

# Rol de los potenciales de interacción en la dinámica de relajación de la molécula de NO embebida en matrices de Ne

P. E. Martínez Fernández<sup>†</sup>, Jesús Rubayo Soneira y Germán Rojas Lorenzo.

Facultad de Ciencias y Tecnologías Nucleares, INSTEC, Cuba; fulcrum@instec.cu, jrs@instec.cu, german@instec.cu

<sup>†</sup> Autor para la correspondencia

Recibido el 1/06/2006. Aprobado en versión final el 1/12/2007.

**Sumario.** En el presente trabajo se realiza un estudio de la relajación de la molécula NO excitada a su primer nivel electrónico de Rydberg, dentro de una matriz de átomos de Ne. En el mismo se analizan las propiedades dinámicas y energéticas del sistema al utilizar diferentes superficies de energía potencial para el estado excitado de Rydberg. Desde el punto de vista energético fueron calculadas las bandas de absorción y emisión, así como el desplazamiento de Stokes. La característica dinámica analizada fue la evolución temporal del radio promedio de los doce vecinos más próximos a la impureza. Dos de las superficies de energía potencial que describen al estado de Rydberg reflejan las propiedades del complejo en fase gaseosa NO-Ne, mientras las otras dos fueron calculadas para reproducir correctamente las características energéticas del sistema. Las dinámicas realizadas con los potenciales del sistema en fase gaseosa condujeron a resultados diferentes a los reportados en el experimento. Este hecho indica la importancia de la contribución al potencial de términos que describen otras contribuciones energéticas a la hora de describir al sistema sólido.

**Abstract.** The aim of this work is to study the relaxation process that takes place in a Ne matrix doped with NO, when the impurity is photoexcited to its first Rydberg state. The dynamical and energetic properties of the system were analyzed using different potential energy surfaces to describe the interactions established between the matrix atoms and the NO molecule in its Rydberg state. From the energetic point of view were calculated the absorption and emission bands, as well as the Stokes shift between these bands. The temporal behavior of the averaged distance among the impurity and its twelve nearest neighbors was the dynamical property studied. Two Rydberg state potential energy surfaces show the properties of the NO-Ne complex in gas phase, while the rest of them were calculated in order to reproduce correctly energetic characteristics of the system. Molecular dynamics calculations using gas phase potentials lead to results that disagree with experimental ones. This fact realizes the importance of other energetic terms contribution to potential in order to describe the solid system.

**Palabras clave.** Condensed matter molecular dynamics calculations, 71.15.Pd, *Ab initio* calculations (atoms and molecules), 31.15.Ar.

## 1 Introducción

Los procesos de confinamiento y relajación de la energía son de especial interés para la comunidad científica, dadas las múltiples aplicaciones tecnológicas que ha partir de ellos se han desarrollado<sup>1-5</sup>. Como ejemplo de estas aplicaciones podemos citar la obtención de energía solar, los combustibles sólidos, la fusión nuclear, etc.<sup>6-9</sup>. Un aspecto interesante vinculado con estos procesos es la

capacidad del medio de responder ante la excitación electrónica de impurezas embebidas en su seno. Entre las excitaciones electrónicas estudiadas la mayor atención recae en aquellas que conducen a estados con fuertes acoplamientos electrón-entorno.

Dada la complejidad de la estructura de los sistemas físicos de interés se hace necesario el estudio de sistemas modelos. Las matrices de gases nobles, así como las matrices de gases nobles dopadas, constituyen un modelo

ideal para la descripción y entendimiento del papel del entorno, ya que presentan estructuras bien ordenadas, una baja densidad de estados producto de las bajas temperaturas en que se forman y un medio químicamente inerte.

En el presente trabajo estudiamos los efectos sobre el entorno de la fotoexcitación de una molécula de monóxido de nitrógeno a su primer nivel de Rydberg (A), embebida en una matriz sólida de neón. La molécula de monóxido de nitrógeno es pequeña y puede incorporarse fácilmente en las matrices sólidas de gases nobles, y tiene estados de Rydberg que se pueden alcanzar mediante excitación láser<sup>10-13</sup>. Esta molécula constituye un radical libre muy reactivo a temperatura ambiente. Sin embargo, a partir de un estudio cinético de la reacción  $\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$  y tomando de la literatura los valores de las constantes cinéticas involucradas<sup>14</sup>, el cálculo de los tiempos de vida medio muestran que para las condiciones de temperatura (4K) y concentraciones en que se realizaron los experimentos<sup>10-13</sup>, esta molécula es muy estable [ $T_{1/2}(4\text{K}) \approx 10^{14.5}\text{s}$  y  $T_{1/2}(298\text{K}) \approx 10^{(-5)}\text{s}$ ]. Además de estas propiedades de la molécula de NO, convenientes para el experimento, existen otras razones para su estudio. La molécula de monóxido de nitrógeno es un agente cancerígeno, destructor de la capa de ozono y precursor de las lluvias ácidas<sup>15</sup>. Por otro lado, estudios realizados en la pasada década sugieren que el NO desempeña un papel activo en el funcionamiento del cerebro, las terminaciones nerviosas, las arterias, el sistema inmune, el hígado, el páncreas y el útero<sup>15</sup>.

Las investigaciones sobre los cristales de gases nobles puros y dopados se han realizado por medio de técnicas experimentales novedosas, entre las que se encuentra la espectroscopia de femtosegundos<sup>16-18</sup>, y por métodos teóricos como la dinámica molecular clásica<sup>19-24</sup>.

La principal herramienta utilizada en este trabajo fue la dinámica molecular clásica. Para esto fue necesario construir las superficies de energía potencial involucradas en el proceso. A partir de las publicaciones de trabajos experimentales y/o teóricos de este sistema fueron extraídos los parámetros que permiten definir la interacción entre los átomos de neón Ne-Ne<sup>25</sup>, entre estos y la molécula de NO en su estado fundamental Ne-NO(X)<sup>26</sup>, y entre estos y la molécula de NO en su primer nivel de Rydberg Ne-NO(A)<sup>22</sup>. Dado que hasta donde sabemos no existen datos experimentales sobre los potenciales Ne-NO(A), nos propusimos realizar el estudio de este sistema utilizando varias superficies de energías potencial, y así ver el papel que las mismas desempeñan en la dinámica de relajación de la matriz de neón. Las superficies fueron construidas a partir de diferentes métodos, entre los que se destacan el método de proyección semiclásica o método de reflexión para construir un potencial aditivo por pares del tipo Born-Mayer (BM)<sup>22</sup>, el método de las colocaciones sobre cálculos *ab-initio* al nivel Coupled Clusters<sup>27</sup>, y más que métodos, procedimientos para obtener potenciales aditivos por pares del tipo BM<sup>22</sup> y Morse a partir de un ajuste correcto de los datos espectroscópicos del sistema en estado sólido. Tanto con el

empleo del método de proyección semiclásica como con los cálculos *ab-initio* los potenciales obtenidos reflejan las propiedades del complejo Ne-NO(A) en fase gaseosa. En este trabajo solo se realizaron las dinámicas del sistema utilizando la superficie de energía potencial Ne-NO(A) obtenida con el método de las colocaciones, y el potencial de Morse ajustado para reproducir correctamente los datos espectroscópicos del sólido. Los resultados de las dinámicas utilizando las otras superficies que describen esta interacción fueron tomados de trabajos previos.

## 2 Métodos y materiales

**Superficies de energía potencial del sistema Ne-NO(A).** Los métodos utilizados en la construcción de las diferentes superficies de energía potencial están descritos en la literatura por lo que haremos un breve comentario de los mismos. La técnica de proyección basada en la aproximación semiclásica del principio de Frank-Condon parte de asumir que la transición entre estados electrónicos tendrá lugar con mayor probabilidad a partir de las coordenadas para las cuales el módulo al cuadrado de la función de onda electrónica sea máximo.

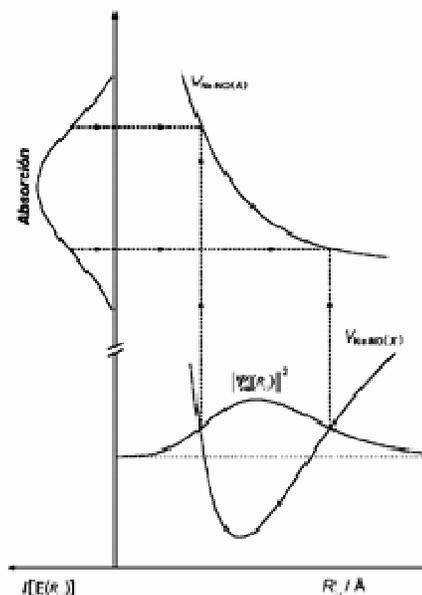


Figura 1. Técnica de proyección semiclásica.

Del análisis del espectro de absorción del complejo Ne-NO(X $\rightarrow$ A) se determina el valor de la energía de la transición más probable, y así se establece una correspondencia entre la energía y la posición. Esta técnica solo nos brinda información sobre una pequeña ventana de energía y no nos aporta datos sobre los valores del potencial a grandes distancias ( $>8 \text{ \AA}$ ). El procedimiento se extiende a otras coordenadas, y a partir del conjunto de pares de valores de energía y posición se ajusta la función potencial (ver figura 1).

El método de las colocaciones utilizado en este trabajo para construir la superficie de energía potencial permi-

te expresar a dicha superficie en series de polinomios de Legendre. En el mismo se considera la simetría del sistema y el uso de coordenadas de Jacobi para describir al complejo triatómico Ne-NO.

$$V(R, \theta) = \sum_{l=1}^N C(R) \cdot P_l(\cos(\theta)) \quad (1)$$

La solución del problema está en encontrar la forma que toman los coeficientes  $C(R)$  del desarrollo, dado que los polinomios de Legendre son conocidos.

A partir de cálculos *ab-initio* se obtuvieron valores del potencial para diferentes distancias  $R$  y ángulos  $\theta$  (ver figuras 2 y 3). La distancia  $R$  se tomó desde el átomo de neón hasta el centro de masas de la molécula de NO. El ángulo  $\theta$  está comprendido entre la dirección interatómica de la molécula de NO y la dirección definida por el átomo de neón y el centro de masas de la molécula. Los detalles de los cálculos *ab-initio* aparecen explicados en un trabajo previo, y aquí solo haremos un resumen de los mismos. Los orbitales se obtuvieron utilizando un procedimiento *restricted open-shell* Hartree-Fock (ROHF), y la correlación electrónica fue incluida al nivel *Coupled Cluster* CCSD(T). El conjunto de bases escogida para todos los átomos fue el AVTZ<sup>27</sup>.

Para realizar la interpolación partimos de que en el intervalo de variación analizado de la variable  $\theta$  es válido el desarrollo presentado en la ecuación 1, que en forma matricial abreviada se puede escribir como:

$$\mathbf{V} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{P}_l \quad (2)$$

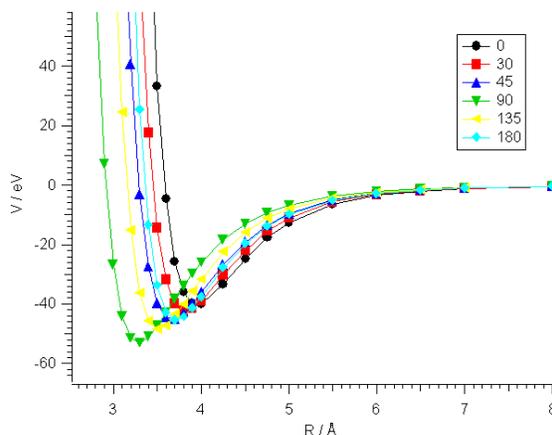
$$\mathbf{C} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{P}_l^{-1} \quad (3)$$

Este método presenta un adecuado balance entre rigurosidad matemática y eficiencia en la economía de tiempo a la hora de efectuar los cálculos de la dinámica molecular clásica (ver figuras 4 y 5).

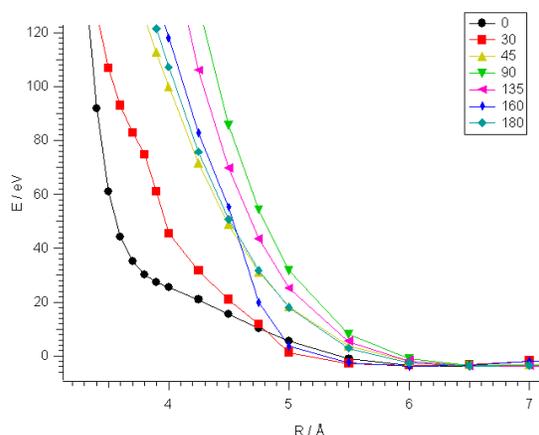
### 3 Dinámica molecular clásica

La dinámica molecular clásica permite analizar el comportamiento microscópico de sistemas de partículas que representan átomos y moléculas, a través de la solución numérica de las ecuaciones clásicas del movimiento. Las ecuaciones del movimiento se expresan con mayor frecuencia en la formulación Newtoniana, pero el método también es consistente con las formulaciones Lagrangiana y Hamiltoniana.

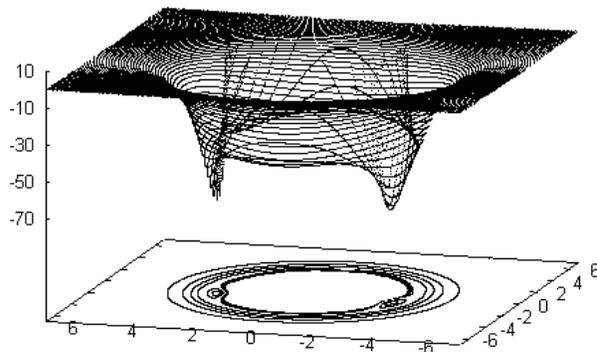
Para realizar una simulación de dinámica molecular clásica de un sistema se escoge un conjunto de  $N$  partículas clásicas con coordenadas  $\mathbf{r}_i$  y velocidades  $\mathbf{v}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Las coordenadas se asignan de acuerdo a la información que se tenga sobre la estructura del sistema, mientras que las velocidades que se generan para las partículas deben cumplir varios requerimientos. Entre los requisitos está fijar una temperatura de simulación, a través del teorema de equipartición de la energía, que el momento total del sistema sea nulo, y que las velocidades se distribuyan según la función de Maxwell-Boltzmann.



**Figura 2.** Valor del potencial, calculado por métodos *ab-initio*, para las diferentes direcciones angulares del sistema en el estado básico.



**Figura 3.** Valor del potencial, calculado por métodos *ab-initio*, para las diferentes direcciones angulares del sistema en el estado excitado.



**Figura 4.** Superficie de energía potencial del sistema Ne-NO(X) obtenida mediante el método de las colocaciones.

El sistema evoluciona sobre una superficie de energía potencial  $V_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ , que depende solo de las posiciones y se expresa como:

$$V_N(\vec{\mathbf{r}}_1, \dots, \vec{\mathbf{r}}_N) = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^{N-1} V^{\text{II}}(\vec{\mathbf{r}}_i, \vec{\mathbf{r}}_j) +$$

$$+ \sum_{\substack{i,j,k \\ i \neq j \neq k}}^{N-1} V^{\text{III}}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + V^{\text{N}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (4)$$

donde  $V^{\text{II}}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$  representa un potencial de dos cuerpos,  $V^{\text{III}}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$  un potencial de tres cuerpos etc. Los términos más comúnmente usados son los potenciales de dos cuerpos, que representan las interacciones entre dos partículas. Los términos que incluyen a los potenciales de tres cuerpos constituyen una corrección a la energía, al satisfacer restricciones geométricas que involucran ángulos planos. Los potenciales de orden superior representan correcciones cada vez menores de la energía total.

Una vez que se conocen las posiciones de las partículas, se calculan las fuerzas presentes en el sistema a través de las ecuaciones:

$$\vec{F}_j = -\nabla \sum_{i=1}^N V_{ij} = -\sum_{i=1}^N \nabla V_{ij} = m_j \vec{a}_j \quad (5)$$

$$\vec{a}_j = -\frac{1}{m_j} \sum_{i=1}^N \nabla V_{ij} \quad (6)$$

Con las posiciones, las velocidades y las aceleraciones de todas las partículas del sistema en el instante de tiempo  $t$ , se pasa a calcular las nuevas posiciones y velocidades en un instante de tiempo posterior  $t + \Delta t$ , a través del algoritmo de Verlet de velocidades.

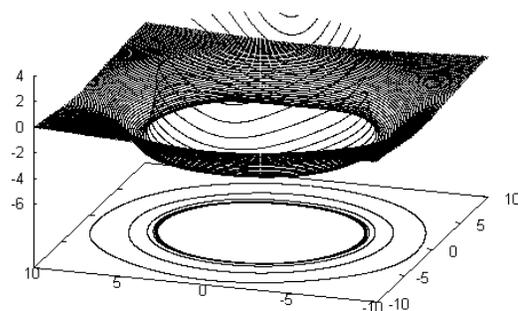
El sistema fue construido con 499 átomos de neón y una molécula de NO colocada en un sitio ocupacional de una red cúbica centrada en las caras. En los cálculos utilizamos las condiciones periódicas de frontera para simular un cristal infinito y despreciar los efectos de superficie. El paso de tiempo utilizado en la integración de las ecuaciones del movimiento fue de 1 fs.

En la primera etapa de la simulación la molécula de NO en su estado electrónico fundamental  $X$  se excita al estado electrónico  $A$ . Producto de la transición los núcleos dejan de evolucionar sobre la superficie de energía potencial  $V_X(R, \theta)$  del estado electrónico fundamental  $X$ , y comienzan a evolucionar sobre la superficie de energía potencial  $V_A(R, \theta)$  del estado electrónico excitado  $A$ .

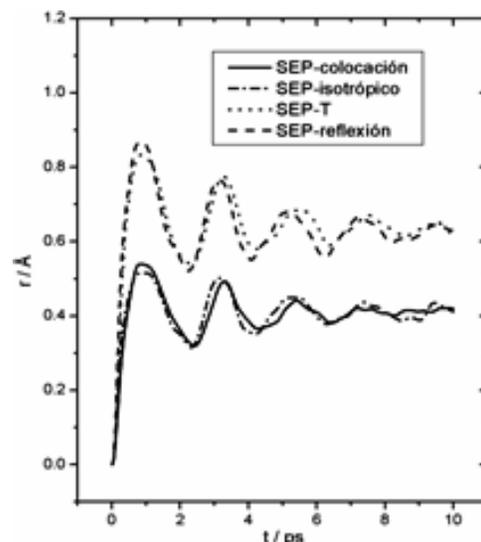
En el trabajo se realizaron diferentes variantes de cálculo, de acuerdo a la forma del potencial de interacción Ne-NO( $A$ ) utilizado. En un caso se usó la superficie completa obtenida por el método de colocación (SEP-colocación), en otro solo el potencial isotrópico que se obtiene de considerar el primer término del desarrollo en polinomios de Legendre (SEP-isotrópico), en otro caso se utilizó un potencial isotrópico con el perfil de los datos *ab-initio* calculados en la conformación en forma de T ( $\theta = \pi/2$ ) del complejo triatómico (SEP-T), y finalmente se utilizaron superficies construidas con potenciales de Morse (SEP-Morse) y Born-Mayer (SEP-BM) que fueron ajustados para reproducir correctamente las características espectroscópicas.

Solo para el caso en que se utilizó la SEP-colocación en las simulaciones se usó también en las mismas una superficie de energía potencial generada por el método

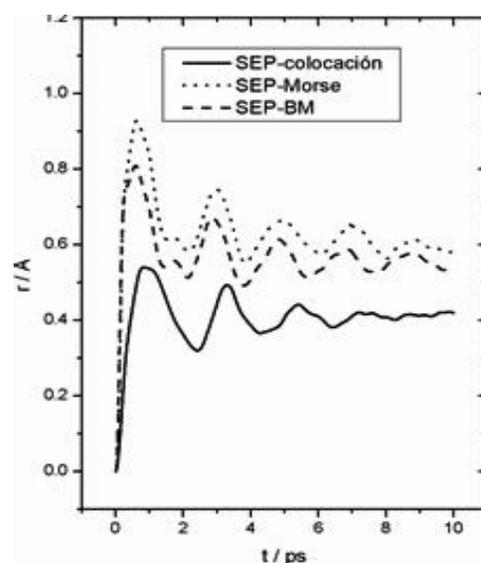
de las colocaciones para describir las interacciones Ne-NO( $X$ ).



**Figura 5.** Superficie de energía potencial del sistema Ne-NO( $A$ ) obtenida mediante el método de las colocaciones.



**Figura 6.** Distancia promedio de la primera capa de vecinos más próximos a la molécula de NO promediada en 100 trayectorias durante 10 ps.



**Figura 7.** Distancia promedio de la primera capa de vecinos más próximos a la molécula de NO promediada en 100 trayectorias durante 10 ps.

En los cálculos fue empleada una corrección térmica en la aproximación armónica para considerar la energía de punto cero<sup>28</sup>. Teniendo en cuenta que los experimentos se realizaron a 4K, como resultado de esta corrección las simulaciones fueron llevadas a cabo a 39K.

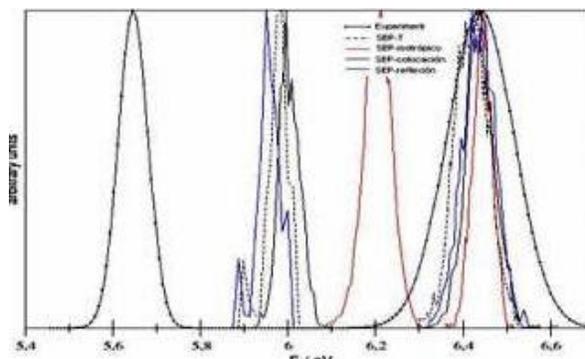
Queremos destacar que este incremento de la temperatura no afecta considerablemente la estabilidad de la molécula ( $T_{1/2}(39K) \approx 5 \times 10^9 s$ ). Para analizar el comportamiento del entorno a la fotoexcitación de la impureza se calcularon las distancias promedio de las diferentes capas de vecinos a la molécula de NO. Estas distancias fueron promediadas en 100 trayectorias durante 10 ps.

## 4 Resultados y discusión

Los resultados arrojados por la dinámica los comparamos con los reportados previamente<sup>22</sup> para los potenciales de Born-Mayer ajustados por el método de proyección semiclásica o reflexión (SEP-reflexión), y otra variante donde se modifica éste para reproducir correctamente los datos espectroscópicos (SEP-BM).

En el estudio del comportamiento temporal de la distancia promedio de la primera capa de solvatación a la impureza, encontramos que las respuestas obtenidas en todas las variantes de cálculo son similares, excepto para los casos en que se utilizaron los potenciales de Born-Mayer y Morse, donde el resultado se aproxima muy bien al experimento. Como se puede observar en las figuras 6 y 7, para las SEP-colocación, SEP-reflexión, SEP-isotrópico y SEP-T, la primera contracción aparece alrededor de los 2.3 ps, mientras que para las SEP-Morse y SEP-BM esta se observa alrededor de los 1.5 ps, resultado que está en muy buena concordancia con los valores experimentales<sup>16-17</sup>. Este resultado está dado por la similitud de las superficies de energía potencial construidas para el sistema triatómico en fase gaseosa. Por otra parte, en aquellas superficies ajustadas a partir de las propiedades espectroscópicas del sólido los resultados son mejores. Las principales diferencias entre estas últimas y las anteriores radican fundamentalmente en la región de corto alcance, donde la pendiente es más abrupta en las SEP-Morse y SEP-BM. Estas diferencias en las pendientes también son responsables del distinto comportamiento de las amplitudes iniciales de la expansión de la primera capa de vecinos. El impulso inicial que reciben los átomos al utilizar las SEP-Morse y SEP-BM es mayor. La pendiente del potencial en la región de corto alcance para la SEP-colocación es como promedio menor.

Respecto a los picos de absorción y emisión ninguno de los resultados obtenidos por la dinámica coincide con los reportes experimentales<sup>16-17</sup> para todas las superficies de energía potencial empleadas, excepto para las SEP-Morse y SEP-BM. El desplazamiento de Stokes para el caso en que se utilizó el potencial isotrópico es el que peor resultado muestra respecto al experimento (ver figura 8).



**Figura 8.** Comparación de las bandas de absorción y emisión, calculadas usando las distintas superficies de energía potencial, entre si y con el resultado experimental

## 5 Conclusiones

Durante las simulaciones no se observó la formación de complejos moleculares Ne-NO<sub>x</sub>, lo que está en total concordancia con la estabilidad de la molécula de NO a bajas temperaturas.

Del análisis de nuestros resultados encontramos que la anisotropía del estado fundamental no juega un papel importante en la dinámica del sistema, dado que desde el punto de vista dinámico las simulaciones realizadas utilizando las SEP-reflexión y SEP-colocación conducen a prácticamente los mismos resultados. Esto indica que las variaciones de energía que puede experimentar el sistema por considerar las interacciones Ne-NO(X) isotrópicas o anisotrópicas son mucho menores que las variaciones de energía del sistema durante la transición electrónica NO(X)→NO(A).

La respuesta del medio a la fotoexcitación de la impureza presenta las mismas características cuando son utilizadas las SEP-reflexión, SEP-colocación, SEP-isotrópico y SEP-T, siendo la amplitud mayor cuando se utilizan las SEP-reflexión y SEP-T. Este resultado obtenido para la respuesta del medio no concuerda con el experimento. Las mayores amplitudes se aprecian al utilizar las SEP-Morse y SEP-BM, pues en la región de Franck-Condon la pendiente del potencial es mayor, siendo consecuentemente mayor el impulso transmitido a los átomos vecinos.

No son reproducidas correctamente las bandas de absorción y emisión, para ninguna de las superficies de energía potencial que describen al sistema en fase gaseosa (ver Fig. VIII). Este resultado indica que los potenciales obtenidos en fase gaseosa no permiten obtener una descripción correcta del sistema en fase sólida durante la fotoexcitación de la impureza.

El uso de la SEP-BM así como de la SEP-Morse recientemente propuesta, si reproducen correctamente la respuesta en femtosegundos de las diferentes capas de vecinos a la impureza así como las propiedades espectrales de este sistema. Todo esto nos hace pensar que en la construcción de las superficies de energía potencial a partir de los potenciales en fase gaseosa Ne-NO(A), es

necesario incorporar otras contribuciones energéticas a la hora de describir al sistema sólido. No conocemos hasta ahora el origen de estas contribuciones.

Tanto los resultados obtenidos con el uso de la superficie de energía potencial generada por el método de colocación así como los obtenidos empleando el potencial de Born-Mayer ajustado con el método de reflexión son similares. Esto es consecuencia de que en ambos casos estos potenciales fueron obtenidos para describir las características del sistema Ne-NO(A) en fase gaseosa. Por un lado se aplicó el método de reflexión utilizando datos del sistema en fase gaseosa y por el otro lado se calcularon las energías del sistema triatómico (Ne-NO) para diferentes geometrías utilizando métodos *ab-initio*.

A partir de que los resultados obtenidos con las SEP-BM y SEP-Morse son similares concluimos que la región de corto alcance del potencial es la que juega el papel más importante en la conducción de la dinámica del sistema.

## Agradecimientos

Queremos agradecer la colaboración de Lic. Pedro Pajón Suarez y Lic. Alejandro Amor Coarasa por sus provechosas discusiones y aportes a este trabajo.

## Referencias

1. V. V. Goldman, Phys. Rev. 174 (1968) 1041
2. E. Boursey, M. C. Castex, and V. Chandrasekharan, Phys. Rev. B 16, 2858 (1977)
3. I. Ya. Fugol, Adv. Phys. 27, 1 (1978)
4. I. Ya. Fugol, Adv. Phys. 37, 1 (1988)
5. C. M. Weinert, F. Forstmann, H. Abe, R. Grinter, and D. M. Kolb, J. Chem. . 77, 3392 (1982)
6. P. G. Carrick, en High Energy Density Matter Contractors Conference, ed. T. L. Thompson (USA Phillips Laboratory, Edwards Air Force Base, 1993)
7. M. E. Fajardo, J. Chem. . 98, 110 (1992)
8. M. E. Fajardo, P. G. Carrick, and J. W. Kenney III, J.

Chem. . 94, 5812 (1991)

9. P. C. Souers, en Hydrogen properties for fusion energy (University of California Press, Berkeley, 1986)

10. Tesis de Doctorado, Photoinduced structural dynamics in solid hydrogens and in solid neon, por Franco Vigliotti (Universidad de Lausana, Suiza, 2000)

11. E. Miescher and K. Huber, en Int. Review of Science, Physical Chemistry, vol. 3, 37 (Butterworth, London, 1978)

12. M. Chergui, N. Schwentner, and W. Böhmer, J. Chem. 85, 2472 (1986)

13. M. Chergui, N. Schwentner, and V. Chandrasekharan, J. Chem. . 89, 1277 (1988).

14. E. Culotta and D. E. Koshland Jr., Science 258, 1862 (1992)

15. C. Jeannin, M. T. Portella-Orbeli, S. Jimenez, F. Vigliotti, B. Lang, and M. Chergui, Chem. 316, 51 (2000)

16. F. Vigliotti and M. Chergui, Chem. . Letters 296 (1998) 316 and Erratum 305, 187 (1999)

17. F. Vigliotti, L. Bonacina, and M. Chergui, Phys. Rev. B 67, 115-118 (2003)

18. S. Jimenez, A. Pasquarello, R. Car, and M. Chergui; Chem. 233, 343 (1998).

19. S. Jimenez, M. Chergui, G. Rojas-Lorenzo, and J. Rubayo-Soneira, J. Chem. Phys. 12, 5264 (2001).

20. F. Vigliotti, L. Bonacina, M. Chergui, G. Rojas-Lorenzo, and J. Rubayo-Soneira, Chem. Phys. Letters 362 31 (2002).

21. G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, F. Vigliotti, and M. Chergui, Phys. Rev. B67, 115-119 (2003).

22. V.S. Batista and D.F. Coker, J. Chem. Phys. 106, 6923 (1997).

23. Z. Li and V. A. Apkarian, J. Chem. 106, 942 (1997).

24. A. García-Vela, J. Rubayo-Soneira, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal, J. Chem. Phys. 104, 8405 (1996)

25. J. H. Thuis, S. Stolte, and J. Reuss, Chem. Phys. 43, 351 (1979) .

26. P. Pajón-Suárez, G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, and R. Hernández-Lamoneda, Chem. Phys. Let. 421, 389 (2006).

27. J. P. Bergsma, P. H. Berens, K. R. Wilson, D. R. Fredkin, and E. J. Heller, J. Phys. Chem. 88, 612 (1994).

28. D.R. Lide, Handbook of Chemistry and Physics (by CRC Press LLC 1999).