klammern gesetzt.

### Anerkennungen

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie sei für ihre finanzielle Hilfe und Herrn D. Grünwald für die sorgfältige Registrierung der Raman-Spektren gedankt. B. N. Cyvin anerkennt dankend die gewährte Unterstützung des Norwegischen Allgemeinwissenschaftlichen Forschungsrates.

- [1] P. Toffoli u. P. Khodadad, C. R. Acad. Sci. Paris **285 C**, 559 (1977).
- [2] P. Toffoli, P. Khodadad u. N. Rodier, Acta Crystallogr. **B34**, 1779 (1978).
- [3] W. Brockner, L. Ohse, U. Pätzmann, B. Eisenmann u. H. Schäfer, Z. Naturforsch. **40a**, 1248 (1985).
- [4] M. Parnsen, Dissertation Techn. Universität Clausthal, 1985.
- [5] W. Bues, W. Brockner u. D. Grünwald, Spectrochim. Acta **28 A**, 1519 (1972).
- [6] H. A. Øye u. W. Bues, Inorg. Nucl. Chem. Lett. **8**, 31 (1972).
- [7] K. W. F. Kohlrausch, Ramanspektren, Nachdruck Heyden & Son Ltd., London 1972, S. 167 ff.
- [8] E. B. Wilson, J. C. Decius u. P. C. Cross, Molecular Vibrations, McGraw-Hill, New York 1955.
- [9] S. J. Cyvin, I. Elvebredd, J. Brunvoll u. G. Hagen, Acta Chem. Scand. **22**, 1491 (1968).
- [10] S. J. Cyvin, B. N. Cyvin, C. Wibbelmann, R. Becker, W. Brockner u. M. Parnsen, Z. Naturforsch. **40a**, 709 (1985).
- [11] P. N. Keating, Phys. Rev. **145**, 637 (1966).
- [12] S. J. Cyvin, Spectroscopy Letters **17**, 489 (1984).
- [13] S. J. Cyvin, Spectroscopy Letters **17**, 493 (1984).
- [14] S. J. Cyvin, B. N. Cyvin u. J. Brunvoll, Spectroscopy Letters **17**, 511 (1984).
- [15] S. J. Cyvin, B. N. Cyvin u. G. Díaz Fleming, Spectrochim. Acta **41 A**, 351 (1985).
- [16] T. Mogstad, S. J. Cyvin, B. N. Cyvin, J. Brunvoll u. G. Díaz Fleming, Z. Naturforsch. **40a**, 373 (1985).
- [17] B. N. Cyvin, S. J. Cyvin, G. Díaz Fleming, F. Mogstad u. E. Rytter, Z. Naturforsch. **40a**, 714 (1985).
- [18] J. Brunvoll, B. N. Cyvin u. S. J. Cyvin, Spectroscopy Letters **17**, 551 (1984).
- [19] B. N. Cyvin, J. Brunvoll, S. J. Cyvin u. P. Klæboe, Spectroscopy Letters **17**, 559 (1984).
- [20] W. Weber u. M. F. Thorpe, J. Phys. Chem. Solids **36**, 967 (1985).
- [21] B. N. Cyvin, J. Brunvoll u. S. J. Cyvin, Spectroscopy Letters **17**, 569 (1984).
- [22] S. J. Cyvin, Molecular Vibrations and Mean Square Amplitudes, Elsevier, Amsterdam 1968.