

ТЕРМОДИНАМИКА ИСПАРЕНИЯ ТРИБРОМИДА ИТТРИЯ В ФОРМЕ МОЛЕКУЛ YBr_3 И Y_2Br_6

© 2020 г. Е. Л. Осина^{1, *}, Л. Н. Горохов¹, Д. М. Ковтун^{1, 2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

²Химический факультет, Московский государственный университет, Москва, Россия

*E-mail: j-osina@yandex.ru

Поступила в редакцию 07.05.2019 г.

После доработки 24.07.2019 г.

Принята к публикации 22.10.2019 г.

В результате критического анализа теоретических данных по структуре и частотам колебаний мономерных и димерных молекул трибромид иттрия выбраны значения молекулярных постоянных и рассчитаны термодинамические функции для YBr_3 и Y_2Br_6 . С использованием литературных данных об отношении парциальных давлений димерных и мономерных молекул по методу “третьего закона термодинамики” определена энтальпия реакции $YBr_3(\text{кр., ж}) + YBr_3(\text{г}) = Y_2Br_6(\text{г})$ и рассчитан состав пара бромид иттрия в температурном интервале 1218–1492 К, для которого в литературе приведены данные по полному давлению. Установлено, что в данном температурном интервале отношение давлений P_d/P_m увеличивается от 0.06 до 0.15. По найденным парциальным давлениям рассчитаны величины энтальпии сублимации трибромид иттрия в форме мономерных и димерных молекул и энтальпии образования $YBr_3(\text{г})$ и $Y_2Br_6(\text{г})$. Полученные величины введены в базу данных программного комплекса ИВТАНТЕРМО.

DOI: 10.31857/S0040364420010147

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа является продолжением исследований термодинамических свойств тригалогенидов скандия и иттрия, опубликованных в [1–4]. Особенность этих соединений состоит в том, что насыщенный пар над тригалогенидами имеет сложный состав и состоит не только из мономерных MX_3 ($M = Sc, Y$), но и димерных молекул M_2X_6 . В связи с этим для надежного определения термодинамических характеристик процессов парообразования тригалогенидов необходимо исследовать роль димерных молекул в широком интервале температур. Такое исследование выполнено для трихлорида иттрия в работе [5].

Цели настоящей работы следующие:

- 1) расчет термодинамических функций для молекул $YBr_3(\text{г})$ и $Y_2Br_6(\text{г})$ на основе современных данных по структурным и энергетическим свойствам, так как данные о термодинамических свойствах этих соединений отсутствуют;
- 2) расчет состава пара трибромид иттрия, P_d/P_m и парциальных давлений мономерных и димерных молекул на основе экспериментальных данных по общему давлению пара трибромид иттрия;
- 3) расчет энтальпий сублимации и образования мономерных и димерных молекул трибромид иттрия с использованием рассчитанных в дан-

ной работе таблиц термодинамических функций $YBr_3(\text{г})$ и $Y_2Br_6(\text{г})$.

ВЫБОР МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОСТОЯННЫХ И РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ $YBr_3(\text{г})$ И $Y_2Br_6(\text{г})$

Трибромид иттрия $YBr_3(\text{г})$. Структура молекулы трибромид иттрия экспериментально исследовалась методом газовой электронографии в [6, 7]. В работе [6], проведенной на раннем этапе развития электронографического метода, в предположении о присутствии в исследуемом паре только молекул YBr_3 и их плоской структуре найдено межатомное расстояние $r_g(Y-Br) = 2.63(3) \text{ \AA}$. Не совершенная методика стала причиной большой неточности определения этого структурного параметра.

Авторы работы [7], в которой электронографическое исследование сопровождалось измерением масс-спектра паров, зарегистрировали наличие в паре порядка 1% димерных молекул. Ввиду малого количества димера электронограммы в [7] проанализированы без его учета. Установлено, что структура YBr_3 слегка пирамидальная с валентным углом $\angle Br-Y-Br = 117.3(8)^\circ$ и расстоянием $r_g(Y-Br) = 2.594(5) \text{ \AA}$. Сравнение этого параметра с соответствующим параметром для других тригалогенидов третьей группы (Sc, Y, La)

Таблица 1. Молекулярные постоянные YBr_3 и Y_2Br_6 ($p_x = 1$)

| Молекула | $I_A I_B I_C \times 10^{117}, \text{г}^3 \text{см}^6$ | ν_1 | ν_2 | ν_3 | ν_4 | ν_5 | ν_6 | ν_7 |
|-----------|---|---------|---------|---------|---------|---------|---------|------------------|
| YBr_3 | 44.3×10^5 | 201 | 43 | 293(2) | 49(2) | — | — | — |
| Y_2Br_6 | 25.5×10^7 | 296 | 291 | 269 | 252 | 205 | 171 | 169 ^a |

Примечание. Числа симметрии $\sigma(YBr_3) = 6$, $\sigma(Y_2Br_6) = 4$; p_x – статистический вес основного состояния; ^a $\nu_8 = 163$, $\nu_9 = 88$, $\nu_{10} = 58$, $\nu_{11} = 47$, $\nu_{12} = 47$, $\nu_{13} = 38$, $\nu_{14} = 36$, $\nu_{15} = 35$, $\nu_{16} = 31$, $\nu_{17} = 20$, $\nu_{18} = 9 \text{ см}^{-1}$.

[1, 3], а также результаты квантово-химических расчетов [7–9] и настоящей работы свидетельствуют в пользу плоской структуры YBr_3 с симметрией D_{3h} . Теоретические расчеты [7–9] выполнены в разных приближениях. Расчеты наиболее высокого уровня CISD+Q представлены в [8]. В настоящей работе использовались методы теории возмущений MP2 и связанных кластеров с учетом возбуждений третьего порядка CCSD(T). Были использованы корреляционно-согласованные базисы серий *cc-pVTZ-PP* и *cc-pwCVXZ-PP* для Y [10] и Br [11, 12] с релятивистскими псевдопотенциалами, позволяющими учесть релятивистские вклады для тяжелых атомов Y и Br. С помощью этих базисов для атома Y явно учитываются 11 электронов (внешний овал $4sp$, валентные электроны $5s^2 4d^1$), а для атома Br – 25 электронов (внешний овал $3spd$, валентные электроны $4s^2 4p^5$). Использование в настоящей работе двух вариантов расчетов (MP2 и CCSD(T)), вызванное трудоемкостью расчетов методом CCSD(T), позволяет сравнить полученные результаты и составить представление о возможной их погрешности. Значения $r_e(Y-Br)$, полученные в расчетах, в пределах погрешностей согласуются (2.603 [8]; 2.575 и 2.589 Å, данная работа). Произведение моментов инерции $I_A I_B I_C$, приведенное в табл. 1, рассчитано для плоской структуры молекулы с межъядерным расстоянием $r_e(Y-Br) = 2.575(20)$ Å, полученным в данной работе методом MP2(FC)/*cc-pVTZ-PP*.

Колебательный спектр молекулы YBr_3 экспериментально не исследован. В литературе имеются данные только теоретических расчетов [7–9]. Значения гармонических частот колебаний, полученные в расчетах [7–9] и данной работе, согласуются. Расхождения не превышают 10%. Исключение составляет частота неплюского колебания ν_2 . Низкие значения ν_2 получены в случае расчета методом функционала плотности B3LYP для обоих использованных авторами [9] базисов (LANL2DZ и SDD; 10 и 23 см^{-1} соответственно). В случае настоящего расчета [8] и [9] (RHF – ограниченный метод Хартри–Фока) получены близкие более разумные значения $\nu_2 = 43, 44$ и 40 (LANL2DZ) и 44 (SDD) см^{-1} . В работе [7] ее величина немного ниже и составляет 35 см^{-1} (B3LYP). Значения частот колебаний, приведенные в табл. 1,

приняты по данным расчета, выполненного в настоящей работе методом теории возмущений MP2 с базисом *cc-pVTZ-PP*. Погрешности принятых частот колебаний оценены в 10% для валентных частот и 15% для деформационных.

Димер трибромида иттрия Y_2Br_6 (г). В литературе отсутствуют экспериментальные структурные данные для молекулы димера трибромида иттрия Y_2Br_6 . Структурные параметры молекулы рассчитаны теоретически методами функционала плотности DFT и *ab initio* RHF в [9] и методами теории возмущений MP2 и связанных кластеров CCSD(T) в настоящей работе. Во всех расчетах установлена структура с плоским четырехчленным циклом Br_b-Y-Br_b-Y симметрии D_{2h} . Произведение моментов инерции $I_A I_B I_C$ в табл. 1 вычислено со структурными параметрами – $r(Y-Br_t) = 2.563(10)$, $r(Y-Br_b) = 2.752(20)$ Å, $\angle Br_b-Y-Br_b = 88.4(5.0)$, $\angle Br_t-Y-Br_t = 118.5(2.0)^\circ$ (Br_t – концевой атом брома, Br_b – атом брома в плоском четырехчленном цикле), принятыми по результатам авторского расчета, выполненного методом MP2 с базисом *cc-pVTZ-PP*.

Колебательные спектры Y_2Br_6 также экспериментально не изучены. Частоты колебаний этих молекул рассчитаны в [9] и настоящей работе. Теоретические расчеты [9] выполнены в приближениях RHF и B3LYP с базисами LANL2DZ и SDD. В данной работе частоты $\nu_1-\nu_{18}$ рассчитаны методом теории возмущений Меллера–Плессе MP2(FC) с базисом *cc-pVTZ-PP* и приведены в табл. 1. Вычислить частоты колебаний Y_2Br_6 методом связанных кластеров CCSD(T) не представлялось возможным. По этой причине структурные параметры и частоты колебаний обеих молекул YBr_3 и Y_2Br_6 приняты по результатам расчетов методом MP2. Погрешности частот колебаний оценены в 10% для валентных частот и 15–20% для деформационных.

Термодинамические функции. Термодинамические функции YBr_3 (г) и Y_2Br_6 (г) вычислены в приближении “жесткий ротатор–гармонический осциллятор” в интервале температур 298.15–3000 К. Возбужденные электронные состояния при расчете термодинамических функций не учитывались, поскольку ион Y^{+3} имеет заполненную электронную конфигурацию $\dots 4s^2 4p^6$. Результаты

Таблица 2. Коэффициенты полиномов, аппроксимирующих значения $\Phi^\circ(T)$ для молекул YBr_3 и Y_2Br_6

| Интервал температур, К | Φ_1 | Φ_2 | $\Phi_3 \times 10^{-4}$ | $\Phi_4 \times 10^{-1}$ | Φ_5 | Φ_6 | Φ_7 |
|-------------------------|----------|-----------|-------------------------|-------------------------|-----------|-----------|-----------|
| YBr_3 | | | | | | | |
| 298.15–1500 | 588.7491 | 82.34784 | –12.85631 | 5.224067 | 9.633827 | –28.07685 | 41.38646 |
| 1500–3000 | 369.2991 | –32.68232 | 2364.053 | –112.747 | 558.6859 | –664.2036 | 415.5024 |
| Y_2Br_6 | | | | | | | |
| 298.15–1500 | 1094.226 | 186.9518 | –38.49719 | 14.50614 | –60.949 | 211.9423 | –366.8609 |
| 1500–3000 | 1332.472 | 313.918 | –2736.7 | 147.2452 | –632.1733 | 752.3484 | –471.0451 |

Таблица 3. Термодинамические функции YBr_3 и Y_2Br_6

| T, К | $C_p^\circ(T)$ | $\Phi^\circ(T)$ | $S^\circ(T)$ | $H^\circ(T) - H^\circ(0)$ | $C_p^\circ(T)$ | $\Phi^\circ(T)$ | $S^\circ(T)$ | $H^\circ(T) - H^\circ(0)$ |
|--------|---------------------------------------|-----------------|--------------|---------------------------|---------------------------------------|-----------------|--------------|---------------------------|
| | Дж моль ⁻¹ К ⁻¹ | | | кДж моль ⁻¹ | Дж моль ⁻¹ К ⁻¹ | | | кДж моль ⁻¹ |
| | YBr_3 | | | | Y_2Br_6 | | | |
| 298.15 | 79.901 | 315.821 | 383.780 | 20.262 | 176.067 | 480.197 | 625.656 | 43.369 |
| 1000 | 82.833 | 404.956 | 482.862 | 77.906 | 182.268 | 673.533 | 843.793 | 170.260 |
| 2000 | 83.066 | 459.929 | 540.376 | 160.894 | 182.754 | 793.912 | 970.338 | 352.852 |
| 3000 | 83.109 | 492.738 | 574.066 | 243.986 | 182.844 | 865.905 | 1044.459 | 535.660 |

расчетов термодинамических функций так же, как и в работе [13], представлены полиномами. Для увеличения точности аппроксимации значительных термодинамических функций температурный интервал 298.15–3000 К разбивался на два подынтервала 298.15–1500 и 1500–3000 К. При этом отклонение рассчитанных и аппроксимированных значений приведенной энергии Гиббса $\Phi^\circ(T)$ в каждом интервале не превышало 0.001 Дж моль⁻¹ К⁻¹. Коэффициенты полиномов

$$\Phi^\circ(T) = \phi_1 + \phi_2 \ln X + \phi_3 X^{-2} + \phi_4 X^{-1} + \phi_5 X + \phi_6 X^2 + \phi_7 X^3$$

приведены в табл. 2. В табл. 3 собраны значения термодинамических функций $\text{YBr}_3(\text{г})$ и $\text{Y}_2\text{Br}_6(\text{г})$ при температурах 298.15, 1000, 2000 и 3000 К.

Погрешности термодинамических функций обусловлены как погрешностями рассчитанных значений молекулярных постоянных, так и методом расчета (жесткий ротатор–гармонический осциллятор) и составляют 8, 11, 13 и 19, 27 и 34 Дж моль⁻¹ К⁻¹ в приведенной энергии Гиббса $\Phi^\circ(T)$ при $T = 298.15, 1000, 3000$ К для YBr_3 и Y_2Br_6 соответственно. Термодинамические функции YBr_3 и Y_2Br_6 рассчитаны впервые.

РАСЧЕТ СОСТАВА ПАРА И ПАРЦИАЛЬНЫХ ДАВЛЕНИЙ МОНОМЕРНЫХ И ДИМЕРНЫХ МОЛЕКУЛ

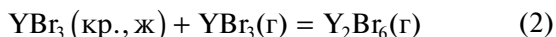
Процесс испарения трибромида иттрия исследован в интервале температур 1193–1450 К в [14, 15] и 1218–1492 К в [16]. Измерения насыщенного пара над расплавленным трибромидом иттрия во всех работах выполнялись методом “точки кипения” с использованием платиновых ампул, предотвращающих реакцию бромидов с кварцем. В дальнейшем изложении используется информация из работы [16], в которой в широком интервале температур представлены данные для всех устойчивых при высоких температурах трибромидов лантанидов и иттрия. В этой работе для каждого бромидов методом наименьших квадратов получено уравнение зависимости логарифма давления насыщенного пара от температуры:

$$\lg P(\text{мм рт. ст.}) = A - B/T - C \lg T. \quad (1)$$

Для бромидов иттрия $A = 27.1(0.16)$, $B = 13390(103)$. Коэффициент $C = \Delta C_p/R$ введен для учета изменения теплоемкости в процессе испарения, и в [16] для всех трибромидов принято приближенное значение $C = 5$. При этом предполагалось, что насыщенный пар над трибромидом

ми практически не содержит димерных молекул. Погрешности коэффициентов уравнения (1) являются среднеквадратичными ошибками, рассчитанными для доверительной вероятности 0.95.

Данные [16] использованы в настоящей работе при расчете состава пара, т.е. отношения давлений димерных и мономерных молекул P_d/P_m , являющихся константами равновесия реакции



при разных температурах.

Для этой цели необходима хотя бы одна опорная точка с известным значением P_d/P_m . В литературе имеется единственное значение $P_d/P_m = 0.013$ при 1062 К, полученное при масс-спектрометрическом измерении состава пара в ходе электронографического исследования [7]. Из сопоставления суммарных ионных токов для принятого в [7] состава пара следует, что отношение сечений ионизации димера и мономера авторами [7] принято равным 2. С учетом того обстоятельства, что значительная часть осколочных ионов димера совпадает по массе с гораздо более интенсивными ионами мономера, целесообразно принять практически общепринятое значение отношений сечений ионизации, равное 1.5. В таком случае принятая опорная точка становится равной $P_d/P_m = 0.017$ ($T = 1062$ К). С использованием этой величины рассчитана энтальпия реакции (2) по уравнению “метода третьего закона термодинамики” (см. [17]):

$$\Delta_r H^\circ(0) = T(\Delta_r \Phi^\circ(T) - R \ln K_p).$$

Термодинамические функции $YBr_3(\text{кр., ж})$, необходимые для расчетов, взяты из базы данных программного комплекса ИВТАНТЕРМО. Значение энтальпии реакции (2) получено равным $\Delta_r H^\circ(0) = 103.4 \pm 15$ кДж моль⁻¹. Погрешность этой величины обусловлена главным образом погрешностью термодинамических функций участников реакции (2). Найденное значение $\Delta_r H^\circ(0)$ дает возможность рассчитать отношения парциальных давлений мономера $YBr_3(\text{г})$ и димера $Y_2Br_6(\text{г})$ в любой температурной точке. Расчеты показали, что в интервале 1218–1492 К отношение парциальных давлений P_d/P_m возрастает от 0.06 до 0.15.

На основании расчетов по составу пара из данных по общему давлению в интервале 1218–1492 К [16] рассчитаны значения парциальных давлений P_m и P_d для YBr_3 и Y_2Br_6 . Полученные величины использованы для расчета энтальпий сублимации $YBr_3(\text{кр.})$ в форме мономера и димера. Средние значения, рассчитанные в интервале 1218–1492 К, приведены ниже (кДж моль⁻¹):

$$\Delta_s H^\circ(YBr_3, \text{кр.}, 0 \text{ К}) = 291.3 \pm 7,$$

$$\Delta_s H^\circ(YBr_3, \text{кр.}, 298.15 \text{ К}) = 289.5 \pm 7,$$

$$2YBr_3(\text{кр.}) = Y_2Br_6(\text{г}): \quad (3)$$

$$\Delta_s H^\circ(2YBr_3, \text{кр.} \rightarrow Y_2Br_6(\text{г}), 0 \text{ К}) = 394.6 \pm 12,$$

$$\Delta_s H^\circ(2YBr_3, \text{кр.} \rightarrow Y_2Br_6(\text{г}), 298.15 \text{ К}) = 394.0 \pm 12.$$

Погрешности принятых энтальпий сублимации приведены с учетом как воспроизводимости измерений давления пара, погрешности отношения P_d/P_m , так и неточности использованных в вычислениях термодинамических функций $YBr_3(\text{кр., ж})$, $YBr_3(\text{г})$ и $Y_2Br_6(\text{г})$. Полученные величины энтальпий сублимации трибромидиттрия в форме мономерных и димерных молекул приводят к величине энергии диссоциации димерных молекул (д) на мономерные (м):

$$\begin{aligned} D_0(d = 2m) &= \\ &= 2\Delta_s H^\circ(YBr_3, \text{кр.}, 0 \text{ К}) - \Delta_s H^\circ(3), 0 \text{ К}) = \\ &= 188 \pm 12 \text{ кДж моль}^{-1}. \end{aligned}$$

Расчет энергии диссоциации методом CCSD(T, FC1)/cc-pVQZ-PP с учетом поправки BSSE(QZ) и поправки на нулевые колебания $\Delta ZPE(\text{FC1})$ дал величину 198 кДж моль⁻¹. Расчет состава пара с этим значением энергии диссоциации приводит к величинам отношений давлений димера и мономера (от 0.17 до 0.26 в интервале 1218–1492 К).

Для расчета энтальпий образования молекул $YBr_3(\text{г})$ и $Y_2Br_6(\text{г})$ необходима энтальпия образования $YBr_3(\text{кр.})$. Так же как и в предыдущей работе [5] по термодинамике испарения трихлорида иттрия, в данной работе использованы результаты работы [18] и для энтальпии образования $YBr_3(\text{кр.})$ принята величина -858.1 ± 2.0 кДж моль⁻¹.

Комбинация принятых величин энтальпий сублимации с энтальпией образования $YBr_3(\text{кр.})$ [18] дает значения энтальпий образования молекул YBr_3 и Y_2Br_6 (кДж моль⁻¹):

$$\Delta_f H^\circ(YBr_3, \text{г}, 298.15) = -568.6 \pm 8$$

$$\text{и } \Delta_f H^\circ(YBr_3, \text{г}, 0) = -546.1 \pm 8 \text{ кДж моль}^{-1},$$

$$\Delta_f H^\circ(Y_2Br_6, \text{г}, 298.15) = -1322.2 \pm 16$$

$$\text{и } \Delta_f H^\circ(Y_2Br_6, \text{г}, 0) = -1280.1 \pm 16 \text{ кДж моль}^{-1}.$$

Значения энтальпий сублимации и образования YBr_3 и Y_2Br_6 получены впервые.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен критический анализ литературных данных для мономерных и димерных молекул трибромидиттрия $YBr_3(\text{г})$ и $Y_2Br_6(\text{г})$. Выбраны значения молекулярных постоянных и рассчи-

таны термодинамические функции $\text{YBr}_3(\text{г})$ и $\text{Y}_2\text{Br}_6(\text{г})$. Впервые получены значения энтальпий сублимации и энтальпий образования трибромидов иттрия в форме мономерных и димерных молекул. Также впервые получено значение энергии диссоциации $\text{Y}_2\text{Br}_6 = 2\text{YBr}_3$. Проведенная обработка литературных данных по давлению насыщенного пара позволила рассчитать состав пара в широком интервале температур.

Квантово-химические расчеты выполнены Д.М. Ковтуном с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М.В. Ломоносова [19].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Осина Е.Л., Гусаров А.В. Термодинамические функции и энтальпии образования молекул тригалогенидов скандия // ТВТ. 2015. Т. 53. № 6. С. 858.
2. Осина Е.Л., Горохов Л.Н. Новое значение энтальпии образования молекул ScF_3 // ТВТ. 2017. Т. 55. № 4. С. 631.
3. Осина Е.Л., Ковтун Д.М. Термодинамические функции молекулы трифторида иттрия и его димера // ЖФХ. 2018. Т. 92. № 5. С. 697.
4. Горохов Л.Н., Осина Е.Л., Ковтун Д.М. Термодинамика испарения трифторида иттрия в форме молекул YF_3 и Y_2F_6 // ЖФХ. 2018. Т. 92. № 11. С. 1676.
5. Осина Е.Л., Горохов Л.Н., Осин С.Б. Термодинамика испарения трихлорида иттрия в форме молекул YCl_3 и Y_2Cl_6 // ЖФХ. 2019. Т. 93. № 5. С. 650.
6. Акишин П.А., Наумов В.А., Татевский В.М. Электрографическое исследование строения молекул галогенидов галлия и иттрия // Кристаллография. 1959. Т. 4. С. 194.
7. Shlykov S.A., Oberhammer H. Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics. Book of abstracts. Dallas, Texas, USA, 2012. P. 163.
8. Соломоник В.Г., Марочко О.Ю. Строение и колебательные спектры молекул MHal_3 ($\text{M} = \text{Sc}, \text{Y}, \text{La}, \text{Lu}$; $\text{Hal} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) // ЖФХ. 2000. Т. 74. № 12. С. 2296.
9. Zhang Y., Zhao J., Tang G., Zhu L. *Ab initio* and DFT Studies on Vibrational Spectra of Some Halides of Group III B Elements // Spectrochimica Acta. Pt. A. 2005. V. 62. P. 1.
10. Peterson K.A., Figgen D., Dolg M., Stoll H. Energy-consistent Relativistic Pseudopotentials and Correlation Consistent Basis Sets for the Elements Y–Pd // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 124101.
11. Peterson K.A., Figgen D., Goll E., Stoll H., Dolg M. Systematically Convergent Basis Sets with Relativistic Pseudopotentials. II. Small-core Pseudopotentials and Correlation Consistent Basis Sets for the Post-*d* Group 16–18 Elements // J. Chem. Phys. 2003. V. 119. P. 11113.
12. Peterson K.A., Yousaf K.E. Molecular Core-valence Correlation Effects Involving the Post-*d* Elements Ga–Rn: Benchmarks and New Pseudopotential-based Correlation Consistent Basis Sets // J. Chem. Phys. 2010. V. 133. P. 174116.
13. Осина Е.Л. Термодинамические функции молекул оксидов германия в газовой фазе: $\text{GeO}_2(\text{г})$, $\text{Ge}_2\text{O}_2(\text{г})$ и $\text{Ge}_3\text{O}_3(\text{г})$ // ТВТ. 2017. Т. 55. № 2. С. 223.
14. Дудчик Г.П., Махмадмуродов А., Поляченко О.Г. Давление насыщенного пара бромидов иттрия и гольмия // ЖФХ. 1975. Т. 49. № 8. С. 2159.
15. Махмадмуродов А., Дудчик Г.П., Поляченко О.Г. Давление насыщенного пара бромидов иттрия и гольмия // Химия и хим. технол. Сб. Вып. 9. Минск: Вышэйш. школа. 1975. С. 13.
16. Махмадмуродов А., Темурова Н., Шарипов А. Термодинамика парообразования бромидов редкоземельных элементов // Изв. АН Тадж. ССР. Отд. физ. мат., хим. и геолог. 1989. № 1. С. 39.
17. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. 1. Кн. 1. М.: Наука, 1978.
18. Xiang-Yun W., Tian Zhu J., Goudiakas J., Fuger J. Thermodynamics of Lanthanide Elements IV. Molar Enthalpies of Formation of $\text{Y}^{3+}(\text{aq})$, $\text{YCl}_3(\text{cr})$, $\text{YBr}_3(\text{cr})$, and $\text{YI}_3(\text{cr})$ // J. Chem. Thermodyn. 1988. V. 20. Iss. 10. P. 1195.
19. Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin Vl., Opanasenko V. "Lomonosov": Supercomputing at Moscow State University. In: Contemporary High Performance Computing: from Petascale Toward Exascale (Chapman & Hall/CRC Computational Science). Boca Raton, USA: CRC Press, 2013. P. 283.