

Hf -

OH, HF⁺, HF, HF, NeH⁺, NeH (ε_i, ε_e, D₀,
u.n., parities) 1972

Bondybeay V., Pearson P. K.,
Schaefer H. F. III, 13141

Chem. Phys., 1972, 57, N3, 1123-
- 1128 (amu.)

Theoretical potential energy
curves for OH, HF⁺, HF, HF⁻, NeH⁺
and NeH.

Re Linn, 1972, 24524 5 10

(P)

HF⁻

Bruce R.E.

1973

et al.

"Chem. Phys. Lett"

u.n.

1973, 23, N4, 504-507.



(see HF; III)

X-10537 X-9383 1975

HF-

LiH-

NaH-

А⁻, потенциал
кривые

⊗ (+2)

X 1976 N6524

6 Б24. Теоретическое предсказание [существования] стабильных отрицательных ионов: HF⁻, LiH⁻ и NaH⁻. Griffing Karen M., Kenney John, Simons Jack, Jordan Kenneth D. Theoretical predictions of stable negative ions: HF⁻, LiH⁻, NaH⁻. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 9, 4073—4075 (англ.)

Методом ур-ний движения проведен расчет энергий ионов HF⁻, LiH⁻ и NaH⁻ относительно энергий нейтр. молекул. Базис состоял из наборов наиболее важных хартри-фоковских МО, рассчитанных для молекул, с добавлением оптимизованных диффузных s- и p-орбиталей на каждом центре (для HF⁻ — только на атоме H). В области межъядерных расстояний 2,0—4,5 ат. ед. для LiH, 2,0—4,25 для NaH и 0,75—2,6 для HF потенциальные кривые анионов лежат ниже кривых нейтр. молекул, тенденции к пересечению кривых отсутствуют, а равновесные расстояния молекул и анионов примерно одинаковы. Сродство к электрону LiH, NaH и HF, согласно расчету равно 0,2986; 0,3618 и 0,3558 эв соответственно.

М. Е. Ерлыкина

51203.8877
Ch, TC

40892

1975

HF⁻ 8-9383 8-4-10537

Griffing Karen M., Kenney John, Simons
Jack, Jordan Kenneth D.

Theoretical predictions of stable negative ions: HF⁻, LiH⁻, NaH⁻.

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 9, 4073-4075

(см. LiH⁻; III)

(англ.)

0501-6348

480 486 432

ВИНИТИ

89-9383-X

HF-

smuch 5631

1977

Cousseau J., et al.

смерь
дмр
структура
нона

J. Chem. Soc. Faraday

Trans. II, 1977, 73,

1015-19.

HF⁻

9 Д169. О существовании отрицательных ионов неонных полярных молекул: исследование ионов HF⁻, H₂O⁻, HCN⁻, (HF)₂⁻, H₃NO⁻ и CH₃CN⁻. Jordan K. D., Wendoloski J. J. On the existence of negative ions of nonionic polar molecules: studies of HF⁻, H₂O⁻, HCN⁻, (HF)₂⁻, H₃NO⁻ and CH₃CN⁻. «Chem. Phys.», 1977, 21, № 2, 145—154 (англ.)

1977

Для исследования возможности существования отрицат. ионов HF⁻, H₂O⁻, HCN⁻, (HF)₂⁻, H₃NO⁻ и CH₃CN⁻ произведен неэмпирич. расчет электронной структуры соответствующих нейтральных молекул. Сродство к электрону A оценивалось по теореме Купманса: $A = -\epsilon_{\text{LUMO}}$ (LUMO — низшая свободная орбиталь). Для получения стабильных результатов необходимо включение в базис трех наборов ($2s+2p$) диффузных ф-ций на атоме, соответствующем положит. концу диполя. Расчеты указывают на существование устойчивых ионов (HF)₂⁻, H₃NO⁻ и CH₃CN⁻ и их отсутствие для молекул HF и H₂O, обладающих меньшими дипольными моментами. Для молекулы HCN результаты являются недостаточно определенными. В. И. Барановский

Ае,
сущ. есмв.
ионов

(+5⁻)

⊗

Отмечен 5036

Ф 1977 №9

1977

HF⁻

16 Б34. О существовании отрицательных ионов не-
ионных полярных молекул. Исследования HF⁻, H₂O⁻,
HCN⁻, (HF)₂⁻, H₃NO⁻ и CH₃CN⁻. Jordan K. D.,
Wendoloski J. J. On the existence of negative ions
of nonionic polar molecules: studies of HF⁻, H₂O⁻,
HCN⁻, (HF)₂⁻, H₃NO⁻ and CH₃CN⁻. «Chem. Phys.»,
1977, 21, № 2, 145—154 (англ.)

Ac⁻

(45) 

На основании неэмпирич. расчетов методом Хартри —
Фока сделано заключение, что неионные полярные мо-
лекулы с достаточно большими дипольными моментами
могут образовывать стабильные анионы в результате
захвата электронов дипольными полями этих молекул.
Однако сродство к электрону у этих молекул значит.
меньше, чем у ионных молекул с сопоставимыми
дипольными моментами. Отмечено, что дипольные поля
HF и H₂O не достаточно велики для связывания элек-
трона. С др. стороны расчеты (HF)₂⁻, H₃NO⁻ и
CH₃CN⁻ показали, что эти анионы стабильны. Гранич-
ное положение занимает HCN⁻: расчет показал, что
этот ион может быть стабильным.

Резюме

X. 1977. N 16

5036
mm

HF -

Gmmeu 5036

1977

существование
ионов

87: 29299m On the existence of negative ions of nonionic polar molecules: studies of HF , H_2O , HCN , $(\text{HF})_2$, H_3NO and CH_3CN . Jordan, K. D.; Wendoloski, J. J. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, Utah). *Chem. Phys.* 1977, 21(2), 145-54 (Eng). Ab initio calens. are presented which demonstrate that nonionic polar mols. with sufficiently large dipole moments can form stable anions by the attachment of electrons in their dipole fields. The resulting electron affinities are considerably smaller than those for ionic mols. with comparable dipole moments. The dipole fields of HF and H_2O are too weak to bind an electron. Calens. on $(\text{HF})_2$, H_3NO , and CH_3CN suggest that these species are stable. HCN is a borderline case; the present study indicates that it may be stable.

④5

C.A. 1977. 87 N 4

HF

HF⁻кривые
потенци-
альной энергии

ВР-11-6249

1978

1) 7 Б124. Электронная спектроскопия резонансов фтористого водорода. Mathur D., Hasted J. B. Electron spectroscopy of hydrogen fluoride resonances. «Chem. Phys.», 1978, 34, № 1, 29—38 (англ.)

Измерен спектр пропускания электронов через HF. В спектре наблюдались резкая линия 10,05 эв, связанная с резонансом Фешбаха [переход HF, $X^1\Sigma \rightarrow HF-(3s\sigma)^2\ ^2\Sigma$], и группа резонансных линий в области 12—13 эв, интерпретированная как колебательная и вращательная структура перехода $HF(X^1\Sigma^+, v'' > 0) \rightarrow HF-(^2\Sigma, v' = 0-4)$. Значения молекулярных постоянных ω_e , $\omega_e x_e$, D_e , B и r_e HF-($^2\Sigma'$) равны соотв. 0,132; 0,006; 0,73 эв; 20,4 см⁻¹, 0,93 Å. Полученные результаты сопоставлены с данными по спектру энергетич. потерь электронов. Приведены приближенные кривые потенциальной энергии для HF и HF⁻.

В. М. Ковба



2. 1979 N 4

HF-

[Om. 18797] 1983

100: 180261a Investigation of negative ion states in hydrogen chloride and fluoride by configuration interaction methods. Bettendorff, Marc; Buenker, Robert J.; Peyerimhoff, Sigrid D. (Lehrstuhl Theor. Chem., Univ. Bonn, D-5300 Bonn, Fed. Rep. Ger.). *Mol. Phys.* 1983, 50(6), 1363-80 (Eng). Multireference CI calcns. were used to study Born-Oppenheimer potential energy curves in HF/HF- and HCl/HCl-. Large gaussian basis sets including neg. ion functions and diffuse s, p, and d AOs were used. In HCl- a repulsive $2\Sigma^+$ state emerges from the calcns. approx. 4.2 eV above the HCl $X^1\Sigma^+$ ground state. All other CI roots which produce potential curves parallel to and above the $X^1\Sigma^+$ curve possess quite diffuse charge distributions in the basis set variations undertaken. 90r large internuclear distances the HF- and HCl- curves lie below those of the neutral species, whereby the crossing between the $X^2\Sigma^+$ ionic and $X^1\Sigma^+$ curves occurs at $3.2 a_0$ in HCl/HCl- and $2.6 a_0$ in HF/HF-. Nonadiabatic effects involving the low energy HX- continuum states in the Born-Oppenheimer approxn. and the bound HX- species at large internuclear sepsns. (with continuation inside the HX potential well) are ultimately responsible for obsd. electron scattering resonances.

номенич.
критич.
меоп. расч

⊗ ⊕



HCl-

C.A. 1984, 100, N 22

HF⁻

1985

Hotokka M., Sundholm
D.

Uo, Ae; Finn. Chem. Lett.,
1985, N 3-4, 165.

(see: CH_3F^- ; III)

HF⁻

1989

Karlstroem Gunnar.

теор
расчёта,
дл. связи
и т.п.

J. Phys. Chem. 1989,
93 (12), 4952-5.

(сер. HF; III)

HF⁻

1992

16 Б1015. Потенциальные кривые анионов HF⁻ и HCl⁻ в приближении сильной связи. Close-coupling anion curves for HF⁻ and HCl⁻ /Gorczyca T., Norcross D. W. //Phys. Rev. A .—1992 .—45 ,№ 1 .—С. 140—147 .—Англ.

В одноконфигурационном приближении сильной связи рассчитаны потенциальные кривые низших состояний $^2\Sigma^+$ анионов HF⁻ и HCl⁻. Рассчитаны также электронно-молек. суммы собственных фаз. Для уточнения одноконфигурац. результатов использованы корреляционно-поляризац. потенциалы. Использованный подход позволил правильно описать потенциальные кривые анионов в областях, где они приближаются к потенциальным кривым нейтр. молекул. Показано существование псевдопересечений основного состояния HF⁻ с возбужденными состояниями ди-
доля.

А. А. Сафонов

М.П.

(4)

Х. 1993, № 16

HF⁻

1992

5 Д45. Кривые [потенциальной энергии в приближении] сильной связи для анионов HF⁻ и HCl⁻. Close-coupling anion curves for HF⁻ and HCl⁻ / Gorczyca T., Norcross D. W. // Phys. Rev. A .— 1992 .— 45 , № 1 .— С. 140—147 .— Англ.

Рассчитаны кривые потенц. энергии низших $^2\Sigma^+$ -состояний анионов HF⁻ и HCl⁻ в одноконfigurационном приближении сильной связи. Кроме статического обменного взаимодействия учитывалось корреляционно-поляризационное взаимодействие. Обнаружено квазипересечение между низшим состоянием аниона и бесконечной серией дипольно-связанных состояний HF⁻, когда кривые потенц. энергии аниона и нейтральной молекулы приближаются друг к другу при уменьшении межъядерного расстояния. Отмечено, что в рассмотренном методе расчета в асимптотич. потенциале сохраняются все мультипольные моменты дальнего порядка.

М.А.



ф. 1993, №5