

H F +

молекулярные
постоянные

Licht A.D.

Z.Naturforsch., 1956, 11a, N 9, 752-757
(англ.)

Теория ридберговских серий в молекуляр-
ных спектрах.

РЖХ, 1957, № 20,
65479

Не имеет еше
много к сравнению
и анализа в
веществах сопоставле

I-1737

1957

HF⁺ (I) many anobrown containing

Coope J.A.R., Frost D.C., Mc-Dowell C.A.,
Johns J.W.C., Barrow R.F.

Nature, 1957, 179, N 4571, 1186 ()
Ionization potentials of hydrogen fluori
de and the ground-state of the HF⁺- ion.

PX, 1958, N 3, 6903

to

✓

φ

HF^+
 DF^+
 у.ф.сигр.
 1957, 120, 65480
 1957, 120, 65480
 5568-1.
 John J.W.C. Barrow. R.F. (1957)
 Nature (L). 179 374. I-1738
 у.ф.сигр.мб. холдс HF^+ и DF^+ .
 $\text{B}^2\Sigma^+ - \text{A}^2\Sigma^+$
 нижнее соед. HF^+ $\tau_e = 1.076 \cdot 10^{-10}$
 $\omega_e = 2937.6 \text{ см}^{-1}$.
 и коррелирует с $\text{H}^+ + \text{F}(^2\text{P})$.
 Верхнее соед. коррелирует с $\text{H}^+ + \text{F}^+(^1\text{D})$.

Если $A^2 \Sigma t$ - осн. слага, то контакционный
напряжение $KF = 16,88 \text{ эВ}$.

F_2 (I) $I-1727$
 F_2^+ (A.P.)
 F^- (A.P.)

$\frac{HF}{H^+}$ (I)
 H^+ (A.P.)
 Cl_2 (I)
 Cl_2^+ (A.P.)

Cl^- (A.P.) I959
 HCl (I)

Thorburn R.

Proc.Phys.Soc., I959, 73, N I, 122-I26
(англ.)

Ионизация и диссоциация электронным ударом фтора, фтористого водорода, хлора и хлористого водорода.

РЖХ, I959, № I5,
52354.

М.Ю.

✓ (ф)

HF⁺

1960

Electronegativities from comparison of bond lengths in AH and AH⁺. Henry A. Bent (Univ. of Minnesota, Minneapolis). *J. Chem. Phys.* 33, 1258-9(1960).—The value of $d(A-H) - d(A-H^+)$ increases in the order OH, NH, HCl, HBr, CH, BH, BeH, AlH, and MgH. In the 1st 5 cases the difference is a neg. value. This order agrees with the order of decreasing electronegativity of A. It was inferred that the interat. distance in HF⁺ is 0.98 Å.

Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1961-55-11-10047B

1962

78178-7

5 Д95. Принцип Франка — Кондона и ионизация молекул. Collin Jacques E. The Franck — Condon principle and the ionization of molecules. «Canad. J. Chem.», 1962, 40, № 11, 2172—2175 (англ.)

С целью установления пределов применимости принципа Франка — Кондона изучаются различия в величинах потенциалов ионизации (ПИ), полученных методами электронного или фотонного ударов и спектроскопич. методом. Рассматриваются молекулы галогенов X_2 , галогенводородов HX ($X=F, Cl, Br$ и I), а также молекулы H_2 , N_2 , CO , O_2 и NO . Сопоставлены их характеристики в основном и ионизованном состояниях и определен тип переходов, отвечающих ионизации ($0-0$, $0-1$ и т. д. переходы). Проанализированы также энергии диссоциации D молекул X_2 и HX . Отмечено, что D_{HX^+} и $D_{X_2^+}$ всегда больше D_{HX} и D_{X_2} . Эти данные использованы при обсуждении связи величин D и величин межатомных расстояний. Полученные таким образом результаты указывают, что для рассмотренных молекул принцип Франка — Кондона выполняется достаточно строго, а расхождения между ПИ, полученными фотоионизационным методом или методом электронного удара и спектроскопич. методом, можно использовать для оценки изменения межатомных расстояний при ионизации. В. Б.

ионизация
диссоциации
молекулы

F_2, Cl_2, Br_2, I_2
 H_2, N_2, CO, O_2, NO
 HF, HCl, HBr, HI

(13)

Ф.1963.59

B9-5778-I

-1962

HF⁺, HeI⁺HB₂⁺, HY⁺F₂⁺, Cl₂⁺Br₂⁺, I₂⁺D₀

The Franck-Condon principle and the ionization of molecules. Jacques E. Collin (Univ. Liege, Belg.). *Can. J. Chem.* 40, 2172-5(1962). Data on vibrational quantum levels of the ionic states of H₂, N₂, O₂, CO, NO, F₂, Cl₂, Br₂, I₂, HF, HCl, HBr, and HI are summarized. Vibrational frequencies, ionization potentials, equil. distances, most probable ionization transitions, (calcd.), and most probable exptl. values from electron-impact, photon-impact, and spectroscopic methods are tabulated. The dissocn. energies (kcal./mole) of mol. ions, as calcd. from the exptl. data, are: HF⁺ 158, HCl⁺ 108, HBr⁺ 93, HI⁺ 74-8, F₂⁺ 77, Cl₂⁺ 97, Br₂⁺ 83, I₂⁺ 90. Thus, $D(A - B)^{+}_{B^+}$, leading to B⁺ is higher than $D(A - B)$ for the halogens but not for the halogen acids, and the Franck-Condon principle is fairly well obeyed.

Yechezkel Rasiel

C.A. 1963.58.4

28572

HF (Te, unappr. nos (2) XI 2160 1962
HF+ (Te, unappr. nos).

Nesbet R. L.

J. Chem. Phys., 1962, 36, 46, 1518-1523 (approx)

Approximate Hartree-Fock calculations for
the hydrogen fluoride molecule.

Proc. Roy. Soc., 1964,
155 26

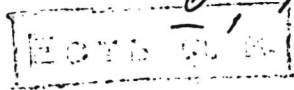
XI 1778

1966

HF⁺ (Vi, we, ze) и др.

Hartmann H., Hensen K.
Theoret. chim. acta, 1966,

6, n^o 1, 20-25



10

HF +

1908
Лемпка Н. Г., Price W.C.

J. Chem. Phys., 48, n 4, 1875

v_i

Мерные измерения
HF и DF

(см. HF) III

HF⁺

X1-443

1968

(Kb. exp. parent)

39953n Computed electronic energy levels of HF⁺ and the interpretation of photoelectron spectroscopic data. Richards, W. G.; Wilson, R. C. (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 1968, 64(7), 1729-34 (Eng). Ab initio matrix Hartree-Fock wave functions are calcd. for the X²Π_g and A²Σ⁺ states of HF⁺ at a series of internuclear distances. From the computed potential curves and consideration of the differences in correlation energy between the two levels, est. of the excitation energy and spectroscopic properties of these levels are made. These enable an interpretation of the photoelectron spectrum of HF to be given. The results are in close agreement with one of the two empirical interpretations of the spectrum. 24 references.

RCTD

C.A. 1968. 69.10

HF +

XI 443

1968

3 Д110. Вычисленные уровни электронной энергии HF^+ и интерпретация фотоэлектронных спектроскопических данных. Richards W. G., Wilson R. C. Computed electronic energy levels of HF^+ and the interpretation of photoelectron spectroscopic data. «Trans. Faraday Soc.», 1968, 64, № 7, 1729—1734 (англ.)

С помощью матричного формализма метода Хартри—Фока (метод МО ЛКАО для открытых оболочек, предложенный Несбетом) вычислены неэмпирические волн. ф-ции состояний $X^3\Pi_i$ и $A^2\Sigma^+$ иона HF^+ при пяти межъядерных расстояниях в диапазоне 1,4—2,2 ат. ед. Поскольку в ионе занятыми орбиталями являются те же орбитали, что и в нейтральной молекуле, и, кроме того, удаленный электрон является несвязывающим $p-\pi$ -электроном, который слабо влияет на межъядерное расстоя-

ф. 1969. 3Д 110



ние и другие орбитали молекулы, в качестве базиса АО использовался набор, оптимизированный для нейтральной молекулы (РЖФиз, 1968, 4Д79), состоящий из 16 ф-ций σ -типа и 8 ф-ций π -типа. Приводятся использованные при расчете выражения для гамильтонианов и энергий в обоих состояниях. Из вычисленных (с учетом взаимодействия конфигураций и без него) потенц. кривых и рассмотрения разности энергий корреляции между двумя уровнями, сделаны оценки энергии возбуждения и спектроскопич. свойств этих уровней. Дается интерпретация фотоселектронного спектра HF, которая находится в согласии с одной из двух эмпирич. интерпретаций спектра.

О. Шрамко

HF+

XI-993

1968

ЗБ117. Вычисленные электронные энергетические уровни HF⁺ и интерпретация данных фотоэлектронной спектроскопии. Richards W. G., Wilson R. C. Computed electronic energy levels of HF⁺ and the interpretation of photoelectron spectroscopic data. «Trans. Faraday Soc.», 1968, 64, № 7, 1729—1734 (англ.)

Матричным методом самосогласованного поля Хартри—Фока как без учета, так и с учетом конфигурационного взаимодействия вычислены энергии электронных уровней X²Π_i и A²Σ⁺ иона HF⁺ при различных межъядерных расстояниях R. Показано, что энергия уровня A²Σ⁺ в интервале R=1,4÷2,2 а. е. не имеет минимума. Для стабильного основного уровня X²Π_i вычислены значения равновесного межъядерного расстояния R_e=1,03 А и ча-



X. 1969. 3

стоты колебания $\omega_e = 3340 \text{ см}^{-1}$. Вычислена также величина дублетного расщепления уровня $X^2\Pi_i$ (300 см^{-1}), вызванная спин-орбитальным взаимодействием. Результаты применены к интерпретации фотоэлектронного спектра HF^+ . Структура резкой интенсивной полосы спектра интерпретирована возбуждением колебательных уровней HF (ω_e (эксп.) $= 3200 \text{ см}^{-1}$). Величина интервала между резкой и широкой диффузной полосы согласуется с вычисленным значением энергии вертикального возбуждения $^2\Pi - ^2\Sigma^+$.

М. Р. Алнев

BeH, BeH⁺, CH, NH, (сумма-орбиталь расщепление) 1969

OH, FH⁺, MeH, AlH⁺, SiH, PH, SH 5, 9, 11

Walker T. E. H.; Richards W. G. 14-12

154-1x801

Symposium Faraday Soc. 1968, (2), 64-8

initial computation of spin-

orbit coupling core factors in

difformic molecules 6704

10 20 1969 41. 106.963541

$I(HF, HF^+, DF, DF^+)$ $\bar{X}$ 814 1970
 $D_0(\underline{HF^+}, HF, DF, F_2)$ (1)

Brundle C.R.,

Chem. Phys. Lett., 1970, 7, v3, 317-322
(corr.)

Ionization and dissociation energies
of HF and DF and their bearing
on $D_0^{\circ}(F_2)$.

PuXue, 1971, 75125-

W

12



X1 2738

1971

HF⁺

HF

F₂D₀

nonres. up

(+2) IV

C.A. 1972, 76, 6

PmPur, 1972, 3243.3

29408u Experimental potential energy curves for X²Π and ²Σ⁺ states of HF⁺. Berkowitz, J. (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *Chem. Phys. Lett.* 1971, 11(1), 21-6 (Eng). The 4 vibrational bands obsd. in the photoelectron spectrum for the ²Σ⁺ state of HF⁺ indicate that the dissocn. energy (D₀) of HF cannot be significantly < 5.86 eV; thus, the D₀ of F₂ is ~1.59 eV. The DF photoelectron spectra confirm these results. The consts. ω_e (cm⁻¹), ω_ex_e (cm⁻¹), and r_e (Å) were 3016, 75, and 1.026 for the X²Π state of HF⁺; 1516, 113, and 1.20 for the ²Σ⁺ state of HF⁺. The ²Π_{3/2}-²Π_{1/2} splitting is ~30 meV. The potential-energy well depth was 3.59 (or 3.61) eV for the ²Π state of HF⁺ and 0.45 eV for the ²Σ⁺ state. Literature calcd. and exptl. data are discussed.

HF⁺

X1 2783

1971

критиче
номери
мерни

(19664k) Hartree-Fock energy curves for $X^2\Pi$ and $^2\Sigma^+$ states of HF^+ . Julienne, P. S.; Krauss, M.; Wahl, A. C. (Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *Chem. Phys. Lett.* 1971, 11(1), 16-20 (Eng). Hartree-Fock energy curves were calcd. for the $X^2\Pi$ and $^2\Sigma^+$ states of HF^+ and were applied to an anal. of the photoelectron spectra of HF . The $^2\Sigma^+$ energy curve has a barrier ~ 0.07 eV high primarily due to a repulsive ion-quadrupole interaction, and a depth of 0.37 eV. This curve will support 2 bound states and one shape resonance with a half-width of 0.015 eV. The energy curves are probably accurate to 0.1 eV, but results accurate to within 0.03 eV are required to resolve the exptl. questions on the dissocn. energy for the ground state of HF . The most recent exptl. photoelectron results of J. Berkowitz (1971) encouraged a model calcn. of the vibrational states of the $^2\Sigma^+$ state. Assuming a dissocn. energy of 0.45 eV and retaining the barrier, 3 bound and one shape resonance vibrational levels were calcd. for HF^+ in agreement with the results reported by Berkowitz.

C.A. 1972 46 4



 (+1) HF - photoelectron spectra

HF⁺

XI-2753

1971

7 Б14. Хартри-фоковские кривые потенциальной энергии $X^2\Pi$ и $^2\Sigma^+$ состояний молекулы HF⁺. Julien-
ne P. S., Krauss M., Wahl A. C. Hartree-Fock energy curves for $X^2\Pi$ and $^2\Sigma^+$ states of HF⁺. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 11, № 1, 16—20 (англ.)

Ограниченным методом Хартри—Фока рассчитаны кривые потенциальной энергии двух нижних электронных $X^2\Pi$ и $^2\Sigma^+$ состояний молек. иона HF⁺ с использованием базисов слейтеровских и гауссовых функций. Различие результатов, полученных с использованием обоих базисов, незначительно. Найдено, что: 1) состояние $^2\Sigma^+$ имеет потенциальный барьер (высотой 0,07 эв), вызванный конкуренцией дальнего действующего отталки-

расчет

м.п.

Do

X. 1972. 7

вания (ион—квадруполь) и близкодействующего притяжения; 2) глубина потенциальной ямы $^2\Sigma^+$ 0,37 эв, энергия диссоциации состояния $X^2\Pi$ 3,56 эв; 3) в потенциале состояния $^2\Sigma^+$ имеются два связанных состояния, разделенных энергией 0,16 эв и одно квазистационарное (на 0,043 эв выше границы диссоциации с полушириной 0,015 эв). Полученные результаты обсуждены в связи с данными фотоэлектронной спектроскопии (см. след. реф.). Согласно с эксперим. данными получается в предположении, что энергия диссоциации в состоянии $^2\Sigma^+$ равна 0,45 эв, а высота барьера совпадает с рассчитанной.

А. Зембеков

Расчет волнотр.: $(CH, CH^+, CH_2, CH_2^+, CH_3, CH_3^+)$
 симмет. E_i, V_i $(CH_4; CH_4^+, CH_5; CH_5^+, NH, NH^+)$
 сим. волн $(NH_2, NH_2^+, NH_3; NH_3^+; NH_4; NH_4^+; OH, OH^+, OH_2; OH_2^+; OH_3; OH_3^+; FH, FH^+, FH_2)$
 Lathian W.A., Mehre W.J., Curtis L.A.,
 Pople J.A.,
 J. Amer. Chem. Soc., 1971, 93, N24,
 6377-87

PX72

60

OH, HF⁺, HF, HF⁻, NeH⁺, NeH (εi, ζe, Do,
ii. n., paeicm) 1972

Bondybey V., Pearson P. K.,
Schaefer H. F. III, XI 3141

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

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

Re. Lues, 1972, 24524

5 10 (p)

HF^+

Hinkley R.K. ;
et al.

1972

расчет.

"Mol. Phys"

1972, 24, N5, 1095-102.

Комет. спин-орбит. взаимодей-
ствия ...

● (см. Вел; III)

MF+

XI-2932

1972

Op. your
handed.
step me;
He. exp.
pacer

117727c Electronic structure of HF^+ . Raftery, J.; Richards, W. G. (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *J. Phys. B* 1972, 5(3), 425-31 (Eng). Ab initio self-consistent field calcs. of potential energy curves for the ground and 1st excited states of HF^+ have been performed. The excited $A^2\Sigma^+$ state is bound, in agreement with the most recent exptl. results. Qual. arguments suggesting that the Hartree-Fock potential curves dissociate to the correct at. limits are borne out by the calcs. A previous suggestion that interaction of the ground state $x^2\Pi$ with an excited state significantly affects the shape of the curve is not supported. Calcs. have also been made of the perturbations between the lowest states due to spin-orbit interactions.

C.A. 1972. 76. 20, 117727c

HF+

XI-2932

1972

17 B78. Электронное строение HF+. Raftery J., Richards W. G. The electronic structure of HF+. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1972, 5, № 3, 425—431 (англ.)

Проведен расчет двух низших связанных состояний иона HF+ с хартри-фоковской точностью. Ряд более высоких состояний рассчитан с несколько меньшей точностью. Кроме основного состояния $X^2\Pi$, связанным является также состояние $A^2\Sigma^+$. Рассчитанные равновесные расстояния для этих состояний равны 0,98 и 1,22 Å соотв. (эксперим. данных нет), а теор. частоты колебаний в гармонич. приближении равны соотв. 3453 (3340 см^{-1}) и 1387 (1500 см^{-1}), где в скобках — эксперим. значения. Теор. потенциал ионизации состояния

расчет
87

X. 1972. 17

$X^2\Pi$ на 1,59 эв ниже, а для состояния $A^2\Sigma^+$ — на 1,23 эв ниже, чем соотв-щее эксперим. значение. На потенциальной кривой состояния $A^2\Sigma^+$ расчет обнаруживает максимум (высота барьера около 0,2 эв) на расстоянии порядка $2A$, где применимость метода Хартри—Фока вызывает сомнения. Из числа 8 остальных более высоких рассчитанных потенциальных кривых, $^4\Pi$ имеет неглубокий и узкий минимум.

Т. К. Ребане

HF⁺

X1-2932

1972

J. Raftery, W. G. Richards

J. Phys. B: Atom Molec. Phys. 1972

5, 425, (N3)

Электронная структура HF⁺

Расчеты ab initio потенциальных кривых основного и
первых возбужденных состояний HF⁺. Состояние A²Σ⁺ - стабильно

Табл. 1 Сравнение катод. и расчетных данных для спектров осес. Hf .

Свет.	Расчет.				Кат.			
	$\omega_e \text{ cm}^{-1}$	$\tau_e (\text{\AA})$	$T_e (\text{eV})$	$I. P. (\text{eV})$	ω_e	$\tau_e (\text{\AA})$	$T_e (\text{eV})$	$I. P. (\text{eV})$
$X^2\Pi$	3453	0.98		14.45	3340	—	0	16.04
$A^2\Sigma^+$	1387	1.22	3.41	17.56	1500	—	3.05	19.09

Полученные нами значения τ_e — в свет. $X^2\Pi$.

40226.7302
Ch, Ph, TE

HF⁺ N-3758
96201

1473
1838

Bruce R.E., Mitchell K.A.R., Williams M.L.
A comparison of perfect pairing and
molecular orbital methods for the
calculation of molecular properties
of HF and HF⁺.

"Chem. Phys. Lett.", 1973, 23, N 4, 504-507

(англ.)
(ср HF; III)

0050 ммк

034 035 0043

Рис. 1977, 62/4 ВИНТИ

HF⁺

On March 2106

1973

board
g-yu

Cade Paul E.

Huo Winifred .

" Atom. Data and Nucl.
Data Tables."

1973, 12 N5 415-66

IX-5150

1975

FH +

Avegg P. W.

Mon. Phys., 1975, 30,

расчет
эмис-спект.
вычисления.

N2, 579-596

X. 1976. N.3

См см. III

50703.7561

Ch, Ph, MGU, TC

41125

HF⁺ XI-4428

1975

4123

Čársky P., Kuhn J., Zahradnik R. Semiempirical all-valence-electron MO calculations on the electronic spectra of linear radicals with degenerate ground states. "J. Mol. Spectrosc.", 1975, 55, N 1-3, 120-130

(англ.)

ссылка СН; III

377 378 0343 0401 пик ВИНТИ
 CA 1975, 82 N 26, 177363

HF⁺

ommien 4059 1975

Figeys H.P; et al.

спектр. инт. Bull. Soc. Chim.
(E) Belg., 1975, 84,

N3, 145-58

HF⁺

12 Д257. Электронный спектр HF⁺. Gewurtz S., Lew H., Flainek P. The electronic spectrum of HF⁺. «Can. J. Phys.», 1975, 53, № 11, 1097—1108 (англ.; рез. франц.)

Впервые зарегистрирован спектр излучения HF⁺; для его возбуждения использован разряд низкого давления с накаливаемым катодом. Область спектра 3580—4830 Å, содержащая полосы системы A²Σ⁺—X²Π, сфотографирована при дисперсии 1,2 Å/мм. В спектре представлены 9 полос переходов между v''=0—2 и v'=0—3. Каждая полоса образована 12 ветвями, соотношение интенсивностей компонент подтверждает принадлежность системы переходу ²Σ—²Π. В результате анализа структуры полос определены вращательные константы верхнего и нижнего состояний перехода. Резкое уменьшение интенсивности линий с ростом N, свидетельствующее о преддиссоциации, дает для состояния A²Σ⁺ энергию диссоциации на H⁺(¹S) и F(²P_{1/2}) 3203±50 см⁻¹. Барьер с энергией 580 см⁻¹, предсказываемый теорией для потенц. кривой состояния A²Σ⁺, не проявляется в спектроскопич. данных вследствие сильного туннельного эффекта. Библ. 29.

В. А.

1975
3216
43252
англ.

XI-4593

ф. 1975
н 12
2257

HF⁺

omnuck 32164

1975

3252

105751n Electronic spectrum of hydrogen fluoride(+).
Gewurtz, S.; Lew, H.; Flainek, P. (Div. Phys., Natl. Res.
Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Phys.* 1975, 53(11),
1097-108 (Eng). The $A^2\Sigma^+-X^2\Pi$ emission spectrum of HF^+ ,
between 3580 and 4830 Å, was photographed at high resolu. and
measurements on 8 bands are reported. The anal. yields
rotational and vibrational consts. of the X state for $v = 0$ to 2
and of the A state for $v = 0$ to 3. A predissocn. by rotation in
the $A^2\Sigma^+$ state is obsd. and yields a dissocn. energy of 3203 ± 50
 cm^{-1} above the $v = 0, N = 0$ level of this state. This corresponds
to a dissocn. into $\text{H}^+(^1\text{S}) + \text{F}(^2\text{P}_{1/2})$. A detailed comparison with
previous results obtained from photoelectron and photoionization
expts. and from recent theor. calcns. is given.

(u.n.; do)

XI-4593

C.A. 1975. N12

60206.3690

Ch, TC

49587

HF+

1975

* 5-11503

Jaffe Richard L., Isaacson Alan D.,
Laing John R., Morokuma Keiji, George
Thomas F. Calculations of potential ener-
gy surfaces in the complex plane. V. The
 $2\Sigma^+$ and 2Π states of HF^+ . "Theor.
chim. acta", 1975, 40, N 3, 189-197
(англ.)

527 531

547

0555 ПНН

ВИНИТИ

*9 11503

1975

HF⁺Кб. ил.
фрагм

81:111895z Calculations of potential energy surfaces in the complex plane. V. The $2\Sigma^+$ and 2Π states of hydrogen fluoride(+). Jaffe, Richard L.; Isaacson, Alan D.; Laing, John R.; Morokuma, Keiji; George, Thomas F. (Dep. Chem., Univ. Rochester, Rochester, N.Y.). *Theor. Chim. Acta* 1975, 40(3), 189-97 (Eng). The energies of the $2\Sigma^+$ and 2Π states of the HF⁺ system were calcd. by the ab initio restricted Hartree-Fock method at a no. of real and complex values of the internuclear sepn. The energies of the assoc. spin orbit states are calcd. via a semiempirical scheme. The complex intersection point of these energy curves, an integral component of a semiclassical theory of electronic transitions, is detd. by the ab initio calens. The intersection point is also detd., for comparative purposes, by other methods of analytic continuation, i.e., Gaussian and rational-fraction fits to the real-valued energy calens. Semiclassical dynamical calens. of the cross section for the process $F(^2P_{3/2}) + H^+ \rightarrow F(^2P_{1/2}) + H^+$ using the various intersection points yield differences up to 20%.

C.A. 1976. 84 n 16

HF⁺

* 68-11503

1975

12 Б32. Расчет поверхностей потенциальной энергии в комплексной плоскости. V. Состояния $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ молекулы HF⁺. Jaffe Richard L., Isaacson Alan D., Laing John R., Morokuma Keiji, George Thomas F. Calculations of potential energy surfaces in the complex plane. V. The $^2\Sigma^+$ and $^2\Pi$ states of HF⁺. «Theor. chim. acta», 1975, 40, № 3, 189—197 (англ.)

расчет
поверхн.
потенц.
энергии

Ограниченным методом Хартри—Фока в описанном ранее варианте (см. часть III, РЖХим, 1975, 9Б67), рассчитаны низшие термы $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ системы HF⁺, коррелирующие при увеличении межъядерного расстояния R с F (2P) + H⁺. В кач-ве базиса использованы гауссовы функции (10s- и 6p-АО на F и 5s-АО на H), сгруппированные в 5s- и 3p-АО на F и 3s-АО на H. Спин-орбитальное взаимодействие учтено полуэмпири-

X 1976 N 12

чески в предположении, что константа взаимодействия не зависит от R . Найдено, что термы $^2\Sigma_{1/2}$ и $^2\Pi_{1/2}$, не пересекающиеся при действительных значениях R , пересекаются в комплексной плоскости R при $R_c = 7,49426 \pm 3,0087 i$ ат. ед. Аналитич. продолжение термов с действительной оси, использующее их представление в виде рациональной дроби от R и учитывающее корневую особенность разности термов, дает $R_c = 7,4348 \pm 3,1888 i$ ат. ед. Квазиклассич. расчет сечения перехода между компонентами ТС в процессе $F(^2P_{1/2}) + H^+ \rightarrow F(^2P_{3/2}) + H^+$ показывает, что это различие в точках пересечения ведет к расхождению сечений на 20%. Отмечается, что аналитич. продолжение термов, основанное на аппроксимации их разности гауссовыми функциями дает заметно худшие результаты.

Е. Е. Никитин

HF+

отпуск А-2948 1975

Рагиз А.А.

(с.п. до,
с.п.ном,
3)

В сб. "Линия жизни"
1975, том 2, 3-61, с.
Амурская.

50909.7342
Ph, TC, MGU

HF

++42529

1975

* 4-9734

Shaw R.W., Jr., Thomas T.D.

Auger electron spectrum and ionization potentials of the HF molecule.

"Phys. Rev. A : Gen. Phys.", 1975, 11, N 5,
1491-1497 (англ.)

0445

418 419

ВИНИТИ

B $\bar{X}$ - 85

1976

$Li_2, C_2, BH, BH^+, CH, CH^+, NH, OH, OH^+,$
 $FH, \underline{FH^+}$ (cit. novu; parvum)

Hucl F., Casado J., Ries M.A., Tatov V.

An. Quim. 1976, 72(6), 505-8

Theoretical study of force constants
iii) Interatomic forces in diatomic
molecules.

C.A. 1976, 85, 122, 168984C

10 (9)

60518.4281

TC, Ph, Ch

30526GR

1976

HF

2+

[Handwritten signature]

*

13-12827

Hillier I.H. Kendrick J. Configuration interaction calculations of the Auger spectrum of CH_4 , HF, H_2O and CO. "Mol. Phys.", 1976, 31, N 3, 849-853 (англ.)

0623

596 599 0.15

ВИНИТИ

HF⁺

онн 5218

1977

(и.к.
хеммол.)

Bogan D. J., et al.
Phys. Chem. 1977, 81,
J. No. 888-98

70512.4538

Ph. Ch. TC, MGU

(кв. мех. паери)

41125

HF+

1977

*18-18396

Green Sheldon, Zare Richard N.

Ab initio calculation of the spin-rotation constant for $^2\Pi$ diatomics. Test of the Van Vleck approximation. "J. Mol. Spectrosc.", 1977, 64, N 2, 217-222 (англ.)

0875

827 832

86 h

ВИНИТИ

сч. 04 ; III

HF⁺

ammuch 5471

1974

Huntress W.T., Jr.

Astrophys. J. Suppl. Ser.,
1977, 32, (4), 495-514.

(AH⁺; I)

(cell. H⁺; III)

HF⁺

#4-17790

1977

Rosmers P, et al

J. Chem. Phys, 1977

66

13-19



(en. LiH⁺; III)

(u.n)

1974

HF +

14 Б38. Неэмпирические расчеты по методу валентных схем. VII. (HF, HF⁺ и H₂F⁺. Tantardini G. F., Simonetta M. Ab initio valence bond calculations. VII HF, HF⁺, and H₂F⁺. «Int. J. Quant. Chem.», 1977, 12, 3, 515—525 (англ.; рез. франц., нем.)

м. н.

геометрия

Методом валентных схем в базисе сгруппированных слейтеровских орбиталей выполнены расчеты энергий, равновесных геометрий и спектроскопич. характеристик основного и ряда возбужденных состояний молекул HF, HF⁺ и основного состояния H₂F⁺. Базисные наборы слейтеровских орбиталей содержали АО 1s, 2s и 2p на ядре F и одну АО 1s на ядре H. Вычисления проведены в двух базисах, отличающихся числом АО 2s и 2p на ядре F. Для молек. расчетов в обоих вариантах было построено 6 сгруппированных АО: 1s_F, 1s_H, связывающая и несвязывающая гибридизованные sp-орбитали на ядре F и две АО фтора 2p_π. Св-ва состояний HF и HF⁺ определены в каждом из базисов в двух приближениях: с учетом всех электронов и в валентном приближении (2 электрона на АО 1s фтора совмещены с ядром). Для HF вычислены первые потенциалы ионизации. Характеристики основного состояния H₂F⁺ рассчитаны только во 2-м приближении. Различия в полных

(+1)

⊗

⊗

2, 1978, N14

энергиях (E) и энергиях диссоциации (D), обусловленные изменением размерности базиса исходных АО и способа учета внутренних электронов, имели порядок 10^{-3} ат. ед. Сравнение с результатами более точных расчетов и эксперим. данными показало, что описанный подход обеспечивает хорошее приближение по D и силовым постоянным и несколько худшее — по E , дипольным, моментам, геометрии, и зависящим от нее вращательной постоянной и постоянной ангармоничности. Опыт предшествовавших расчетов свидетельствует также, что геометрия м. б. аппроксимирована значительно лучше, если в базис слейтеровских АО включить поляризац. функции.

В. Ф. Хрустов

HF⁺

1977

H₂F⁺

88: 41934t Ab initio valence bond calculations. VII. Hydrogen fluoride and hydrogen fluoride(1+) ions (HF⁺ and H₂F⁺). Tantardini, G. F.; Simonetta, M. (Ist. Chim.-Fis., CNR, Milan, Italy). *Int. J. Quantum Chem.* 1977, 12(3), 515-25 (Eng). Ab-initio VB calens. for the ground and excited states of HF and HF⁺ are presented. Total energies, equil. geometries, dissoen. energies, dipole moments, and spectroscopic consts. for HF and HF⁺ were calcd. The photoelectron spectrum of HF was examd. and interpreted by means of the VB formalism. The ground state of the protonated species H₂F⁺ was investigated.

Croft, G. F.,

M. R.

Ref. sec. paper

(+1)

☒



C.A., 1978, 82, N6

HF⁺

интерес.

И.К. Хеминно
интерес.

1978

23 Б156. Инфракрасная хемилюминесценция в реакции атомов водорода с фторэтиленами. Jones W. E., Matinopoulos G., Wasson J. S., Liu M. T. H. Infrared chemiluminescence from the reaction of hydrogen atoms with fluoroethylenes. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1978, Part 2, 74, № 5, 831—842 (англ.)

Изучены р-ции атомов водорода с фторзамещ. этиленами C_2F_4 , C_2HF_3 , 1,1- $C_2H_2F_2$ и C_2H_3F . Исследовано изменение интенсивности появляющейся в ходе этих р-ций ИК-хемилюминесценции (область 2,3—3,5 мкм) возбужденной молекулы HF^+ (вплоть до $v'=3$) при различных давл. в присутствии Ar или He. Полученные результаты интерпретированы с помощью простой модели Берри. В. Тремблер.

2-1978, N23

HF⁺

homocyclic,
g-yus

1978

88: 1980701 Theoretical study of reactive processes in the FH₂⁺ system by ab initio MCSCF-CI and diatomics-in-molecules calculations. Kendrick, J.; Kuntz, P. J.; Hillier, I. H. (Ber. Strahlenchem., Hahn-Meitner-Inst. Kernforsch. Berlin G.m.b.H., Berlin, Ger.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(5), 2373-85 (Eng). Ab initio MCSCF-CI calns. of the diat. potential curves of HF⁺ arising from H⁺ + F(2P) and F⁺(3P) + H(2S) atoms are used in the diats.-in-mols. (DIM) formalism to obtain potential energy surfaces for six ³A' and six ³A'' states of FH₂⁺. Energy splittings between the 2 lowest ³A' surfaces in the region of an "avoided crossing" seam in the entrance channel are made to agree with ab initio calns. on the triat. FH₂⁺. The resulting DIM surfaces are used to find energetically accessible pathways for the reaction F⁺(3P) + H₂(X¹Σ_g⁺) → HF⁺(X²Π) + H and related reactions which were obsd. exptl. Empirical approxns. to the interaction between F⁺(1D) and H atoms are used in constructing model diabatic potential surfaces for the ¹A' states of FH₂⁺. Intersections of these surfaces illustrate what products might be expected from the reaction of F⁺(1D) metastable ions with H₂ mols.; results support recent exptl. evidence that the dynamics of F⁺(1D) ions reacting with H₂ are quite different from those of F⁺(3P) ions.

C.A. 1978, 88, N26

HF⁺ (с.н., спектр) XI-6225 1978

Van Sprang H.A., Heer F.J. de.

Chem. Phys., 1978, 33, n1, 73-78 (англ.)

A study of the emission spectrum
of HF excited by electrons.

Proc. Acad. Sci., 1979, 45 124

10

Ⓟ

AM. XI-6225

HF⁺

Вращательные
уровни,
релаксации.

1978
5 Д757. Наблюдение высоких вращательных уровней молекул HF, образующихся в химической реакции в присутствии буферного газа (Ar) при давлении 1 мм рт. ст. Sung J. P., Setser D. W. Observation of high rotational levels of HF formed by chemical reaction in one torr of argon buffer gas. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 8, 3868—3869 (англ.)

В спектральной области 4500—3600 см⁻¹ исследована хемилюминесценция молекул HF⁺, образующихся в газо-фазных химич. реакциях атомарного фтора с HJ, HBr, H₂S, H₂CO, SiH₄ и GeH₄. Установлено, что релаксация молекул HF⁺, возбужденных на высокие ($J \geq 10$) вращательные уровни колебательных состояний $v \sim 1 \div 6$, даже в присутствии буферного газа (Ar) при давл. 1 мм рт. ст., характеризуется значительно меньшей скоростью, чем релаксация с уровнями $J \leq 9$. Замена Ar на He увеличивает скорость вращательной релаксации HF⁺. Сделан вывод, что в указанных условиях может наблюдаться сильная инверсия населенности между вращательными уровнями HF⁺. Полученные данные качественно согласуются с результатами исследования характеристик лазера на вращательных переходах HF. С. Л.

Ф. 1978. N 5

HF⁺

[оттиски 6826]

1978

Van Sprang H.A.

спектр
исследован.

Смет. Phys., 1978, 33, 21,
73-78 (англ.)



(см. HF) III

HF⁺

J. M. M. C. 6784

1978

Lygboen

X²Π

89: 50688p A-Type doubling and spin-doubling in hydrogen fluoride(+). Wilson, I. D. L. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 70(3), 394-404 (Eng). Calcns. were performed on the A-type doubling and spin-doubling parameters of HF⁺. Agreement was obtained with expt. if continuum vibrational levels of the A²Σ⁺ state were included in the perturbation series used to calc. the parameter p'' and q'' for the X²Π state. This is in complete contrast to the case of the isoelectronic mol. OH, for which agreement is obtained with just the bound vibrational levels of the A²Σ⁺ state.

C. A. 1978. 89 N 6

MMH FH⁺ cinnuon 9944 1980

Trivedi H.P., et al

pacrem
u.n. J. Chem. Phys., 1980, 72,
N5, 3438-3439.



(see Bet) III

HF⁺

1981

Д63. Прямое суммирование по колебательным уровням: Λ -удвоение в HF⁺. Direct summation over vibrational levels: Λ doubling in HF⁺. Hutson Jeremy M., Cooper David L. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 9, 4502—4506 (англ.)

Величина Λ -удвоения в электронно-колебательно-вращательных спектрах двухатомных молекул выражается через параметры p и q , представляющие собой бесконечные суммы по колебательным состояниям от поправок второго порядка операторов спин-орбитального и кориолисова взаимодействия. Для вычисления этих сумм используется процедура, в которой суммы вычисляются непосредственно из заданных потенц. кривых без привлечения численных значений колебательных волн. ф-ций. При этом учитываются как связанные, так и несвязанные состояния. Выполнен расчет величин p_v и q_v для колебательных уровней с $v \leq 2$ электронного состояния $X^2\Pi_i$ иона HF⁺. Отмечено, что вклад непрерывного спектра в Λ -удвоение сравним с вкладом дискретного спектра.

М. Р. Алиев.

расчет

М. Р.

ф. 1982, 18, 15.

HF⁺

1981

10 Б124. Прямое суммирование по колебательным уровням: Λ -удвоение в HF⁺. Hutson J. M., Cooper D. L. Direct summation over vibrational levels: Λ doubling in HF⁺. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 9, 4502—4506 (англ.)

Методом Хэутсона и Говарда («Mol. Phys.», 1980, 41, 1113), развитым для проведения промежуточ. суммирований по колебательным состояниям в выражениях для параметров Λ и спинowego удвоения и основанным на вычислении этих выражений непосредственно из потенциальных кривых (метод прямого решения), проведен новый расчет параметров Λ удвоения молекулы HF⁺. Отмечается, что этот метод не требует знания колебательных волновых функций для возмущенных электронных состояний и работает как для связанных, так и не связанных возмущенных состояний. В. М. Михайлов.

М.П.,

Λ -удвоение

X. 1982, 19, N 10.

FH⁺

Comment 11767 | 1981

Rosmus P., et al.

(70) J. Chem. Phys., 1981,
74 (7), p. 4217.

Comment on ● the ...

HF+

Омница 11638

1981

Segal G. A., et al.

расчет
кривых
потенци.
энергии

Chem. Phys., 1981, 56
321-26.

(см. ● HF; III)

HF⁺

1982

Bessis N., Tergiman Y. S.

раствор
в н.

J. Mol. Spectrosc.,
1982, 93, N1, 16-45.

( CN; III)

HF⁺

1982

Bettendorff Marc,
Buerker Robert J.,
et al.

расчёт
номеров
кривых

Z. Phys., 1982, A304,
N2, 125-135.

(см. HF; III)

FH^+

1982

5 Д53. Расчет двухатомных фрагментов для многоатомных систем методом атомов в молекулах FH и FH^+ . Atoms-in-molecules calculations on diatomic fragments of polyatomic systems. FH and FH^+ . Polák R., Vojtík J., Schneider F. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 85, № 1, 107—110 (англ.)

Методом атомов в молекулах Моффита проводится расчет кривых потенц. энергии (КПЭ) фрагментов FH и FH^+ для использования их в расчетах методом двухатомных фрагментов в молекулах системы FH_2^+ . Используются два варианта метода: а) эрмитовский метод Моффита; б) ортогонализированный метод Моффита. В качестве базисных ф-ций использовался набор $1s$, $2s$, $2p$ гауссовых ф-ций. Рассчитанная КПЭ основного $^1\Sigma^+$ -состояния HF хорошо согласуется с экспериментальной РРК кривой, за исключением области малых расстояний, где она имеет более крутой полог. Все остальное кр. кр. коррелирует с H ($1s$) состоянием H , а остальные — с известными и соответствующими КПЭ. Для фрагмента HF^+ $^2\Sigma^+$ являются связанными результатами. А. Зембеков

и.п., расчет

ф. 1982, 18, №5.

FH⁺

[Om. 16886]

1983

Farrell L., Pople J.A.
et al.

ab initio
pacrēu

J. Phys. Chem., 1983,

87, N1, 79-82.

HF⁺

1983

Rosmus P.

спектр,
гиповоль-
тевий
соединений
Bull. Soc. chim. Belg., 1983,
92, n 6-7: 16th Int Sump.
Free Radicals. Laer Zelle-
Ottignies, Sept. 12-16, 1983,
603-604.
(see ArH⁺; III)

HF⁺

Om 19183

1984

12 Л164. Измерение вращательного спектра иона HF⁺ методом спектроскопии лазерного магнитного резонанса. Measurement of the rotational spectrum of HF⁺ by laser magnetic resonance. Hovde D. C., Schäfer E., Strahan S. E., Ferrari C. A., Ray D., Lubic K. G., Saykally R. J. «Mol. Phys.», 1984, 52, № 1, 245—249 (англ.)

М.П.

Методом спектроскопии лазерного магн. резонанса получены спектры вращательных переходов в состоянии X²Π иона HF⁺. С использованием линий лазеров на CH₂F₂ (λ=122,5 мкм), CH₂DOH (λ=124,4 мкм) и CH₃OH (λ=186,0 мкм) исследованы переходы J=3/2→5/2, Ω=3/2 и J=1/2→3/2, Ω=1/2. В спектрах разрешена сверхтонкая структура, отвечающая ядрам Н и F. На основании анализа спектра перехода J=3/2→5/2, Ω=3/2 определены молекулярные постоянные состояния X²Π(v''=0) иона HF⁺. Библ. 19. А. Е.

ф. 1984, 18, №12.

HF⁺

ОМ. 19/83

1984

21 Б1258. Измерение вращательного спектра HF⁺ с помощью лазерного магнитного резонанса. Measurement of the rotational spectrum of HF⁺ by laser magnetic resonance. Hovde D. C., Schäfer E., Strahan S. E., Ferrari C. A., Ray D., Lubic K. G., Saykally R. J. «Mol. Phys.», 1984, 52, № 1, 245—249 (англ.)

Вращательные переходы в состоянии X²Π молек. иона HF⁺ исследованы с помощью спектроскопии лазерного магнитного резонанса при использовании линии 122,5 мкм лазера на CH₂F₂ и линии 122,4 мкм лазера на CH₂DOH. Изучено 20 резонансных линий, обусловленных переходами $J=3/2 \rightarrow 5/2$, $\Omega=3/2$ и $J=1/2 \rightarrow 3/2$, $\Omega=1/2$ с полностью разрешенным сверхтонким расщеплением от ядер фтора и водорода. Полученные эксперим. данные обработаны с помощью модельного эффективного оператора, учитывающего ядерный спин только ядер фтора. Для состояния $v=0$, X²Π уточнены значения вращат. постоянных $B_0=513070(10)$ МГц, $D_0=66,23(27)$ МГц, и параметров Λ-удвоения $p=7741(19)$ МГц, $q=-1214,9(18)$ МГц.

Б. И. Жилинский

М.П.

X. 1984, 19,
N 21

HF⁺

Dm. 18728

1984

' 100: 74243m PNO-CEPA and MCSCF-SCEP calculations of transition probabilities in hydroxyl radical, hydrogen fluoride (HF⁺), and hydrogen chloride (HCl⁺). Werner, Hans Joachim; Rosmus, Pavel; Schaetzl, Wolfgang; Meyer, Wilfried (Fachber. Chem., Univ. Frankfurt/Main, D 6000 Frankfurt/Main, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(2), 831-9 (Eng). Electronic transition moment functions were calcd. for the A ²Σ⁺-X²II transitions in OH, HF⁺, and HCl⁺ by using RHF, pseudonatural orbital PNO-CI, PNO-CEPA, MCSCF, and MCSCF-SCEP (self-consistent electron pair) wave functions. The vibrational band transition probabilities were obtained, and the resulting radiative lifetimes were compared with measured values. For OH and HCl⁺ the deviations are smaller than 10%, but the theor. lifetimes of HF⁺ are larger by about 300% than the exptl. values. For the electronic ground states of HF⁺ and HCl⁺ vibrational transition probabilities were calcd. from MCSCF-SCEP dipole moment functions. Both ions are predicted to be excellent absorbers and emitters in the IR spectral region.

вероятн.
перехода,
момент
т. перехода

(теор. расч.)

ⓂⓂ HCl⁺

C.A. 1984, 100, N10

HF⁺

1986

Requena A., Zuñiga J.,
et al.

M. N.,
Ei;

J. Quant. Spectrosc. and
Radiat. Transfer, 1986,
35, N1, 29-37.

(Cell.  CN; III)

HF⁺

1987

108: 227145y. Rotational predissociation of hydrogen fluoride ion (1+). Lee, A. R.; Hamdan, M.; Brenton, A. G.; Beynon, J. H. (Dep. Chem., Univ. Coll. Swansea, Swansea, UK SA2 8PP). *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 1987, 1(2), 26-7. (Eng). The unimol. translational energy spectrum of the H⁺ fragments from HF⁺ indicates several discrete energy releases. It is suggested that these energy releases are caused by the predissocn. of the ²Π state in rotational levels $J \leq 20$.

Гравиметрич
предиссоц.

с. А. 1988, 108, N 26

$FH^+(z)$

[ser. 25904] 1987

Pople J A.

$\Delta_f H^\circ$,
u.n.

J. Phys. Chem., 1987,
91, N1, 155-162.

HF⁺

1988

1 Д45. Теоретическое исследование диссоциации ионов HF⁺ и DF⁺ в состоянии $B^2\Sigma^+$ в приближении классических траекторий. Theoretical study of the dissociation of the HF⁺ and DF⁺ ions in the $B^2\Sigma^+$ state by classical trajectories / Cacelli Ivo // Chem. Phys.— 1988.— 124, № 3.— С. 347—358.— Англ.

С учетом взаимодействия конфигураций рассчитаны адиабатич. кривые 12 нижних электронных состояний, принадлежащих симметрии $^2\Sigma^+$. Движение ядер рассматривалось в приближении классич. траекторий. Начальные состояния выбирались в соответствии с ф-цией распределения Вигнера. Схема распада включает сложные неадиабатич. взаимодействия с одновременным взаимодействием нескольких адиабатич. состояний. Приводится сравнение с эксперим. данными. Планируется проведение квантовых расчетов с использованием полученных потенц. кривых. Однако основные особенности процессов диссоциации достаточно хорошо описываются и в полуклассич. приближении.

Г. К.

М. П.

(1) X

ср. 1989, № 1

HF⁺

1988

1 Б4023. Теоретическое исследование диссоциации ионов HF⁺ и DF⁺ методом классических траекторий в B²Σ-состоянии. Theoretical study of the dissociation of the HF⁺ and DF⁺ ions in the B²Σ⁺ state by classical trajectories / Sacelli I. // Chem. Phys.— 1988.— 124, № 3.— 347—358.— Англ.

В широком базисе гауссовых ф-ций с учетом КВ рассчитаны потенциальные кривые 12-ти низших состояний симметрии ²Σ иона HF⁺, а также матричные элементы неадиабатич. связи между термами. В расчете полностью игнорировалось спин-орбитальное взаимодействие. Эти результаты использованы для формулировки полуклассич. ур-ний неадиабатич. переходов при диссоциации иона HF⁺, возникающего при ионизации HF электронным ударом. Ур-ния проинтегрированы вдоль траектории, рассчитанной для эффективной само-

расчет
потенц крив

Х. 1989, N1

согласованной потенциальной энергии, к-рая определялась усреднением по нестационарной электронной волновой ф-ции. Полученные результаты предсказывают, что при диссоциации состояния $B^2\Sigma$ иона HF^+ при франк-кондоновской ионизации возникает $\sim 60\%$ ионов F^+ в различных ридберговских состояниях. Атомы водорода, к-рые образуются при этой диссоциации, находятся гл. обр. в основном состоянии (95%).

Е. Е. Никитин



FH⁺

1988

Hirota E.

ИК
лазерн.
спектр

Philos. Trans. R. Soc.
London, A 1988, 324
(1578), 131-9.

●
(см. FHF⁻; III)

HF⁺

1988

15 Б1050. Об изучении поляризуемостей и гиперполяризуемостей с использованием волновых функций неограниченного метода Хартри—Фока. Примеры: NF^+ и HCl^+ . On the study of polarisabilities and hyperpolarisabilities with an unrestricted Hartree—Fock wave function. Case study: HF^+ and HCl^+ . Waite J., Papadopoulos M. G. «J. Mol. Struct. Theochem», 1988, 164, № 3—4, 413—415 (англ.)

Средняя поляризуемость α и средн. первая и вторая гиперполяризуемости β и γ -ионов HF^+ и HCl^+ рассчитаны с помощью самосогласованной теории возмущений Мак—Вини на основе волновых функций неограниченного метода ССП. Исследована зависимость α , β и γ от числа включенных в базис поляризац. и диффузных функций и от их экспоненциальных параметров. Отмечена высокая чувствительность гиперполяризуемостей к изменениям базисного набора.

А. А. Сафонов

М.П.

(7) 

X. 1988, 19, N 15

HCl^+

HF⁺

1989

2 Б1291. Внутридоплеровская прямая инфракрасная лазерная абсорбционная спектроскопия в пучках быстрых ионов: сверхтонкая структура фтора в HF⁺. Sub-Doppler direct infrared laser absorption spectroscopy in fast ion beams: The fluorine hyperfine structure of HF⁺ / Coe J. V., Owrutsky J. C., Keim E. R., Agman N. V., Hovde D. C., Saykally R. J. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 8.— С. 3893—3902.— Англ.

Разработан новый метод измерения колебательно-вращат. спектров молек. ионов с внутридоплеровским разрешением ~20 МГц, в к-ром простота и общность непосредственного детектирования поглощения сочетается с селективностью и высокой точностью лазерного метода с использованием пучков быстрых ионов. Методу дано название DLASFIB, что означает «прямая лазерная абсорбц. спектроскопия в быстрых ионных пучках» (НЛАСБИП). Возможности нового метода продемон-

М.А.

Х. 1990, №2.

стрированы на примере исследования сверхтонкой структуры колебательно-вращат. переходов в состоянии $X^2\Pi_{1/2}$ иона HF⁺. Всего измерен 31 переход с абс. точностью частотных измерений 100 МГц и относит. точностью не хуже 5 МГц. С учетом ИК- и ДИК-данных определены вращат. спин-орбитальные постоянные и постоянные Λ -удвоения.

С. Н. Мурзин



HF⁺

1989

/ 110: 239396k Sub-Doppler direct infrared laser absorption spectroscopy in fast ion beams: the fluorine hyperfine structure of fluoroniumyl (HIF⁺). Coe, J. V.; Owrutsky, J. C.; Keim, E. R.; Agman, N. V.; Hovde, D. C.; Saykally, R. J. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(3), 3893-902 (Eng). The development is repeated of a new general technique for measuring vibration-rotation spectra of mol. ions with sub-Doppler resolu. and with accurate detn. of the mass and no. d. of the carriers of all spectral features. With this method, called direct laser absorption spectroscopy in fast ion beams (DLASFIB), the 1st observation was made of direct absorption of photons by ions in a fast ion beam. Hyperfine-resolved vibration-rotation transitions of HF⁺ were measured, and along with optical combination differences and laser magnetic resonance data, were analyzed to yield the fluorine hyperfine parameters a , b , c and d for both $v = 0$ and $v = 1$ in the X²Π state. Comparisons with many-body perturbation theory results are presented.

сверхтонкая
структура

С.А. 1989, 110, N 26

HF⁺

1989

Торсиенков В. М.,
Ракков Г. М. и др.

Торск. ун-т. Торский, 1989.

с. 7. 18 с. Библиогр. 3 маэв.

Рус. деп. в ВИННИТИ 21.03.89,
№ 1785 - ● В89.

(сер. У₂; III)

HF⁺

(Om 33126)

1989

11 Б1371. Лазерная спектроскопия с модуляцией скорости молекулярных ионов: Вращательно-колебательный спектр HF⁺ с разрешенной сверхтонкой структурой. Velocity modulation laser spectroscopy of molecular ions: The hyperfine-resolved rovibrational spectrum of HF⁺ / Hovde D. C., Keim E. R., Saykally R. J. // Mol. Phys.— 1989.— 68, № 3.— С. 599—607.— Англ.

М.П.

Методом лазерной спектроскопии с модуляцией скорости молек. ионов в пучке при использовании лазера на центре окраски в обл. частот 2950—4000 см⁻¹ с точностью 0,003 см⁻¹ измерено 34 перехода R-ветви полосы $v=1-0$ иона HF⁺ в электронном состоянии X₂Π. Для переходов с низкими значениями J измерена



X. 1990, N 11.

F — сверхтонкая структура переходов. Анализ полученного спектра выполнен с учетом центробежного искажения, Λ — удвоения, F — расщепления и с использованием известных электронных спектров и данных по лазерному магнитному резонансу. Определены частота колебат. перехода $2912,5223(43) \text{ см}^{-1}$ и вращат. постоянные в состояниях $v=0$ и $v=1$, соотв., $B=513073,5(92)$ и $487406(12) \text{ МГц}$. Полученные результаты согласуются с данными для родственных молек. ионов.

С. Н. Мурзин

HF⁺

(Om 33 126)

1989

UK chemist,
M.A. B X27
COCMOETUM

112: 44623r Velocity modulation laser spectroscopy of molecular ions. The hyperfine-resolved rovibrational spectrum of fluoroniumyl (HF⁺). Hovde, David C.; Keim, Eric R.; Saykally, Richard J. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Mol. Phys.* 1989, 68(3), 599-607 (Eng). Thirty-four $v = 1 \leftarrow 0$ R branch IR transitions in the X₂Π states of the HF⁺ mol. ion were measured by velocity modulation laser absorption spectroscopy. Fluorine hyperfine structure was resolved for low J transitions. From a weighted fit of all available high resolu. data, values were detd. for the $v = 0$ and $v = 1$ fluorine hyperfine consts. (except b(1), λ-doubling parameters, rotational and centrifugal distortion consts. and the vibrational band origin. Mol. expectation values derived from the hyperfine consts. are compared to similar quantities for OH and NH⁻. An anal. is presented for the $v = 0$ proton hyperfine structure obsd. previously by laser magnetic resonance.



C.A. 1990, 112, N6

MF+

1989

11 Д123. * * * Метод ЧПДП/С-КВ для учета спин-орбитального взаимодействия: применение к гетероядерным двухатомным молекулам из атомов основных подгрупп и переходных металлов. A spin-orbit interaction enhanced INDO/S-CI technique: Applications to main group and transition metal heteronuclear diatomic molecules / Kotzian Manfred, Rösch Notker, Pitzer Russell M., Zerner Michael C. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 160, № 2.— С. 168—174.— Англ.

М. П.

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ЧПДП/С (в спектроскопич. параметризации) с учетом конфигурац. взаимодействия (КВ), модифицированным для включения спин-орбитального взаимодействия, исследовано электронное строение HF^+ , HCl^+ , HBr^+ , HJ^+ , NH^+ , OH , NH , OH^+ , NO , CO , TiO в различных состояниях. Полученные результаты позволяют удовлетворительно интерпретировать спектроскопич. данные и спин-орбитальное расщепление. Отмечено, что большинство переходов для TiO можно охарактеризовать как атомоподобные. Для состояния $E^3\Pi'$ константа спин-орбитального взаимодействия оценена в 85 см^{-1} .

ф. 1990, № 11

В. Л. Лебедев

FM^+

1990

Back K. K., Lee Yoon
Seep.

J. Chem. Phys. 1990.

u.n.

93, N 8. C. 5778-5782.

(see.  BM^+ ; III)

HF⁺

DM 34836

1990

6 B1041. Зависимость от базиса и от выбора представления неэмпирических радиационных времен жизни для состояния $A^2\Sigma^+$ молекулы HF⁺. Basis set and gauge dependence of ab initio radiative lifetimes for the $A^2\Sigma^+$ state of the HF⁺ molecule / Cacelli Ivo // Chem. Phys. Lett.—1990.— 174, № 1.— С. 37—45.— Англ.

Рассмотрены способы неэмпирич. расчета радиац. х-к электронных переходов двухатомных молекул с использованием представления матричных элементов через дипольные операторы импульса и координаты. Конкретные вычисления выполнены для переходов между состояниями $A^2\Sigma^+$ и $X^2\Pi$ иона HF⁺. Потенциальные кривые и волновые ф-ции определены методами Хартри—Фока и конфигурац. вз-вия в области межъядерных расстояний от 1,2 до 2,8 ат. ед. Сопоставлены результаты, полученные с шестью базисными наборами сгруппир. гауссовых ф-ций, по разному учитывающими поляризац. АО. Сделано заключение, что использование координатного представления позволяет получить более стабильные результаты по отношению к вариациям базиса.

А. В. Немухин

М.А.

Х. 1991, № 6

16F

1990

10 Д119. Анализ подхода КВПИО/ДСКВ для описания характера однократной связи в HF и F_2 . Analysis of the CIPSI/DCCI approach to characterize the HF and F_2 single bond / Merchan Manuela, Daudey Jean-Pierre, Gonzalez-uque Remedios, Nebot-Gil. Ignacio // Chem. Phys.— 1990.— 141, № 2—3.— С. 285—296.— Англ.

М.П.

Обсуждено использование метода КВ с пертурбационным итерационным отбором конфигураций (КВПИО), дополненного условием диссоциационной согласованности (т. е. отбираются только те конфигурации, которые обеспечивают получение корректных диссоциационных энергий) (ДСКВ), для расчетов энергетических и структурных характеристик молекул с однократной связью. В качестве примера выполнены расчеты энергии и равновесных межъядерных расстояний молекул HF и F_2 . Отмечено, что полученные результаты хорошо согла-

(11) 18

ср. 1991, п. 10

суются с результатами расчетов с использованием полного КВ и с имеющимися эксперим. данными, и, тем самым, метод КВПИО/ДСКВ может быть успешно использован для описания молекул, аналогичных рассмотренным. Существенно при этом, что данный метод позволяет существенно уменьшить вычислительные затраты без ухудшения точности получаемых результатов. Библи. 34.

А. И. К.

HF

1990

19 Б1032. Анализ подхода CIPSI/DCCI для описания простой связи в HF и F₂. Analysis of the CIPSI/DCCI approach to characterize the HF and F₂ single bond / Merchan Manuela, Daudey Jean-Pierre, Gonzalez-Luque Remedios, Nebot-Gil Ignacio // Chem. Phys.— 1990.— 141, № 2—3.— С. 285—295.— Англ.

Исследованы возможности учета основных корреляц. вкладов в энергию диссоциации молекул HF и F₂ при использовании компактных конфигурац. разл. В основу подхода положена схема диссоциационно согласованного конфигурац. взаимодействия (DCCI). Для отбора наиболее важных вкладов в DCCI применялась вариационно-пертурбац. процедура CIPSI. Наибольший из использованных базисов включал наборы сгруппир.

М.А.

(4) ~~17~~

X. 1991, N 19

F₂

гауссовых ф-ций $(6s6p2d1f)/[5s4p2d1f]$ на F и $(4s1p)/[2s1p]$ на H. Схема DCCI усовершенствована путем включения дисперсионных эффектов, что позволило существенно улучшить описание молекулы F_2 . Результаты расчетов методом CIPSI/DCCI хорошо согласуются с данными полного метода конфигурац. взаимодействия.

А. А. Сафонов

HF⁺

On 35868

1991

/ 114: 111706b Photofragment spectroscopy of fluoroniumyl (HF⁺). Cosby, P. C.; Helm, H.; Larzilliere, M. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(1), 92-105 (Eng). Electronic absorptions leading to predissocn. of the HF⁺ ion are obsd. by coaxial laser-ion beam photofragment spectroscopy. The absorptions occur in the $A^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi$ system and terminate in the $N = 4, v = 3$ level of the A state which predissociates into $H^+ + F$. The (3,4) band of this system is obsd. for the first time and the observations extend earlier emission measurements in the (3,0) and (3,2) bands to higher rotational levels. In addn., the nuclear hyperfine structure of the ion is obsd. Extended mol. consts. are derived for the X and A states and the first values are given for the hyperfine structure consts. of the A state.

ll. A.

$A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$

C. A. 1991, 114, N/2

HF

1991

Hedderch H. G.,
Frum C. I. et al.

v.n. Can. J. Chem. 1991, 69
(11), 1659-71.

( cu. LiF; III)

FH**

Liu Shu-Bin, Liu Xiao-Yu 1991
et al.

M.P. J. Mol. Struct. Theorem.
1991, 251, 27-81

(coll. Lih**;
● III)

FH 1991
Sara Michel, Leroy G.

g. mol. Struct. Thechem.
M.N., 1991. 226, N3-4. C. 307-
325.

$\Delta_f H$

(corr. ● LiH; $\frac{I}{II}$)

MF

1991
Sini Gjergji, Maitre Ph.
et al.

J. Mol. Struct. Theochem.

vol. n. 1991, 229, C: 163-168.

(Cell. ● M₂; III)

HF

1991

18 Б1030. Уточненные потенциальные кривые и энергии диссоциации HF, DF и TF. Improved potential energy curves and dissociation energies for HF, DF and TF / Zemke Warren T., Stwalley William C., Coxon John A., Hajigeorgiou Photos G. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 177, № 4—5.— С. 412—418.— Англ.

Получены новые уточненные потенциальные кривые основных электронных состояний молекул HF, DF и TF, основанные главным образом на эксперим. спектроскопич. данных. При построении кривых использован предложенный ранее ПТ (Coxon J. A., Hajigeorgiou P. G. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138.— С. 89.) и дальнодействующий ПТ, включающий дисперсионный и обменный вклады. Дальнодействующие вклады уточнены при сопоставлении рассчитанных энергий и ширин ряда квазисвязанных уровней с эксперим. значениями. Получены новые точные значения энергии диссоциации D_e $49\,362 \pm 5$, $49\,346 \pm 8$ и $49\,341 \pm 9$ см⁻¹ для HF, DF и TF, соотв. Предсказаны не наблюдавшиеся экспериментально колебат. уровни $E_{v,J=0}$ для HF ($v=20$, на 23 см⁻¹ ниже диссоциац. предела) и DF ($v=27$ и 28, на 144 и 10 см⁻¹ ниже диссоциац. предела, соотв.). А. А. Сафонов

М. А. Д.

ix (12)

X. 1991, N 18

HF⁺

1992

Т 8 Б1064. Теоретическое изучение диссоциации HF⁺ в состоянии B²Σ⁺ квантово-механическими методами. Theoretical study of the dissociation of HF⁺ in the B²Σ⁺ state by quantum-mechanical methods /Cacelli Ivo //J. Chem. Phys. —1992 .—96 ,№ 11 .—С. 8439—8449 .—Англ.

Квантово-механически исследован путь диссоциации иона HF⁺ в состоянии B²Σ⁺. Зависящая от времени вибронная волновая ф-ция разложена по 12 низшим электронным состояниям ²Σ⁺, рассчитанным методом конфигурац. вз-вия при большом числе межъядерных расстояний. Отмечено сильное вибронное вз-вие, часто включающее несколько состояний одновременно. А. А. Сафонов

И.И.

Х. 1993, N 8

HX^{2+}

HF^{2+}

1997

$X = F, Cl, Br, I$

of interest.

128: 159126d New analytical potential energy function for doubly charged diatomic ions. Zhu, Z. H.; Wang, F. H.; Chen, B.; Tan, M. L.; Wang, H. Y. (Inst. of At. and Mol. Phys., Chengdu Univ. of Sci. and Technol., Chengdu, Peop. Rep. China 610065). *Mol. Phys.* 1997, 92(6), 1061-1065 (Eng), Taylor & Francis Ltd.. An anal. potential function for doubly charged diat. ions is proposed as $V = a_1/(\rho - a_2) - a_3/(\rho + a_4)^2$, where $a_1 - a_4$ are parameters. This function can be used to describe the potential curves for doubly charged diat. ions with both potential min. and max. where $\rho = R - R_{min}$, or without any stationary point where $\rho = R$. This form of potential function for HX^{2+} ($X = F, Cl, Br$ and I), HCl^{3+} and HCl^{2-} , and their dissociation channels has been derived for the first time. The doubly vertical ionization potential for HCl ground state is discussed in detail.

no more.

$\rho - R_{min}$

(+3)



$HCl^{2+}, HCl^{3+}, HCl^{2-}, HMn^{2+}, H^{9d^{2+}}$

C.A. 1998, 128, N13

Hf^{2+}

Wang, Fan-Hou, et al., 1998

nomens.

φ -me,

λ_{min} ,

λ_{max} ,

ΔE ,

quicos.

предс. см. пост.
н. н.

Chem. Phys. Lett.
1998, 15(10), 715-717

(all. ●

Hf^{2+} , III)

F: HF+

P: 3

131:189901 Collisional quenching of the
A2.SIGMA.+(v' = 2)HF+ state by He atoms.

Madirbaev, V. Zh.; Zarvin, A. E.
(Novosibirsk State University, Novosibirsk 630090,
Russia). J. Appl. Mech. Tech. Phys., Volume Date
199 39(6), 832-836 (English) 1999 Results of an
exptl. study of the process of quenching of excited
states of HF+ ions in a hydrofluoride-helium
electron-beam plasma are reported. rate const. of
quenching of A2.SIGMA.+(v' = 2)HF+ by helium atoms
is meas The ions were excited by activation of the
rarefied gas mixt. by an elect beam. Diagnostics
of internal states of the ions was performed using
the electron-vibration-rotation spectrum of their
spontaneous emission.

1999

2000

F: HF2+

P: 3

133:125583 The singlet and triplet states of
HF2+: a theoretical study. Li, G. P.; Hamilton,
I. P. Department of Chemistry, Wilfrid Laurier
University Waterloo N2L 3C5, Can. Chem. Phys.
Lett., 323(3,4), 263-268 (English) 2000. We
study the singlet and triplet states of HF2+ at the
B3LYP, BHandH, BHandHLYP, MP2, MP3, MP4 and
QCISD(T) levels of theory with the 6-
311++G(2DF,2PD) basis set. We report geometries,

vibrational frequencies and vertical excitation energies. We find that the ground state of HF_2^+ is the Cs HFF^+ singlet with $r(\text{F}-\text{F}) = 1.444$, $r(\text{H}-\text{F}) = 0.980$ A and $\alpha = 101.96^\circ$; $\omega_1 = 857$, $\omega_2 = 1145$ and $\omega_3 = 3320$ cm^{-1} . For the triplet state, there are two stable structures: the Cs HFF^+ triplet ($T_e = 0.79$ eV) with $r(\text{F}-\text{F}) = 1.799$, $r(\text{H}-\text{F}) = 0.962$ A and $\alpha = 102.53^\circ$; $\omega_1 = 543$, $\omega_2 = 734$ and $\omega_3 = 3530$ cm^{-1} and the C ∞ v FHF^+ triplet ($T_e = 0.92$ eV) with $r(\text{H}-\text{F}) = 1.179$ A;
