

Ac-B4

1976

Ar + HBr

84: 65552k Elastic and nonelastic cross sections for metastable argon(3P) + hydrogen bromide($X^1\Sigma$). Fraites, James L.; Winicur, Daniel H. (Chem. Dep., Univ. Notre Dame, Notre Dame, Indiana). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(1), 89-94 (Eng). The energy dependence of the differential scattering of metastable $Ar(^3P)$ by ground state $HBr(X^1\Sigma)$ was studied at 4 relative kinetic energies from 60-160 meV over an angular range of 4-120 deg c.m. The position and curvature of rainbow maxima, which are obsd. at each energy, are used to obtain Lennard-Jones (12,6) potential parameters. The position of the min. $r_m = 4.44 \pm 0.08$ Å is the same as that for $K + HBr$, and the well depth, $\epsilon = 25.2 \pm 1.1$ meV, is about 4% larger than $\epsilon(K + HBr)$. The scattered intensity shows a distinct falloff at large angles compared to that expected for elastically-scattered Ar^* . This depletion, caused by quenching of Ar^* , is analyzed in terms of an optical model to det. the threshold and energy dependence of the quenching cross section. The nonelastic cross section increases from a threshold of 25 meV to a nearly const. value of 41 Å² at 160 meV. The optical analysis predicts a max. of 42.5 Å² at 215 meV.

nonelastic
cross section

C.A. 1976. 84 W10

60528.7252
Ch, Ph, TC

40892
Br - Ar

1976

*4-13168

Kita S., Noda K., Inouye H.
Repulsive potentials for Cl^- -R and Br^- -R
(R=He, Ne, and Ar) derived from beam
experiments.

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 8, 3446-3449
(АНГЛ.)

601 608

6

0633

ВИНИТИ

Ар... HBr [номер 9806] 1980
Hutson J. M., et al.

номер.
кривые.

Chem. Phys. Lett.,
1980, 73 (2), 218-23.

●
(срн. Кр ... HCl; III)

ArHBr

оттиски 9384

1980

17 Б249. Вращательные спектры и структура ван-дерваальсовых комплексов. I. Аргон—бромид водорода. Jackson K. C., Langridge-Smith P. R. R., Howard B. J. The rotational spectra and structure of van der Waals complexes. I. Argon—hydrogen bromide. «Mol. Phys.», 1980, 39, № 4, 817—838 (англ.)

Методом электрич. резонанса в молек. пучке с радиочастотным излучением в области от 0,1 до 180 МГц и МВ-излучением в области от 1,8 до 40 ГГц измерены МВ- и РЧ-штарковские спектры четырех изотопич. образцов слабо связанных ван-дерваальсовых комплексов $\text{Ar} \cdot \text{H}^{79}\text{Br}(\text{I})$, $\text{Ar} \cdot \text{H}^{81}\text{Br}(\text{II})$, $\text{Ar} \cdot \text{D}^{79}\text{Br}(\text{III})$ и $\text{Ar} \cdot \text{D}^{81}\text{Br}(\text{IV})$ в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с уче-

М.И.

89-11-6362

л 1980 N 14

том эффекта Штарка, эффектов центробежного искажения и квадрупольного взаимодействия. Для I, II, III и IV, соотв., вращательные постоянные равны (в Мгц) $B_0 = 1106,67096(25)$, $1097,58176(24)$, $1087,50889(51)$ и $1078,59384(49)$, постоянные центробежного искажения — (в кгц) $D_J = 12,462(14)$, $12,269(15)$, $8,516(78)$ и $8,428(76)$, постоянные квадрупольного взаимодействия для $B\gamma$ — (в Мгц) $(eQq) = 173,2257(32)$, $144,8081(28)$, $276,2235(53)$ и $230,8766(53)$, и дипольный момент — $\mu = 0,57417(40)$, $0,57241(34)$, $0,75633(32)$ и $0,75630(29)$ D. Полученные данные согласуются с линейной равновесной конфигурацией комплекса. Обсуждена структура комплекса в возбужденных колебательных состояниях. С. Н. Мурзин

000000 9384

1980

Ar-HBr

Ar-DBr

B. Prasad,
Chennai

93: 57500n The rotational spectra and structure of van der Waals complexes. I. Argon-hydrogen bromide. Jackson, Keith C.; Langridge-Smith, Patrick R. R.; Howard, Brian J. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, Engl. OX1 3QZ). *Mol. Phys.* 1980, 39(4), 817-38 (Eng). The microwave and radio-frequency Stark spectra of the isotopic species of the weakly bonded complex Ar-H⁷⁹Br, Ar-H⁸¹Br, Ar-D⁷⁹Br, and Ar-D⁸¹Br were detd. using mol. beam elec. resonance spectroscopy. The rotational, centrifugal distortion, and quadrupole coupling consts. and the dipole moments were detd. for each isotopic species. The centrifugal distortion of the Br quadrupole coupling consts. was also detd.. The results are consistent with a linear equil. geometry with an at. arrangement ArHBr. The vibrationally averaged structure of the complex is nonlinear due to the large-amplitude zero-point motion of the H atom. The relation between the spectroscopic consts. and the interaction potential between Ar and HBr is discussed.

39-11-63

XI - 6385

CA 1980 93 16

1980

Brunner 9937
B.P. - X1-6360

92: 206433b Rotational spectra and molecular structures of argon hydrogen bromide (ArHBr) and krypton hydrogen bromide (KrHBr). Keenan, M. R.; Campbell, E. J.; Balle, T. J.; Buxton, L. W.; Minton, T. K.; Soper, P. D.; Flygare, W. H. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(1), 3010-80 (Eng). Rotational spectra were obsd. for 4 isotopes of ArHBr and ArDBr and 8 isotopes of KrHBr and KrDBr using a Fabry-Perot Fourier transform spectrometer with a pulsed supersonic nozzle as the mol. source. The rotational consts. in the ground vibrational state B_0 , with their centrifugal distortions, D_J , as well as Br nuclear quadrupole coupling consts., χ_a , are given. In addn., an important centrifugal distortion of the Br quadrupole coupling const., D_K , an indicator of the coupling between the radial and angular potentials, is given for ArHBr and KrHBr. The Br spin-rotation interaction, c , in ArHBr was also obtained. The mol. structures are consistent with a linear equil. geometry with the H(D) atom located between Br and the rare gas atoms. The complexes undergo large amplitude vibrations, and ests. of the bending and stretching force consts. and frequencies are given. By combining the bending, stretching, and their coupling the harmonic bending and stretching force consts. (k_{a1} and k_{b1}) and 6/12 Lennard-Jones potential parameters (ϵ and R_c) for ArHCl, KrHCl, ArHBr, and KrHBr are obtained.

ArHBr

KrHBr

brausam.
noem.

crystal.



(71)

CA 1980 92 424

оттиски 9937 1980

ArHBr

KrHBr

22 B218. Вращательные спектры и молекулярные структуры ArHBr и KrHBr. Keenan M. R., Campbell E. J., Balle T. J., Buxton L. W., Minton T. K., Soper P. D., Flygare W. H. Rotational spectra and molecular structures of ArHBr and KrHBr. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 5, 3070—3080 (англ.)

На фурье-спектрометре в области частот — 8,0—12,4 ГГц с использованием импульсного сверхзвукового молек. пучка измерены вращательные спектры 4 изотопич. образцов: ArHBr, ArH⁷⁹Br (I), ArH⁸¹Br (II), ArD⁷⁹Br (III), ArD⁸¹Br (IV), и 8 изотопич. образцов KrHBr, ⁸²KrH⁷⁹Br (V), ⁸⁴KrH⁷⁹Br (VI), ⁸⁶KrH⁸¹Br (VII), ⁸²KrH⁸¹Br (VIII), ⁸⁴KrH⁸¹Br (IX), ⁸⁶KrH⁸¹Br (X), ⁸⁴KrD⁷⁹Br (XI) и ⁸⁴KrD⁸¹Br (XII), в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом эффектов центробежного искажения, Br-ядерного квадрупольного взаимодействия и Br-спин-вращательного

молекуляр.
структ.

и.и.

(+1) 

B-9-XI-6360

л. 1980 № 22

взаимодействия. Для I—XII соотв. вращательные постоянные равны (в см^{-1}) 1106,66951(17), 1097,58109-(15), 1087,50889(27), 1078,59315(22), 692,31400(14), 684,22952(15), 676,51549(36), 683,71030(41), 675,62442-(14), 667,91018(13), 675,84862(14) и 667,40217(20). В предположении, что все структурные и электронные св-ва HBr сохраняются без изменений при образовании комплексов, определены колебательно усредненные структуры AgHBr и KBrHBr. Исследована внутренняя динамика комплексов и их равновесные структуры. При использовании модельного потенциала определены силовые постоянные и частоты деф. кол. комплексов.

С. Н. Мурзин

ArHBr

KrHBr

оттиски 9937
ВФ-Х/1-6360

1980

12 Д455. Вращательные спектры и молекулярная структура ArHBr и KrHBr. Rotational spectra and molecular structures of ArHBr and KrHBr. Keenan M. R., Campbell E. J., Balle T. J., Buxton L. W., Min-ton T. K., Soper P. D., Flygare W. H. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 5, 3070—3080 (англ.)

Получены вращательные спектры четырех комплексов ArHBr и ArDBr с разными изотопами брома и восемь комплексов KrHBr и KrDBr с разными изотопами Кр в области 8—12,4 ГГц. Комплексы создавались в ячейке Фабри — Перо микроволн. спектрометра с преобразованием Фурье с помощью сверхзвуковой струи с трансляционной и вращательной т-рой молекулярного пучка $\sim 1^\circ \text{K}$. Приведены частоты вращательных переходов с разрешенной квадрупольной структурой, определенные с точностью 5—10 кГц. Для всех изученных

м.п.; Л.



ф. 1980 N12

комплексов определены вращательные постоянные, константы центробежного растяжения и квадрупольного расщепления и константы влияния центробежного растяжения на квадрупольные взаимодействия. Установлено, что равновесная структура комплексов линейная с атомом Н посередине, однако из-за возбуждения деф. кол. атом Н смещен с оси. По величине квадрупольного расщепления определены частоты колебаний в комплексе. Соответствующие им силовые постоянные связаны с потенциалом Леннард-Джонса, описывающим межмоле-

кулярные взаимодействия. Определены параметры этого потенциала для пар AgHCl , AgHBr , KfHBr , KfHBr . Для случая AgHBr определены константы спин-вращательного взаимодействия. Библ. 13. М. Т.

ArArBr

1981

—6 Д498. Спектроскопические исследования межмолекулярных взаимодействий в молекулярных пучках. Molecular-beam spectroscopic studies of intermolecular interactions. Howard Brian J. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1981, № 71, 23—29 (англ.)

Методом резонансной электрич. спектроскопии исследована структура и динамика ван-дер-ваальсовских комплексов атомов инертных газов и галогеноводородов, образующихся в сверхзвуковой струе. Анализируя возможности методики, авторы отмечают, что она позволяет получать значения вращательных постоянных центробежного растяжения величин электрических дипольных моментов и констант квадрупольного взаимодействия для ядер с моментом $J \geq 1$. В основе примененной методики лежит принцип регистрации отклонения молекулярного пучка, предварительно сфокусированного в неоднородном электрич. поле на входную

межмолекулярных
взаимодействий
в молекулярных
пучках

Ф. 1982, 18, № 6.

щель масс-спектрометра, происходящего вследствие поглощения микроволн. излучения. Возможности методики проиллюстрированы на примере определения потенц. поверхностей, характеризующих связь в комплексах ArDBr , KrHCl и KrDCl . Библ. 17. М. Т.



Ar DBr

1981

10 Б1000. Исследования межмолекулярных взаимодействий при помощи молекулярно пучковой спектроскопии. Howard Brian J. Molecular-beam spectroscopic studies of intermolecular interactions. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1981, № 71, 23—29 (англ.)

Обзор исследований структуры и св-в ван-дер-ваальсовых молекул ArDBr, KrHCl и KrDCI методами резонансной спектроскопии в молек. пучках. На основе полученных данных о вращательных спектрах построены Пв потенциальной энергии для этих молекул.
Л. Ю. Русин

М. П., пометки
Жерние

⊠
(+2)

X. 1982, 19, N 10.

$AzBr_3$

(?)

сид. ноем.,
геометрия;
структура,
и.и.

1981

Spiridonov V. P., et al

Difr. Stud. Non-Cryst.

Subst. Budapest, 1981,
159-195.

(сид. HgI_2 ; III).

HCl-Ar

1982

5 Д355. Поведение дипольной автокорреляционной функции при малых временах и спектры поглощения молекулярных газов. Short time behavior of the dipole autocorrelation function and molecular gases absorption spectrum. Boulet C., Robert D. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 9, 4288—4299 (англ.)

Развита теория, позволяющая вычислять контур радиационной линии исходя из межмолекулярного потенциала для многоатомных молекулярных систем. Получены аналитич. выражения для дипольной автокорреляционной ф-ции и для распределения интенсивности во всем контуре. Приведены примеры численного расчета формы колебательно-вращательных линий для HCl—Ar, HCl—Xe и CO₂—Ar. Сравнение с результатами точной теории показывает справедливость принятых приближений, при этом время, необходимое для расчета контура линии в случае возмущенных многоатомных молекул, снижается на два порядка. Библ. 39. Е. П. Смирнов

расчет

(+2) ☒

9. 1983, 18, N 5

Bz-Az

1982

Maberland H.

потенц.
кривые

Z. Phys., 1982, A307,
N1, 35-39.

(ser. F-Ar; II)

Архив

Дм. 17629

1983

3 Л129. Вращательный эффект Зеемана в ArHBr . Интерпретация вращательных зеемановских параметров для комплексов инертных газов с галогенидами водорода. The rotational Zeeman effect in ArHBr . An interpretation of the rotational Zeeman parameters in rare gas hydrogen halide complexes. Read W. G., Campbell E. J. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 4, 1669—1677 (англ.)

Методом импульсной фурье-спектроскопии с использованием ячейки Фабри—Перо, помещенной в полость сверхпроводящего соленоида, исследован вращательный эффект Зеемана в ван-дер-ваальсовом комплексе ArHBr . На основании спектров рассчитаны вращательный магнитный дипольный момент, анизотропия магн. восприимчивости и константа экранирования для атома брома. Используемые при расчетах ур-ния, связывающие молекулярные зеемановские параметры с характеристиками составляющих комплекса, выведены

М.П.

сб. 1984, 18, № 3

на основании полного динамич. молекулярного гамиль-
тониана. Показано, что вращательный магнитный ди-
польный момент может являться мерой кориолисового
взаимодействия в комплексе. После исключения из
зеemanовских параметров вклада, обусловленного ко-
риолисовым взаимодействием, вычислен квадрупольный
момент комплекса. Библ. 30. Е. П. Смирнов,

ArHBr

Om. 17629

1983

3 Б1277. Вращательный эффект Зеемана в ArHBr: интерпретация вращательных зеемановских параметров в комплексах благородных газов с галогенводородами. The rotational Zeeman effect in ArHBr: An interpretation of the rotational Zeeman parameters in rare gas hydrogen halide complexes. Read W. G., Campbell E. J. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 4, 1669—1677 (англ.)

Изучен вращательный эффект Зеемана в ван-дер-ваальсовой молекуле ArHBr методом импульсной МВ-фурье-спектроскопии с резонатором Фабри—Перо, помещенном во внутренний канал сверхпроводящего магнитного соленоида. Определены вращательный дипольный момент, анизотропия магнитной восприимчивости и объемная константа экранирования брома; соотв-щие значения для ArH⁷⁹Br составляют: $g_{\perp} = 0,00020(5)$, $\chi_{\parallel} - \chi_{\perp} = -0,13(9) \cdot 10^{-9}$ Мгц/Гс², $\sigma_{Br} = 4000(2000)$ млн. д.

М.П.

X. 1984, 19, №3

Из полного динамич. молек. гамильтониана выведены ур-ния, описывающие указанные молек. зеемановские параметры в терминах св-в партнеров комплекса. Показано, что вращательная g -величина является чувствительной мерой степени кориолисова взаимодействия в комплексе. Квадрупольный момент $Q_{\parallel}$ для AgHBr найден равным $+0,5(6)$ ДА по сравнению с известными значениями $-3,1$ и $-1,2$ для AgHF и AgHCl .

А Б. В. Рассадин

ArHBr

Om. 17629

1983

'99: 96115j The rotational Zeeman effect in argon hydrogen bromide (ArHBr): An interpretation of the rotational Zeeman parameters in rare gas hydrogen halide complexes. Read, W. G.; Campbell, E. J. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 79(4), 1669-77 (Eng). The rotational Zeeman effect in the ArHBr van der Waals mol. was studied by using the method of pulsed Fourier transform microwave spectroscopy carried out in Fabry-perot cavity located in the bore of a superconducting magnetic solenoid. The rotational magnetic dipole moment, magnetic susceptibility anisotropy, and Br bulk shielding const. were detd. The values for ArH⁷⁹Br are: $g_1 = 0.00020(5)$, $\chi_1 - \chi_{\perp} = -0.13(9) \times 10^{-9}$ MHz/G², and $\sigma_{Br} = 4000(2000)$ ppm. The equations describing these mol. Zeeman parameters in terms of the properties of the constituent subunits of the complex were derived from the full dynamic mol. Hamiltonian. The rotational g value is a sensitive measure of the degree of Coriolis coupling in the complex. The mol. quadrupole moment of ArHBr was calcd.

фрагмент
эффект Зеемана
квадрупольн.
момент.

c.A. 1983, 99, 112

$\text{Br}_2 \text{Ar}_n$

1984

19 Б1037. Динамика реакций и эффект клетки в микрокластерах Br_2Ar_n . Reaction dynamics and the cage effect in microclusters of Br_2Ar_n . Amar F. G., Bergne B. J. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 26, 6720—6727 (англ.)

Методами молек. динамики исследованы р-ции фотодиссоциации и рекомбинации Br_2 в аргоновых кластерах: $\text{Br}_2\text{Ar}_n \rightarrow \text{Br}_i\text{Ar}_m + \text{Br}_{2-i}\text{Ar}_l + (n-m-l)\text{Ar}$ ($i=0, 1, 2$). Предполагается, что в начальном состоянии Br_2Ar_n находится в невозбужденном состоянии, затем происходит возбуждение в верхнее вибронное состояние под действием лазерного излучения и затем траекторными методами прослеживаются р-ции диссоциации Br_2 с учетом и без учета выхода за границы кластера, передачи энергии от Br_2 кластеру Ar_n , следствием чего м. б. испарение атомов Ar, рекомбинации радикалов Br за счет

x.1985, 19, N19

пересечения электронных термов. Предполагается, что число атомов в аргоновом кластере может изменяться. Потенциальные кривые молекулы Br_2 описаны функциями типа Морзе с эксперим. значениями параметров, потенциальные кривые для взаимодействий Ar—Ar - и Br—Ar -функциями Леннарда-Джонса. Описана процедура выбора начальных условий интегрирования траекторий. Дана интерпретация результатов по отношению как к газовой, так и жидкой фазе. А. В. Немухин

ArHBr

Om. 22373

1985

Andzelm J., Huzina-
ga S., et al.

notepax
nomeris.
fiziku,
mexem
pacem

Chem. Phys., 1985,
100, N1, 1-11.

ArHBr

(Vm 8099)

1985

Bernstein L.S., Wormhoudt J.,

J. Chem. Phys. 1985, 82, N 11,
4802-4808.

Spectroscopy of rare gas hydro-
gen halide complexes.

Ar. H (D) Br

1988

и.п.

Butarin M.O.,
Butychev V.O., et al.
Chem. Phys. Lett., 1988,
144, N3, 231 - 235.

(see Ar. Cl F; III)

Ар ДВ

(от 30353)

1988

Краснов К. С.,
Филиппенко М. В.,

и.п.

ОНИИТЭХИМ:

Деп. № 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.



(обзор)

АрНВ

(Дм. 30353)

1988

Краснов К.С.,
Филиппенко Н.В.,

д.п.

ОНИИТЭХИМ.

(обзор)

Деп. N 378-ХП-86,
Черкасск, 1988.

Ar-HBr

DM 34296

1989

23 Б1366. Анизотропные межмолекулярные потенциалы. III. Система: инертный газ — бромистый водород. Anisotropic intermolecular potentials. III. Rare-gas — hydrogen bromide systems / Hutson Jeremy M. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 8.— С. 4455—4461.— Англ.

Из данных по микроволновым спектрам вандерваальсовых комплексов Ar-HBr и Kr-HBr восстановлен межмолек. ПТ для упомянутых выше систем. Зависимость глубины потенциальной ямы от равновесного расстояния от центра масс HBr до атома инертного газа (R), от угла между r_{HBr} и R аппроксимирована полиномами Лежандра. ПТ имеет два минимума. Первый — для линейной структуры инертный газ — HBr всего на 5 см^{-1} ниже, чем второй, отвечающий линейной структуре инертный газ — BrH. Эта особенность строения ПТ объясняет аномальный изотопный эффект для констант центробежного искажения, к-рый наблюдался для комплексов инертный газ — HBr. Сделан вывод, что из-за наличия второго минимума Ar-HBr должен иметь низколежащее связанное состояние, выше основного всего на 11 см^{-1} .

Г. В. Чертихин

М.Н.



X. 1990, N 23

ArHBr

(Om 33794)

1990

113: 67561d Far infrared difference frequency spectroscopy of the weak bond in argon-hydrogen bromide (ArHBr). Firth, D. W.; Dvorak, M. A.; Reeve, S. W.; Ford, R. S.; Leopold, K. R. (Dep. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, MN 55455 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 168(2), 161-7 (Eng). A tunable far-IR difference frequency spectrometer was used to observe the Q branch of the lowest Π bending vibration of ArH⁷⁹Br and ArH⁸¹Br. The vibrational frequencies are 26.665635(4) and 26.665284(4) cm⁻¹ for the ⁷⁹Br and ⁸¹Br species resp. The av. center-of-mass sepn. is 0.07 Å shorter in the excited state than in the ground state and anal. of the Br nuclear hyperfine structure provides the excited state angular expectation value $\langle P_2(\cos \theta) \rangle = -0.098(2)$. The data indicate significant coupling between the bending and stretching coordinates of the complex at angles sampled by the Π state. The results are compared with the best available theor. calcs. for this species and the agreement is good.

check, Vi

C.A. 1990, 113, N 8

Ar - HBr

1992

Hutson J. M.

ув, ук,
потенц.
г-из

J. Phys. Chem. 1992,
96 (11), 4237-47.

(см. Ar - HCl; iii)

ArBr₄

1995

Ehrhardt Bate R.,

Ysteres M.

ab initio
pacem

Spectrochim. Acta

Vi, ciiprykm.
napaueipoe

Part A 1995, 57A(4),

699-707.

● (see. KCl₄; III)

ArBr₂

1995

Naumkin F. Yu., Knowles P. J.,

J. Chem. Phys., 1995,

D₀(Ar-Br₂) 103 (9), 3392-9.

(see ArF₂; III)

Ar-HBr

1997

126: 203935b Intermolecular potential for Ar-HBr ($\nu_1 = 1$) studied by high resolution near infrared spectroscopy. Han, J.; McIntosh, A. L.; Wang, Z.; Lucchese, R. R.; Bevan, J. W. (Department of Chemistry, Texas A and M University, College Station, USA). *Chem.*

Phys. Lett. 1997, 265(1,2), 209-216 (Eng), Elsevier. The fundamental ν_1 , combinations $\nu_1+2\nu_2^0$, $\nu_1+\nu_2^1$, $\nu_1+\nu_3$, $\nu_1+2\nu_2^0+\nu_3$, hot band $\nu_1+2\nu_2^0-2\nu_2^0$, and difference band $\nu_1-2\nu_2^0$ have been analyzed rovibrationally for both ^{79}Br and ^{81}Br isotopomers in Ar-HBr. The bands involving $2\nu_2^0$ directly sample the second min. of the intermol. potential surface of the complex, corresponding to the isomeric structure Ar-BrH. Nuclear quadrupole substructure has also been partially resolved in the Q branch transitions of the $\nu_1+\nu_2^1$ band. In addn., a strong Coriolis perturbation between the $\nu_1+\nu_2^{1*}$ and $\nu_1+\nu_3$ states was investigated. A model potential surface for Ar-HBr (HBr $\nu_1 = 1$) was derived and compared with the H4 intermol. potential for Ar-HBr (HBr $\nu_1 = 0$).

(IR chem,
Di)

C. A. 1997, 126, N 15

F: Ar-Br₂

P: 3

1999

131:9850 Is the Ar-Br₂(X1.SIGMA.g+) van der Waals complex linear rather than T-shaped? A study in terms of ab initio based potential energy surfaces. Naumkin, F. Y.; Mccourt, F. R. W. (Department of Chemistry, University of Waterloo, Waterloo, ON N2L 3G1, Can.). Mol. Phys., 96(7), 1043-1049 (English) 1999 Taylor & Francis. The ground state Ar-Br₂ potential energy surface is predicted from ab initio calcns. and from an atom-atom model using empirical ArBr potentials and the (evaluated ab initio) perturbation of the interaction between Ar and Br within Br₂. At all levels of modeling, the surface has a double-min. topol., with wells for both the linear (L-) and T-shaped geometries.

C. A. 2000

This differs from the single-min. topol. predicted by the commonly used pairwise additive Lennard-Jones potential. For both ab initio and atom-atom model surfaces, the L well is found to be significantly deeper than the T well; this relative behavior is unchanged by zero-point vibrations. Spectroscopic parameters are predicted for the present surfaces. The final surfaces result from a scaling to reproduce the estd. bond energy of the system. Possible reflections of the surface topol. in exptl. observables are discussed.

1999

F: Ar-Br₂

P: 3

131:327763 An "electrons-in-molecule" model for atom-atom representation atom-molecule potentials, with application to the Ar-B₂(X3.SIGMA.g-) comp Naumkin, Fedor Y. Department of Chemistry, University of Toronto Ontario M5S 3H6, Can. Phys. Chem. Chem. Phys., 1(17), 3949-3954 (English) 1999 A flexible model for generating the anisotropic atom-atom form of an atom diatom potential was developed and used to fit the high-level ab initio P (potential energy surface) of the

ground state Ar-B₂ Van der Waals complex system was found to have only a well for the T-shaped geometry as a consequence of the sp-hybridization of B within B₂. Comparison of the complex with s Ar-X₂ species studied at the same level of theory exhibits some particular features of the boron system, originating from its electronic structure and interpreted in terms of the Ar-B interactions. A proper combination of the empirically adjusted potentials for isolated ArB and of the calculated effect atom-atom potentials acting in Ar-B₂ is employed to produce the "real" potential energy of the complex, used to predict its microwave spectrum.

Ar HBr

2001

135: 216246p Differentiation of the ground vibrational and global minimum structures in the Ar:HBr intermolecular complex. Castillo-Chara, Jairo; Lucchese, Robert R.; Bevan, John W. (Department of Chemistry, Texas A&M University, College Station, TX 77843 USA). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(2), 899-911 (Eng), American Institute of Physics. A fully three-dimensional morphed potential energy surface is reported for Ar:HBr. The morphed potential was obtained from parametrized scaling and shifting transformations of an ab initio potential. The optimum parameters of the morphed potential were detd. by a regularized nonlinear least-squares fit to available exptl. data. The rovibrational dynamics of the complex were computed using an adiabatic sepn. of the H-Br intramol. stretching mode from the intermol. modes of the system. The ground rovibrational state of the morphed potential

структура,
потенци.
поверхн.,
стабильн.

C.A. 2001, 135, 175

was found to have the hydrogen-bound structure Ar-HBr. This state was 10.99 cm^{-1} more stable than the corresponding state having the van der Waals structure, Ar-BrH, in agreement with exptl. data. However, the global min. of the morphed potential was found to have the van der Waals structure, Ar-BrH. This structure was 20.9 cm^{-1} lower in energy than the local min. having the hydrogen-bound structure, Ar-HBr.