

HNCE

HNCl

1985

7 Д111. Неэмпирическое описание с помощью методов ССП и МСД-КВ перехода $A^2A' - X^2A''$ в пока что неизвестной молекуле HNCl. Ab initio SCF and MRD-CI description of the $A^2A' - X^2A''$ transition of the as yet unknown HNCl molecule. Schürmann Britta L., Buenker Robert J. «Can. J. Chem.», 1985, 63, № 11, 3264—3268 (англ.; рез. фр.)

Методом ССП с последующим учетом электронной корреляции с помощью многоссылочного метода КВ, включавшего конфигурации, одно- и двукратно возбужденные по отношению к ссылочным (МСД-КВ), в двухэкспонентном базисе, дополненном поляризационными ф-циями, выполнены расчеты потенц. кривых основного X^2A'' и первого возбужденного A^2A' состояний молекулы HNCl. Для перехода $A^2A' - X^2A''$ найдены частоты и факторы Франка—Кондона. Получены наборы силовых постоянных для обоих состояний, а также силы осцилляторов и излучательные времена жизни

(М.П.)

с/р. 1986, 18, № 7

возбужденного состояния для нескольких различных вариантов задания геометрич. параметров молекулы. С целью выявления тенденций в свойствах молекул типа НАВ выполнено сравнение полученных результатов с экспериментальными и теоретич. данными по системам, изовалентным HNCI. Библ. 21. А. И. К.



ИИИ

1985

14 Б1024. Неэмпирическое описание перехода $A^2A' - X^2A''$ гипотетической молекулы HNCl методами ССП и конфигурационного взаимодействия. Ab initio SCF and MRD-CI description of the $A^2A' - X^2A''$ transition of the as yet unknown HNCl molecule. Schurmann Britta L., Buenker Robert J. «Can J. Chem.», 1985, 63, № 11, 3264—3268 (англ.)

С базисными наборами двухэкспонентного типа, включающими поляризац. АО, рассчитаны энергии и волновые ф-ции основного X^2A'' и возбужденного A^2A' состояний гипотетич. молекулы HNCl. Волновые ф-ции построены в приближении конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям (КВ—НИК). Определены равновесные геометрич. параметры, колебат. уровни энергии валентных и деф. колебаний, соотв. факторы Франка—Кондона. Для не-

М.Л., геометр.
стр., 61.

Х. 1986, 19, N 14.

скольких наборов геометрич. параметров рассчитаны силы осцилляторов и радиац. времена жизни перехода $A-X$. Отмечено, что время жизни (около 2 мкс) значительно больше, чем для ранее исследованной молекулы HNF . Вычислены также матричные элементы дипольного момента для обоих состояний при равновесной геометрии.

А. В. Немухин



MNCl

1985

(meop. pacem)

$\tilde{A}^2A' - X^2A''$

103: 183809h Ab initio SCF and MRD-CI description of the $A^2A' - X^2A''$ transition of the as yet unknown HNCI molecule. Schuermann, Britta L.; Buenker, Robert J. (Bergische Univ., Gesamthochsch. Wuppertal, 5600 Wuppertal, 1 Fed. Rep. Ger.). *Can. J. Chem.* 1985, 63(11), 3264-8 (Eng). Ab initio potential curves of X^2A'' ground state and the 1st excited A^2A' state (${}^2\Pi$ in linear geometry) of HNCI are calcd. employing multi-ref. single- and double-excitation CI to aid in the search for this system; exptl. A vibrational anal. (frequencies and Franck-Condon factors) of the $A^2A' - X^2A''$ transition is undertaken by neglecting coupling between the various modes. Diagonal and off-diagonal force consts. together with the fundamental frequencies are calcd. by including mode coupling for both electronic states, and oscillator strengths and radiative lifetimes are also obtained. Comparison with theor. and exptl. results for other isovalent systems is made to establish trends in this group of HAB systems.

C.A. 1985, 103, N22

ЧНЦ

От. 27402

1987

№ 1 Б1031. Неэмпирический расчет начала полосы и колебательных частот для системы $\bar{A}-\bar{X}$ HNCI с использованием нежесткого деформационного гамильтониана. The ab initio calculation of the band origin and vibrational frequencies of the $\bar{A}-\bar{X}$ system of HNCI using the non-rigid bender hamiltonian. Bunker P. R., Knowles David B., Schürmann Britta L., Buenker Robert J. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 139, № 2, 159—164 (англ.)

потенц. поверхность,

неэмпер. расчет

На основании результатов проведенного ранее («Can. J. Chem.», 1985, 63, 3265) неэмпирич. расчета потенциальных P_v для молекулы HNCI в электронных состояниях \bar{X}^2A'' и \bar{A}^2A' исследованы колебат. и вращат. энергии для этих состояний. Потенциальные P_v для обоих состояний аппроксимированы с помощью кватерного силового поля, к-рое использовано для находде-

Х. 1988, 19, N1.

ния колебат. частот и вращат. энергий, соответствующих нежесткому деформационно-вращат. гамильтониану. Колебат. частоты для состояния \tilde{X} получены равными $\nu_1=2942$, $\nu_2=1232$, $\nu_3=549$ см^{-1} , а для состояния \tilde{A} 3524, 947 и 836 см^{-1} соотв. Наиболее интенсивному электронно-колебат. переходу \tilde{A} (0, 3, 1) — \tilde{X} (0, 0, 0) отвечает частота 19 200 см^{-1} . Б. И. Жилинский

АНСЛ

Отм. 2702 / 1987

1 Д77. Неэмпирические расчеты начала полосы и колебательных частот системы $\tilde{A}-\tilde{X}$ молекулы HNCI с использованием нежесткого гамильтониана изгиба. The ab initio calculation of the band origin and vibrational frequencies of the $\tilde{A}-\tilde{X}$ system of HNCI using the non-rigid bender hamiltonian. Bunker P. R., Knowles David B., Schürmann Britta L., Buenker Robert J. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 139, № 2, 159—164 (англ.)

Для основного (\tilde{X}^2A'') и первого возбужденного (\tilde{A}^2A') электронных состояний молекулы HNCI неэмпирич. расчетом найдены значения потенц. энергии колебаний ядер V как трехмерной ф-ции расстояний между атомами r_{HN} , r_{NCI} и угла α между связями H—N и N—Cl. В таблицах приведены полученные величины V для 42-х значений r_{HN} , r_{NCI} , α для состояния \tilde{X}^2A'' и 35-ти значений этих параметров для состояния \tilde{A}^2A' . Приводится аналитич. вид использованных нежестких

М.П.

ср. 1988, 18, N1

потенциалов изгиба для этих состояний и основные сведения о методе расчета. Для колебательных частот основного состояния получены значения $\nu_1=2942$ см⁻¹, $\nu_2=1232$ см⁻¹ и $\nu_3=549$ см⁻¹, а соответствующие значения частот для первого возбужденного электронного состояния равны 3542 см⁻¹, 947 см⁻¹ и 836 см⁻¹. Франк-кондоновский максимум перехода $\tilde{A}(0,3,1) \rightarrow \tilde{X}(0,0,0)$ по полученным данным приходится на частоту 19 200 см⁻¹ (5200 Å).

В. А. Морозов

HNCL

OM. 27402

1987

A-X, d.d.A.
meop. paper

144068d The ab initio calculation of the band origin and rotational frequencies of the \bar{A} -X system of chloroamidogen (HNC1) using the nonrigid bender Hamiltonian. Bunker, P. R.; Giguere, David B.; Schuermann, Britta L.; Buenker, Robert J. Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Council, Canada, Ottawa, ON (K1A 0R6). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 139(2), 159-64 (Eng). A 3-dimensional fit of ab initio MRD CI potential data was made for the lowest 2 electronic states of the HNC1 mol. (\bar{X}^2A'' and \bar{A}^2A'), and the corresponding vibrational frequencies and rotational energies were computed using the non-rigid bender Hamiltonian. For the ground state the vibrational frequencies obtained are $\nu_1 = 2942$ cm^{-1} , $\nu_2 = 1232$ cm^{-1} , and $\nu_3 = 549$ cm^{-1} , while the corresponding values for the first excited state are 3524, 947, and 836 cm^{-1} resp. Calcns. give $T_0(\bar{A}^2A') = 16,200$ cm^{-1} , $T_0(\bar{A}^2A'') = 16,400$ cm^{-1} , and the Franck-Condon max., $\bar{A}(0,3,1)$ - $\bar{X}(0,0,0)$, is calcd. to be at 19,200 cm^{-1} .

C.A. 1987, 107, N 16

NH_2^+

1993

Bobbi A., Frenking G.,

низкие
энергии
и

Bull. Chem. Soc. Jpn.,
1993, 66 (III), 3153-65.

трехлет-
светоиз-
луче-
теорет-
ический

(Chem. № F_2^+ , III)

N-HCl

1995

124: 159013g Weakly bound molecular complexes studied by matrix-isolation infrared spectroscopy. Barnes, Austin J. (Dep. Chemistry and Applied Chemistry, Univ. Salford, Salford, UK M5 4WT). *S. Afr. J. Chem.* 1995, 48(1/2), 57-9 (Afrikaans). The application of matrix-isolation IR spectroscopy to the study of weakly bound mol. complexes is discussed, using the N-HCl, methane-HCl and N-HNO₃ complexes as examples.

AK B

stampuse

N-HNO₃

(H) ~~Q~~

C. A. 1996, 124, N12