

A4-F-14

1974

ArF_x[±]
 KrF_x[±]
 XeF_x[±]

$x = 1 \div 6$

85: 25603s Electronic structure and properties of simple and complex compounds of halogens and inert gases from nonempirical NDDO-2' calculation data. Charkin, O. P.; Smolyar, A. E.; Klimenko, N. M. (Inst. New Chem. Probl., Moscow, USSR). *Proc. Int. Conf. Coord. Chem.*, 16th 1974, 2.3a, 3 pp. (Eng). Univ. Coll., Dublin, Dep. Chem.: Dublin, Ire. Within the framework of the NDDO-2' scheme, systematic calens. were made for the electronic structure of ~50 simple and complex fluorides of inert gases (ArF_k[±], KrF_k[±], and XeF_k[±], $k = 1, 2, \dots, 6$) and polyhalogenides (ClF_k[±], BrF_k[±], Cl₃[±], Br₃[±]), etc. using a mixed (single and double-zeta) STO basis. The results were used for making conclusions about the geometry and electronic structure of the electron-rich compds.

Кб. экз. факт

(46) 

C.A. 1976. 85 N4

АрНФ

XI-4200

1974

21 Б259. Определение структуры ArHF . Harris Stephen J., Novick Stewart E., Klemperer William. Determination of the structure of ArHF . «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 8, 3208—3209 (англ.)

Методом электрич. резонанса в молек. пучке (пучок создается при расширении смеси 2% HF + 98% Ar под давл. 2 атм через капилляр с диам. 0,03 мм) обнаружен МВ-спектр ArHF . Идентифицированы линии вращательных переходов с $I=0 \rightarrow 1$ (≈ 6 Гц) и $1 \rightarrow 2$ (≈ 12 Гц) и ядерная сверхтонкая структура этих линий в основном колебательном состоянии ArHF . Спектр проанализирован с учетом спин-спиновых и спин-вращательных взаимодействий и определены значения вращательной постоянной $(B+C)/2 = 3065,719$ Мгц, центробежной постоянной $D_I = 72,1$ Кгц, дипольного момента $\mu_a = 1,332$ D и постоянной спин-спинового взаимодействия $S_{\text{HF}} = 29,2$ Кгц. По величине D_I оценена частота вал. кол. ArHF $\omega \approx 42$ см $^{-1}$. Показано, что ArHF подобно ArHCl имеет нелинейную структуру с углом $\text{Ar} \cdots \text{F}-\text{H}$ 48° и длиной связи $\text{Ar} \cdots \text{F}$ 3,54 А. М. Р. Алиев

м.п. зам.

X.1974 N21

ArHF

XI - 4200

1974

(u.n) 31477n Determination of the structure of argon hydrogen fluoride. Harris, Stephen J.; Novick, Stewart E.; Klemperer, William (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1974, 60(8), 3208-9 (Eng). Radio-frequency and microwave spectra of $K = 0$ states of ArHF in the ground vibrational state were measured by mol. beam elec. resonance spectroscopy. The rotational const. is $(B + C)/2 = 3005.719$ MHz; the component of the dipole moment along the a inertial axis is $\mu_a = 1.332$ D. From the centrifugal distortion constant, $D_J = 72.1$ kHz, the stretching frequency of the van der Waals bond was estd. to be 42.1 cm^{-1} . In analogy with ArHCl the internal Ar-F-H angle θ is expected to be acute and the av. value of the angle is 48.20° . The equil. configuration is likely to be near linear with at. arrangement ArHF. The vibrationally averaged Ar-F distance is $3.540 \text{ \AA}$.

C.A. 1974. 81. N4

Trypury!

$(\text{AgHF})_2$

XI - 4200

1974

10 Д605. Определение структуры димера AgHF .
Harris Stephen J., Novick Stewart E., Kem-
perer William. Determination of the structure of
 AgHF . «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 8, 3208—3209
(англ.)

Структура

Методом электр. резонанса в молекулярном пучке (пучок создается при расширении смеси 2% $\text{HF} + 98\%$ Ar под давлением 2 атм через капилляр с диаметром 0.03 мм) обнаружен микроволн. спектр димера AgHF . Идентифицированы линии вращательных переходов с $J=0 \rightarrow 1$ (≈ 6 ГГц) и $1 \rightarrow 2$ (≈ 12 ГГц) и ядерная сверхтонкая структура этих линий в основном колебательном состоянии AgHF . Спектр проанализирован с учетом спин-спиновых и спин-вращательных взаимодействий и определены значения вращательной постоянной $(B+C)/2 = 3065,719$ МГц, центробежной постоянной $D_J = -72,1$ КГц, дипольного момента $\mu_a \approx 1,332$ ед. Дебая и постоянной спин-спинового взаимодействия $S_{\text{HF}} = -29,2$ КГц. По величине D_J оценена вал. кол. димера $\omega \approx 42 \text{ см}^{-1}$. Показано, что димер AgHF подобно димеру AgHCl имеет нелинейную структуру с углом $\text{Ag} \dots \text{F} - \text{H} \approx 48^\circ$ и длиной связи $\text{Ag} \dots \text{F} \approx 3,54$ А. М. Р. Алиев

Ф. 1974
N10

60528.7202
Ch, Ph, TC

40892
Ar-HF

1976
X 13178

Dietrich John, Conn Robert W.
Interaction potentials for He-HF
and Ar-HF using the Gordon-Kim method.

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 8, 3091-3096
(англ.)

0633 ЛМК

601 608

6 2 5

ВИНИТИ

Ar₂F

1976

Kr₂F

cnwsp
vacappax

86: 197520z New Electronic-transition laser systems. Part I. Electron pumped systems. Part II. Chemically pumped systems. Nakano, H. H.; Hill, R. M.; Lorents, D. C.; Huestis, D. L.; Eekstrom, D. J. (Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). U. S. NTIS, AD Rep. 1976, AD-A033997, 114 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announcer. Index (U. S.) 1977, 77(6), 246. Part I describes the program to develop a kinetic model for the energy flow in electron-beam pumped rare gas-halide lasers. The expl. program involves observations of

⊗ (+1)

C. A. 1977. 86. N26

Ar + HF Klemperer William 1977

"Faraday Discuss. Chem. Soc.",
1977, N 62, 179-184,
вращающ. Discuss. 800-840.

Секторск.

● (ср. Ar + $\overline{\text{Hce}}$)

Ar - HF

1977

Lloyd J., et al.

(memor.
notations)

J. Chem. Soc. Faraday

Trans. 2 1977, 73,

N2, 234-44.



(all)

1977

Ar₂FKr₂FCrickip
Weyfer

SS: 30131c Spectroscopy and kinetics of the 248 and 414 nm bands from electron beam pumped argon-krypton-fluorine mixtures. Lorents, Don C.; Hill, Robert M.; Huestis, David L.; McCusker, M. V.; Nakano, H. H. (Mol. Phys. Cent., Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). *Electron. Transition Lasers 2*, [Proc. Summer Colloq.], 3rd 1976 (Pub. 1977), 30-4 (Eng). Edited by Wilson, Leroy E.; Suchard, Steven N.; Steinfeld, Jeffrey I. MIT Press: Cambridge, Mass. The emission characteristics of Ar₂⁺, Kr₂⁺, ArF, KrF, in an Ar/Kr/F₂ mixt. were analyzed to obtain a better understanding of the formation and decay kinetics of the KrF laser. Addnl. emitters were found at 280 and 414 nm and identified as Ar₂F and Kr₂F, resp. The apparent energy channeling suggests the possibility of an efficient laser at 414 nm is high pressure Ar/Kr/F₂ or Kr/F₂ mixts. Other results suggest that the gain at 414 nm is 1/25 of the gain at 248 at 2 atm. total pressure which increases linearly with increasing pressure.

(11) 17

C.A., 1978, 88, N4

Ar₂F

1977

11 Д177. Низколежащие электронные состояния
Ar₂F. Wadt Willard R., Hay P. Jeffrey. The
low-lying electronic states of Ar₂F. «Appl. Phys. Lett.»,
1977, 30, № 11, 573—575 (англ.)

Проведен неэмпирич. расчет шести низколежащих
электронных состояний молекулы Ar₂F при различных
геометрич. конфигурациях. Расчеты методом ССП вы-
полнены при использовании двухэкспонентного базиса
из сгруппированных гауссовых ф-ций с включением
поляризационных ф-ций. Дальнейший расчет проведен
в рамках метода поляризационного конфигурационного
взаимодействия при замороженных 1s орбиталях F и
1s, 2s и 2p орбиталях Ar. Показано, что в configura-
ции симметрии C_{2v} низшее ионное состояние
Ar₂+F⁻ (2²B₂) расположено на 5,0 эв ниже Ar₂⁺ (2²Σ_u⁺) +
+F и на 0,6 эв ниже Ar+F⁻ (2²Σ⁺) + Ar. Рассчитаны.

В. Т.
низколежа-
щие сост.

Ф. 1977 № 11

длины волн и времена жизни для дипольно разрешенных переходов в Ag_2F . Обнаружена сильная зависимость времени жизни от геометрии молекулы.

Б. И. Жилинский

$Ar_2 F$

1978

Huestis D.L., Schlotter N.E.

повертн.
конечн.
мерии

J. Chem. Phys., 1978, 68, 27,
3100-3104.

(ис. $Ne_2 F$; iii)

1978

Ar_2F

Lorents A. C., et al

J. Chem. Phys. 1978, 68,
W 10, 4654-61

спектр,
моменты.



(см Xe_2Cl ; III)

ArFH

Lovas F. J.

1978.

молекулы.

нафта.

М. В. Снегирь.

J. Phys. and Chem.

Ref. Data, 1978, 8 (4),

1445-1450

Маджары М. В. спектроскоп.

и. механика. молекулы.

Ar_2F

Kr_2F

Электр.
Состояния

(+1) $\boxtimes$

2-1948, N21

21 Б31. Электронные состояния Ar_2F и Kr_2F . Wadt Willard R., Hay P. Jeffrey. Electronic states of Ar_2F and Kr_2F . «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 8, 3850—3863 (англ.)

Рассчитаны поверхности потенциальной энергии молекул Ar_2F и Kr_2F . Вычисления проведены методом конфигурац. взаимодействия с отбором одно- и двукратно возбужденных конфигураций по отношению к основной хартри-фоковской при ограничении однократными возбуждениями в пространстве виртуальных состояний. Использованы гауссовы базисные наборы (11s7p) для Ar, (13s9p5d) для Kr и (9s5p) для F, дополненные поляризац. d- и p-орбиталями для F и d-орбиталями для тяжелых атомов. Спин-орбитальное взаимодействие учтено полуэмпирич. методом атомов в молекулах. Показано, что для обеих молекул основные состояния, соотв-щие диссоциации на нейтр. частицы, являются отталкивательными, в то время как возбужденные ионные состояния симметрии 2^2B_2 являются стабильными по отношению к диссоциации на молекулу монофторида и атом благородного газа. Равновесной геометрии связанных ионных состояний отвечает конфигурация равно-

бедренного треугольника. Рассчитанные положения полос испускания для разрешенных переходов $2^2B_2 \rightarrow 1^2B_2$, $2^2B_2 \rightarrow 1^2A_1$ составляют 267 и 274 нм для Ag_2F и 361 и 371 нм для Kr_2F при соотв-щих эксперим. величинах около 290 нм для Ag_2F и 400 нм для Kr_2F . Обсуждены различные механизмы образования стабильных ионных молекул $Ag_2^+F^-$ и $Kr_2^+F^-$. Отмечено хорошее согласие результатов неэмпирич. вычислений с данными расчетов потенциальных поверхностей исследуемых молекул методом двухатомных фрагментов в молекулах.

А. В. Немухин

1978

 Ar_2F Kr_2F Электр.
Состав(+1) $\boxtimes$ ф. 1978
N 11

11 Д203. Электронные состояния Ar_2F и Kr_2F .
Wadt Willard R., Hay Jeffrey P. Electronic states of Ar_2F and Kr_2F . «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 8, 3850—3863 (англ.)

Электронная структура низколежащих состояний Ar_2F и Kr_2F рассчитана методом поляризационного конфигурац. взаимодействия. Показано, что диссоциирующие на $Rg_2 + F$ «ковалентные» состояния Rg_2F отталкивательные, а среди ионных состояний только одно, 2^2B_2 , устойчиво относительно диссоциации на $Rg^+F^- + Rg$. Равновесная геометрия состояния 2^2B_2 соответствует равнобедренному треугольнику, причем расстояния R_1 на 0,02 Å короче, а R_2 на 0,14 Å длиннее, чем в Rg_2 ($2^2\Sigma_u^+$) и в RgF ($2^2\Sigma^+$). Для разрешенных в дипольном приближении эмиссионных переходов из состояния 2^2B_2 , ($2^2B_2 \rightarrow 1^2A_1$) и ($2^2B_2 \rightarrow 1^2B_2$) вычислены соответственно длины волн и моменты перехода. В спектре поглощения разрешены 4 перехода из состояния 2^2B_2 . Сделан вывод о том, что наиболее вероятным источником образования Rg_2F служит реакция $Rg^+F^- + 2Rg \rightarrow Rg_2 + F^- + Rg$.

О. В. Сизова

Ar₂F

Kr₂F

kb. acc.
perfect

2nd. corr.

(+1) R

C.A., 1978,
89, NS

89: 67679j Electronic states of argon fluoride (Ar₂F) and krypton fluoride (Kr₂F). Wadt, Willard R.; Hay, P. Jeffrey (Los Alamos Sci. Lab., Los Alamos, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(8), 3850-63 (Eng). Ab initio POL CI calcns. were performed on the low-lying states of Ar₂F and Kr₂F. The results support a simple diatomics-in-mols. description of Rg₂F (Rg = rare gas). In each case, only 1 ionic state (²B₂) is stable (by 0.6 eV) relative to Rg⁺F⁻ + Rg. The equil. geometry is an isosceles triangle where the Rg-Rg distance is 0.002 Å shorter than that in the ²Σ_u⁺ state of an isosceles triangle where the Rg-Rg distance is 0.02 Å shorter than that in the ²Σ_u⁺ state of Rg₂⁺ and the Rg-F distance is 0.14 Å greater than that in the ²Σ⁺ state of RgF. There are 2 dipole-allowed emissions (²B₂ → ¹A₁, ²B₂ → ¹B₂) of comparable strength and wavelength (267 and 274 nm, resp., in Ar₂F and 357 and 368 nm, resp., in Kr₂F). The calcd. wavelengths are in good agreement with the broad bands at 290 and 400 nm obsd. in e-beam pumped Ar or Kr/F₂ mixts., confirming the earlier assignment of these bands to Ar₂F and Kr₂F, resp. The radiative lifetime of the ²B₂ is 132 ns for both Ar₂F and Kr₂F. There are 4 dipole-allowed absorptions from the ²B₂ state, 1 of which (²B₂ → ³A₁) is very strong and corresponds to the ²Σ_u⁺ → ²Σ_g⁺ transition in Ar₂⁺ and Kr₂⁺. The effect of the F⁻ on this transition is negligible, so that the calcd. wavelengths (320 nm in Ar₂F and 344 nm in Kr₂F) and oscillator strengths are basically unchanged from the rare gas dimer ions.

1978

Therefore, Ar_2F^* and Kr_2F^* may be at least as important as the Ar_2^+ and Kr_2^+ absorbers in the KrF^* laser. Recent exptl. measurements of the Ar_2F^* (185 ± 45 ns) and the Kr_2F^* (176 ± 20 ns) lifetimes are in good agreement with the calcd. values. Finally, the calcs. indicate that Rg_2^+F^* should be formed by 3-body quenching of Rg^+F^* rather than reaction of rare gas excimers with F_2 . The latter exothermic reaction produces highly excited Rg_2^+F^* , which falls apart into $\text{Rg}^+\text{F}^* + \text{Rg}$. These conclusions are supported by recent exptl. results.

ArHF

055 8342

1979

ArHO

✓92: S2873y Structures and bonding of ArHF and ArHO.
So, S. P. (Chung Chi Coll., Chinese Univ. Hong Kong, Hong
Kong, Hong Kong). *J. Mol. Struct.* 1979, 54, 243-6 (Eng).
Ab initio MO calcs. show that both ArHF and ArHO are weak
van der Waals complexes with linear ground state structures.

л.б. м.м.

факт, структура, св. 836

(+1) ☒

CA 1980 92 N10

ArHF
ArHO

структ.
и св. 856

оттиски 8342

1979

12 Д150. Структура и связь в ArHF и ArHO. Structures and bonding of ArHF and ArHO. So S. P. «J. Mol. Struct.», 1979, 54, July, 243—246 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе орбиталей слэтеровского типа исследовано электронное строение ArHF (I) и ArHO (II). Проведена полная оптимизация геометрии. I найдена линейной с длинами связей Ag—H и H—F 2,403 и 0,934 Å, что согласуется с данными микроволн. спектров (расстояние Ag...F 3,458); II в основном состоянии также линейна с длинами связей Ag—H и H—O 2,433 и 1,001 Å, однако, в первом возбужденном $X^2\Sigma$ состоянии, которое расположено выше основного $\bar{X}^2\Pi$ на 0,085 эв, молекула изгибается (валентный угол 172,5°, длины связей Ag—H и H—O 2,150 и 1,027 Å). Анализ распределений электронной плотности и волн. ф-ций привел



архив, 1979

автора к выводу, что I и II представляют собой слабо связанные ван-дер заальсовские комплексы. Стабильность комплексов обусловлена в существенной мере тем, что связывающая способность связывающей 7σ МО несколько сильнее разрыхляющей способности заполненной разрыхляющей 8σ МО.

В. Л. Лебедев

AgHF

AgHO

расчет
равновесн.
геометрии

(+1) ☒

д. 1979 № 23

оттиски 8342

1979

23 Б20. Структуры и связывание в AgHF и AgHO .
So S. P. Structures and bonding of AgHF and AgHO .
«J. Mol. Struct.», 1979, 54, July, 243—246 (англ.)

Ограниченным методом Хартри — Фока с использованием миним. базиса ОСТ-3ГФ рассчитаны ван-дер-ваальсовы молекулы AgHF и AgHO . Найдено, что равновесной геометрии AgHF отвечают след. межъядерные расстояния: $r(\text{Ag}-\text{H})=2,403 \text{ \AA}$, $r(\text{H}-\text{F})=0,934 \text{ \AA}$, причем в согласии с эксперим. данными молекула является линейной. Отмечено небольшое различие между теор. (3,337 $\text{ \AA}$) и эксперим. (3,458) оценками расстояния $r(\text{Ag}-\text{F})$. Основному состоянию $X^2\pi$ молекулы AgHO также отвечает линейная геометрич. конфигурация с равновесными расстояниями $r(\text{Ag}-\text{H})=2,433$ и $r(\text{H}-\text{O})=1,001 \text{ \AA}$. В первом возбужденном состоянии молекула Ag HO является слегка изогнутой. Обсуждены качеств. особенности строения молекул AgHF и AgHO .

А. В. Немухин

Ar₂ F

1979

West John, et al.

encl. 10/11/79

J. Chem. Phys. 1979, 70(4),
3457-61

encl. Ar₂⁺ - III

Az-HF

1980

Jackson K.C., Lang-
ridge-Smith P.R.R.,
et al.

и.п.,

темпер.,

связки.

J. Mol. Phys. 1980, 39,
N4. 817 - 838.

(ср. Az-HBz; III)

Ar HF

Qumica 9295

1980

Klemperer W.

J. mol. Struct., 1980, 59,
161-176.

обзор
спектр.
данных

/св. Ne₂; III }

papers etc., & i, review. (Ar:HF, ¹⁹⁸⁰
Ar:H₂O, Ar:HCl)

XI-6364
Kolas W., Carongiu B., Clementi E.,

Int. J. Quantum. Chem, 1980, 17,
v4, 775-792 (am)

Theoretical study of some Van der
Waals molecules.

DM. 9820

Prague, 1980, 110127

10 (9)

Ar-HF

Оттиск 11714

1981

24 Б280. Вращательный и сверхтонкий спектр Ar-HF. Dixon T. A., Joyner C. H., Baiocchi F. A., Klempner W. The rotational and hyperfine spectrum of Ar-HF. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6539—6543 (англ.)

Методом электрич. резонанса в молек. пучке измерены в области частот 6—18 ГГц МВ-спектры и в области частот 2—6 МГц спектры сверхтонкой структуры двух изотопич. образцов слабо связанных комплексов, Ar-HF (I) и Ar-DF (II). Полученные данные проанализированы с использованием гамильтониана, в

к-ром учтены эффекты квартичного центробежного искажения, спин-вращательного, спин-спинового и электрич. квадрупольного взаимодействий и эффект Штарка второго и четвертого порядков. Ввиду малости параметров сверхтонкого взаимодействия, они определены из РЧ-данных с разрешением около 1 кГц. Для I и II, соотв., определены вращательные постоянные $B_0 = 3065,7076(10)$ и $3039,8531(8)$ МГц, постоянные центробежного искажения $D_0 = 70,78(9)$ и $59,71(7)$ кГц, постоянные спин-спинового взаимодействия $S = 50,33(32)$ и $12,62(47)$ кГц, $J_S = 0,529$ и $0,082$ кГц, постоянные

вращат. и
сверхтонкий
спектр

х. 1981, 19, № 24.

спин-вращательного взаимодействия $C_{H,D} = -0,277$ и $-0,046$ кГц, $C_F = 1,199$ и $1,259$ кГц и для II постоянная электрич. квадрупольного взаимодействия $eqQ_D = 196,5(8)$ кГц. По эффекту Штарка из РЧ-данных для I и II, соотв., определены дипольные моменты $\mu = 1,3353(4)$ и $1,6771(6) D$ и из МВ-данных для II определен дипольный момент $\mu = 1,6763(7) D$. Спектроскопич. постоянные использованы для получения структурной и динамич. информации о комплексах. Структурные параметры, усредненные по большой амплитуде колебаний слабой связи, равны для I и II, соотв.: $r(\text{Ag}-\text{XF}) = 3,5095$ и $3,4605$ А, $r(\text{Ag}-\text{X}) = 2,6304$ и $2,6256$ А, угол между осями связей $\text{Ag}-\text{XF}$ и XF $41,27^\circ$ и $33,27^\circ$. На основе данных о центробежном искажении оценены силовые постоянные гармонич. поля молекул. Полученные данные сопоставлены с известными результатами для родственных комплексов и существенно уточняют ранее выполненные измерения для I (S. Harris et al. «J. Chem. Physics», 1974, 60, 3208).

С. Н. Мурзин

Ar... HF

(Ommuck 11714) 1981

95: 15528p The rotational and hyperfine spectrum of argon-hydrogen fluoride. Dixon, T. A.; Joyner, C. H.; Baiocchi, F. A.; Klemperer, W. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(12), 6539-43 (Eng). The radio-frequency and microwave spectrum of Ar-HF was remeasured by mol. beam elec. resonance spectroscopy. Anal. of the data yields a revised value for the HF nuclear spin-spin const. S , which in turn provides information about the vibrationally averaged geometry of the complex. Rotational and hyperfine consts. and the dipole moment are given. The av. structures and estd. harmonic force consts. are consistent with those obsd. for other Ar-HX complexes. Comparison of the 2 hyperfine consts. for Ar-DF indicates that the av. charge distribution around the D is only weakly perturbed by the Ar atom.

(146 чекит)

C. A. 1981, 95, N2.

Ar-HF
Ar-DF

Омтиск 11714, 1981

12 Д468. Вращательный и сверхтонкий спектры комплекса Ar-HF. The rotational and hyperfine spectrum of Ar-HF. Dixon T. A., Joyner C. H., Baio-schi F. A., Klempner W. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6539—6543 (англ.)

Методом электрич. резонанса в молекулярном пучке исследованы микроволновый и радиочастотный спектры комплексов Ar-HF и Ar-DF. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 3$ (6—19 Гц) и

переходов между компонентами сверхтонкой структуры вращательного уровня с $J=1$ в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательной и центробежной постоянных, дипольного момента и постоянной квадрупольной связи ядра дейтерия: $B_0 = 3065,7076$ и $3039,853$ МГц, $D_0 = 70,78$ и $59,71$ кГц, $\mu = 1,3353$ и $1,6768$ ед. Дебая для Ar-HF и Ar-DF соответственно, $eqQ_D = 196,5$ кГц. М. Р. Алиев

4

ф. 1981, 18, № 12.

ArDF

Оттиск 11664

1981

10 Д51. Молекулярная структура ArDF: анализ деформационной моды в галоидах инертного газа — водорода. Molecular structure of ArDF. An analysis of the bending mode in the rare gas-hydrogen halides. Keenan M. R., Buxton L. W., Campbell E. J., Legon A. C., Flygare W. H. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, №4, 2133—2137 (англ.)

молекул.
структура

М. П.

④1 галоген.
ин. газов
(квант. экск.)

ф. 10. 1981

Вращательный спектр ван-дер-ваальсовой молекулы ArDF получен с использованием импульсной микроволн. спектроскопии с фурье-преобразованием, резонатора Фабри — Перо и импульсного сверхзвукового сопла в качестве молекулярного источника. Получены значения констант связи ядерный спин — ядерный спин D — F и

ядерной квадрупольной связи D, равные 12,5 (11) и 194,7 (20) кГц соответственно. Структурная информация, содержащаяся в этих константах, использована совместно со значением вращательной константы для определения структуры ArDF. Из вращательного спектра молекулы ArHF найдено значение константы спин-спиновой связи H — F, равное 49,0 (19) кГц. Из значений вращательной и спин-спиновой констант определена

?

структура молекулы AgHF . С использованием мульти-
польного потенциала рассчитаны колебательно-усреднен-
ные углы в 14 комплексах типа $\text{X} - \text{H}(\text{D})\text{Y}$ ($\text{X} = \text{Ag}, \text{Kг},$
 $\text{Хе}; \text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$). Получено хорошее согласие экспе-
риментальных и рассчитанных углов. Резюме



ArDF

Отмиск 11661 1981

20 Б216. Молекулярная структура ArDF: анализ деформационного колебания систем благородный газ — галогенводород. Keenan M. R., Buxton L. W., Campbell E. J., Legon A. C., Flygare W. H. Molecular structure of ArDF: An analysis of the bending mode in the rare gas—hydrogen halides. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 4, 2133—2137 (англ.)

С помощью импульсной микроволновой фурье-спектроскопии в резонаторе Фабри — Перо и с импульсным сверхзвуковым соплом в кач-ве источника молек. пучка получен спектр ArDF в области перехода $J=0 \rightarrow J=1$ и в области перехода $J=1 \rightarrow J=2$. Аналогичные измерения повторно выполнены для ArHF. По полученным данным рассчитаны спектроскопич. постоянные B_0 и D_J обеих молекул, постоянная ядерного спин-спинового взаимодействия [для ArDF 12,5 (11) кГц, для ArHF 49,0 (19) кГц, в скобках указаны среднеквадратичные отклонения σ], и постоянная ядерного квадрупольного взаимодействия [для ArDF 194,7 (20) кГц]. Эти посто-

м. н.,
молекул.
структура

X.20.1981

янные использованы для определения структуры изученных молекул (расстояния H—F и D—F были взяты из соотв-щих двухатомных молекул, R — расстояние Ag—F и ϑ — угол AgFY , где Y—H или D): для AgDF $R=3,5352(15)$ А, $\vartheta=32,2(21)^\circ$; для AgHF $R=3,5445(2)$ А, $\vartheta=41,1(5)^\circ$. Далее при введении мультипольного разл. для взаимодействия атома благородного газа X с двухатомной молекулой H(D)Y (X=Ag, Kr или Xe ; Y=F, Cl или Br) рассчитаны колебательно-усредненные значения валентного угла ϑ для 14 молекул X—H(D)Y и полученные величины сопоставлены с эксперим. значениями. Отклонения вычисл. от эксперим. величин не превышают $3,5^\circ$. Н. Ф. Степанов

MMMLL 11661

1981

ArDF

ArHF

Spangam,
Cheney

94:129740n Molecular structure of argon deuterium fluoride (ArDF): an analysis of the bending mode in the rare gas-hydrogen halides. Keenan, M. R.; Buxton, L. W.; Campbell, E. J.; Legon, A. C.; Flygare, W. H. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(4), 2133-7 (Eng). The rotational spectrum of the ArDF van der Waals mol. was assigned using pulsed Fourier transform microwave spectroscopy in a Fabry Perot cavity with a pulsed supersonic nozzle as the mol. source. The DF nuclear spin-nuclear spin and D nuclear quadrupole coupling consts. are 12.5(11) and 194.7(20) kHz, resp. These consts. yield equiv. structural information and are used together with the rotational const. to obtain the structure of ArDF. The rotational spectrum of ArHF was also reexamd. and the HF spin-spin const. found to be 49.0(19) kHz. The structure of ArHF was then obtained from the rotational and HF spin-spin consts. Finally, the vibrationally averaged angles in 14 complexes of the type X-H(D)Y (X = Ar, Kr, or Xe; Y = F, Cl, or Br) were calcd. using a multipole potential and compared with expt. The agreement between the obsd. and calc. angles is very good.

C.A. 1981 94 N 16

$Ar \dots Hx$

1981

$x = F, Cl, Br$
(u.n).

Legon, A. C., et al.

J. Chem. Phys. 1981,
74 (9), 4944-50.

(see. $\begin{array}{l} OC \dots HF \\ OC \dots HCl \\ OC \dots HBr \\ OC \dots Hx \end{array} \Bigg\} ; \underline{III} \Bigg).$

Ar₂F

1982

ИД 247. Кинетические исследования Ar₂F* в смесях Ar—NF₃, возбуждаемых электронным пучком. Kinetic studies of Ar₂F* in electron-beam excited Ar—NF₃ mixtures. Boewering N., Sauerbrey R., Langhoff H. «J. Chem. Phys.»; 1982, 76, № 7, 3524—3528 (англ.)

интенсивн.
полос
флуоресц.

р. 1982, 18,
N 11

Измерен временной ход интенсивностей полос флуоресценции Ar₂F* ($\lambda=2900$ Å) и ArF* ($\lambda=1930$ Å) при возбуждении смесей Ar—NF₃, Ar—He—NF₃ электронным пучком с длительностью $4,5 \cdot 10^{-8}$ с, током 1 кА и энергией электронов до 1,75 МэВ. Концентрация Ar и He менялась в пределах $0 \div 2,5 \cdot 10^{20}$ см⁻³, NF₃ — $(1 \div 40) \cdot 10^{16}$ см⁻³. Определены константы скоростей ряда процессов, в том числе Ar₂* + NF₃ → продукты, Ar₂F* + NF₃ → продукты, Ar₂F* + Ar → продукты, Ar₂F* + He → продукты. Они равны соответственно (в см³/с) $(1,3 \pm 0,2) \cdot 10^{-10}$; $(5,6 \pm 1,0) \cdot 10^{-10}$; $(2,2 \pm 0,8) \cdot 10^{-14}$; $(5 \pm 2) \cdot 10^{-15}$. Измерены также константы скоростей трехчастичных процессов ArF* + 2Ar → Ar₂F* + Ar и ArF* + Ar + He → Ar₂F* + He, равные $(5 \pm 1) \cdot 10^{-31}$ и $(1 \pm 0,2) \cdot 10^{-31}$ см⁶/с.

Б. Ф. Горднеев

Ar-F

Ummuck 13354

1982

Gunde R., Felder P.,
et al.

потенциал
парного
взаимог.,
расшир.

Chem. Phys., 1982,
64, N3, 313-332.

F-Ar

1988.14516

1982

24 Б84. Спин-орбитальное взаимодействие в основных состояниях моногалогенидов благородных газов. Haberland H. On the spin-orbit splitting of the rare gas-monohalide molecular ground state. «Z. Phys.», 1982, А307, № 1, 35—39 (англ.)

С учетом спин-орбитальной связи рассмотрена двух-уровневая задача, соотв-щая взаимодействию $A(^2P_{1/2,3/2}) + B(^1S_0)$. Показано, что в том случае, когда спин-орбитальная связь может рассматриваться как слабо зависящая от межатомного расстояния (r) три потенциала взаимодействия $V(I_{3/2})$, $V(II_{1/2})$ и $V(X_{1/2})$ оказываются связанными друг с другом, и по двум из них третий может быть определен чисто аналитически. Особенно проста и наглядна указанная связь в предельных гундовских случаях при малых и больших r . Для нек-рых систем типа $\text{Hal}-\text{A}$, где $\text{Hal}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ и $\text{A}=\text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$ и Ne , проведен анализ полученных таким образом потенциалов и определены параметры

потенц.
критиче



(41)

X.1982, 19, N24

($\epsilon_{\min}$, $r_{\min}$) потенциальной ямы. Предложенная модель распространена также и для расчета потенциала $I_{3/2}$ состояния в ионе HeNe^+ , для которого потенциалы состояний $X_{1/2}$ и $I_{3/2}$ известны из эмиссионного спектра, а переход, связанный с $I_{3/2}$ не наблюдается. Отмечены трудности, возникающие при построении дальнедействующей части потенциала для этого состояния.

С. Долин



Ar · HF

1982

romerus.
nobexxH.

(+2)

[97: 61343p Anisotropic intermolecular forces. II. Rare gas-hydrogen fluoride systems. Hutson, Jeremy M.; Howard, Brian J. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3QZ). *Mol. Phys.* 1982, 45(4), 791-805 (Eng). Anisotropic intermol. potentials for Ar.HF, Kr.HF, and Xe.HF were obtained by least squares fitting to mol. beam spectra of van der Waals complexes. The abs. min. is at the linear rare gas-HF geometry for all the systems considered. The potentials are reliable around the abs. min., but the existing data are not sensitive to the behavior elsewhere. The abs. well depths and the behavior around the linear rare gas-FH geometries are not well detd. and depend upon the model chosen. The potentials for the rare gas-HF systems are considerably more anisotropic than for the corresponding rare gas-HCl systems (1982). The contributions of induction and dispersion forces to the potential anisotropy are discussed and both are found to be significant. The attractive forces can be adequately described in terms of induction and dispersion forces alone without the need to invoke incipient chem. bonding.

C.A. 1982, 97, 48.

ArHF

1982

6 Д398. Вращательный эффект Зеемана в ArHF.
Rotational Zeeman effect in ArHF. Read W. G.,
Campbell E. J. «Phys. Rev. Lett.», 1982, 49, № 16,
1146—1149 (англ.)

С помощью микроволнового фурье-спектрометра,
впервые зарегистрирован вращательный эффект Зеема-
на в ван-дер-ваальсовых молекулах ArHF, образу-
ющихся при расширении в вакуум смеси HF—Ar (4—
96%) с начальным давл. ~500 мм рт. ст. и комнатной
т-рой. Резонатор спектрометра и система импульсной
подачи газа размещались в соленоиде со сверхпрово-
дящими обмотками. Определены зеемановские пара-
метры ArHF: $g_{\perp} = -0,00503 (12)$ и $(\lambda_{\parallel} - \lambda_{\perp} = -1,7 (11) \cdot 10^{-30} \text{ см}^2)$ оценен квадрупольный момент $Q_{\parallel} = 2,79 (77) \cdot 10^{-26} \text{ К см}^2$. Отмечено, что эксперим. значение $g_{\perp}$ близко к теоретич. оценке, полученной на основе электронных и магн. свойств свободных Ar и HF в предположении структуры комплекса в виде $\text{Ar} \dots \text{HF}$.

С. В. Литке

М.П;

ор. 1983, 18, № 6

Ar HF

1982

' 97: 190662r Rotational Zeeman effect in ArHF. Read, W. G.; Campbell, E. J. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *Phys. Rev. Lett.* 1982, 49(16), 1146-9 (Eng). The 1st observation of the rotational Zeeman effect in a van der Waals mol. is presented. The spectrometer used in this study is a Fourier-transform microwave spectrometer employing an evacuated Fabry-Perot cavity and a pulsed gas nozzle, both of which are placed inside the bore of a superconducting solenoid. The rotational Zeeman parameters for ArHF are $g_1 = -0.00503(12)$ and $(\chi_1 - \chi_1) = -1.7(11) \times 10^{-20} \text{ cm}^3$. The mol. quadrupole moment is $Q_1 = 2.79(77) \times 10^{-26} \text{ statcoulomb-cm}^2$.

frausam.

chekmp

C.A. 1982, 97, v22

ArHF

1982

10 Б275. Эффект Зеемана во вращательном спектре ArHF. Rotational Zeeman effect in ArHF. Read W. G., Campbell E. J. «Phys. Rev. Lett.», 1982, 49, № 16, 1146—1149 (англ.).

На фурье-МВ-спектрометре с резонатором Фабри—Перо и импульсным соплом впервые измерен эффект Зеемана во вращательном спектре ван-дер-ваальсовой молекулы ArHF. Измерено расщепление вращательного перехода $J=1 \rightarrow 2$, $\Delta M = \pm 1$ комплекса вблизи частоты 12 ГГц при трех различных значениях напряженности магнитного поля. Анализ данных выполнен с учетом анизотропии магнитной восприимчивости в пренебрежении взаимодействиями ядерный спин-ядерный спин. Для перпендикулярной компоненты молек. g-фактора получено значение $g_{\perp} = 0,00503$ (12) и для анизотропии магнитной восприимчивости значение $\chi_{\parallel} - \chi_{\perp} = -2,57$ (1,69) $\cdot 10^{-10}$ МГц/Гс². Вычисленный на основе полученных

М.П.

ж. 1983, 19, N 10

данных и с учетом спин-спинового взаимодействия для HF вращательный спектр хорошо согласуется с измеренным спектром. Молекулярный $g_{\perp}$ -фактор приблизительно совпадает с величиной, полученной из анализа электронных и магнитных св-в свободных Ag и HF. Произведена оценка величины молек. квадрупольного момента комплекса.

С. Н. Мурзин



$F^- + Ar$

1982

Hug M.S., Doverspike

Y. D., et al.

полюсов

сегменты

определённые

элементы

I. Phys. B: Atom.

and Mol. Phys.,
1982, 15, N6, 951-959.

(см. $H^- + He$; I)

$\text{Ar}_2 \cdot \text{HF}$

Омск 14211

1982

анизотропн.
межмолекул.
потенциалы

Hutson J.M., Howard
B.J.

Mol. Phys., 1982,
45, N 4, 791-805.

Ar₂F

1982

crkmp.
pnypecs.

97: 171743b Formation kinetics of the triatomic excimer argon-fluorine (Ar₂F*). Marowsky, Gerd; Glass, Graham P.; Tittel, Frank K.; Hohla, Kristian; Wilson, William L., Jr.; Weber, H. (Max-Planck Inst. Biophys. Chem., Goettingen, Fed. Rep. Ger.). *IEEE J. Quantum Electron.* 1982, QE18(5), 898-902 (Eng). Detailed fluorescence measurements of electron beam-excited high pressure mixts. of Ar/F₂ and Ar/NF₃ were made in order to investigate the processes leading to the formation of Ar₂F*. Three-body collisional quenching of ArF* was identified as a major formation mechanism. The 3rd-order rate const. for this reaction was measured to be $k_1 = (1.2 \pm 0.2) \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$. In addn. quenching rates for collisional deexcitation of Ar₂F* by Ar and the fluoride donors NF₃ and F₂ were detd. The radiative lifetime was measured as $219 \pm 15 \text{ ns}$. The possible formation of Ar₂F* from long-lived excited Ar neutrals when using intense excitation d. and low-donor pressures is also briefly discussed.

C. A. 1982, 97, N 20.

Ar₂F

1982

12 Д895. Кинетика образования трехатомных эксимеров Ar₂F. Formation kinetics of the triatomic excimer Ar₂F. Matowsky Gerd, Glass Graham P., Tittel Frank K., Hohla Kristian, Wilson William L., Jr., Weber H. «IEEE J. Quantum Electron.», 1982, 18, № 5, 898—902 (англ.)

Исследована кинетика флуоресценции смесей Ar/F₂ и Ar/NF₃ при высоком давлении, возбуждаемых электронным пучком. Показано, что основным механизмом образования эксимеров Ar₂F является трехчастичная реакция тушения ArF* с константой скорости $k_1 = (1,2 \pm \pm 0,2) \cdot 10^{-30} \text{ см}^6 \text{ с}^{-1}$. Определено также радиационное время жизни Ar₂F* (219 ± 15) нс и константы скорости тушения этих эксимеров молекулами NF₃ и F₂. Кратко обсуждены другие возможные пути образования Ar₂F* за счет реакций с долгоживущими возбужденными атомами аргона при больших плотностях возбуждения и малых давлениях донорных газов. Библ. 30.

спектр

Р. 1982, 18, № 5

ArF

1982

5 Б1204. Эксимерные лазеры. Lasery ekscimerowe. Excimer lasers. Radzewicz Czesław, Kowalczyk Paweł. «Post. fiz.», 1982, 33, № 1—2, 17—27 (пол.; рез. англ.)

спектр

Обзор лит. данных по спектроскопии молекул ArF , KrCl , KrF , XeBr , XeCl , XeF . Описаны принцип действия эксимерных лазеров (ЭЛ), кинетика образования инверсии в активной среде ЭЛ, конструкции ЭЛ, а также применение ЭЛ в спектроскопии, нелинейной оптике и лазерной химии. Библ. 13. В. А. Надточенко

(обзор)

(15) ~~Ar~~

KrCl , KrF , XeBr , XeCl , XeF

X. 1983, 19, N 5.

Отмуч 15935

1982

Ar HF

Read W.B., Campbell
E.F.

Франсат.
Эффект
Зеемана,
молекул.
квадратолн.
момент.

Phys. Rev. Lett.,
1982, 49, N 16, 1146-
● 1149.

ArHF
ArFH

Om. 16015 1982

7 Д115. Межмолекулярная теория возмущений ван-дер-ваальсовых молекул. Intermolecular perturbation theory for Van der Waals molecules. Stone Anthony J., Hayes Ian C. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1982, № 73, 19—31. Discuss., 109—136 (англ.)

Межмолекулярная теория возмущений использована для расчета энергии линейных ван-дер-ваальсовых комплексов ArHF, ArFH, ArHCl, ArClH, NeHF, NeFH. Перекрывание орбиталей учитывается точно. Вычислены и расклассифицированы вклады первого и второго порядков. Результаты расчета после введения поправки на эффекты суперпозиции базисных наборов согласуются с данными самосогласованных вычислений для всей системы также с учетом поправки на изменение энергии фрагмента системы при появлении добавочных базисных ф-ций на соседнем фрагменте. А. Ф. Шестаков

(+2) ☒

ср. 1983, 18, N 7

● 1) ArHCl, ArClH
2) NeHF, NeFH

As DF

[Om. 17020]

1983

Врауам.
Зерект
Земана

Campbell E.F., Read
W.G.,
J. Chem. Phys., 1983,
78, N 11, 6490-6501.



Ar_2F

1983

Gu Zhi Yu, Wang Shao
Yin., et al.

лазер.
возбужд.
флюоресц.

Appl. Phys., [Part] B
1983, B31 (3), 157-61.

(см. Ar_2F ; III)

ArHF

1984

101: 180216k Argon isotope effect in the microwave spectra of argon hydrogen fluoride (ArHF). Cousins, Brian L.; O'Brien, Sean C.; Lamy, James M. (Dep. Chem., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Phys. Chem.* 1984, 88(22), 5142-3 (Eng). Rotational transitions for the less abundant isotopes of Ar in ArHF were obsd. by use of a pulsed Fourier-transform Fabry-Perot microwave spectrometer. The $K = 0$, $J = 1 \rightarrow 2$ transitions in $^{36}\text{ArHF}$ and $^{38}\text{ArHF}$ were measured in natural abundance. The use of the isotopic data to est. the ArHF well depth and equil. structure are discussed.

(yf cnekmp)

c. A. 1984, 101, N 20

ArHF

21395

1984

15 B1241. Влияние изотопического замещения аргона на микроволновые спектры ArHF. Argon isotope effect in the microwave spectra of ArHF. Cousins B. L., O'Brien S. C., Lisy J. M. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 22, 5142—5143 (англ.)

На МВ-фурье-спектрометре с резонатором Фабри—Перо и импульсным соплом измерены в области частот 6—13 ГГц вращат. спектры 3 изотопич. образцов вандерваальсового комплекса $^{40}\text{ArHF}$ (I), $^{38}\text{ArHF}$ (II), и $^{36}\text{ArHF}$ (III) в основном колебат. состоянии. Измерены частоты переходов $J=0-1$ и $1-2$ для I и $J=1-2$ для II и III. Анализ спектров выполнен в приближении модели псевдодвухатомной молекулы с межмолек. Пт Морзе. Определены вращат. постоянные, параметры потенциала Морзе и структурные параметры комплексов. Равновесные значения вращат. постоянной с учетом изотопич. замещения аргона $B_e=3210,4156$ (6) МГц, постоянной центробежного искажения $D_e=70,918$ (10) кГц и постоянной колебательно-вращат. взаимодействия $\alpha_e=289,4114$ (4) МГц заметно отличаются от полученных с модельным потенциалом Леннарда—Джонса 6—12.

С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1985, 19, N 15

АрНФ.

ОМ. 21395

1984

6 Л177. Изотопический эффект в микроволновом спектре комплекса ArHF . Argon isotope effect in the microwave spectra of ArHF . Cousins Brian L., O'Brien Sean C., Lisy James M. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 22, 5142—5143 (англ.)

На фурье-спектрометре с импульсной молекулярной струей исследованы МВ-спектры комплексов $\text{Ar}-\text{HF}$ с ^{36}Ar и ^{38}Ar , ^{40}Ar . Идентифицированы линии вращательных переходов с $J=1 \leftarrow 0$ и $2 \leftarrow 1$ вблизи 6 и 12 ГГц $^{40}\text{ArHF}$ и перехода с $J=2 \leftarrow 1$ вблизи 12 ГГц остальных молекул в основном колебательном состоянии. Все частоты обработаны по единой ф-ле для вращательной энергии, содержащей в явном виде приведенную массу комплекса и вращательные константы, выраженные через параметры потенциалов Морза. Для параметров Морза получены значения: $D=88,68 \text{ см}^{-1}$, $R_e=3,436 \text{ Å}$ и $a=2,151 \text{ Å}^{-1}$. М. Р. Алиев

М.П.

фр. 1985, 18, № 6.

Ar-HF

[Dm. 19455]

1984

Douketis C., Hutson G. M.,
et al.,

кв. мех.
расчет.

Mol. Phys., 1984, 52,
N 4, 763-782.

ArHF

10m. 20317)

1984

ArHCl

Hayes I.C., Hurst G.J.B.,
et al.

meop.
pacrim

Mol. Phys., 1984, 53,
N1, 107-127.

Ar... MF

011 19 963 1984

1 Л131. Сверхтонкая структура, обусловленная квадрупольным взаимодействием ядра D, во вращательном спектре комплекса $^{15}\text{N}_2 \dots \text{DF}$ и интерпретация постоянных сверхтонких взаимодействий χ_{aa}^{D} и D_{aa}^{HF} для ряда комплексов типа $\text{B} \dots \text{HF}$. D-nuclear quadrupole coupling in the rotational spectrum of $^{15}\text{N}_2 \dots \text{DF}$ and an interpretation of the hyperfine coupling constants χ_{aa}^{D} and D_{aa}^{HF} within a series of complexes $\text{B} \dots \text{HF}$. Legon A. C., Willoughby L. C. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 109, № 5, 592—608 (англ.)

М.Н.

С помощью микроволнового фурье-спектрометра в сочетании с охлаждаемой сверхзвуковой молекулярной струей исследована СТС линий вращательных переходов с $J=1 \leftarrow 0$ и $2 \leftarrow 1$ основного колебательного состояния ван-дер-ваальсового комплекса $^{15}\text{N}_2 \dots \text{DF}$. Анализ спектра выполнен с учетом квадрупольной связи ядра дейтерия и прямого спин-спинового взаимодействия

(+8) 17

фр. 1985, 18, N1

между ядрами фтора и дейтерия. Определены значения вращательной и центробежной постоянных ($B_0 = 3091,9004$ МГц, $D_J = 14,75$ кГц) и постоянных ($B_0 =$ полной связи ($\chi_{aa}^D = 278,6$ кГц) и спин-спинового взаимодействия ($D_{aa}^{HF} = -38,5$ кГц). Рассмотрена корреляция между значениями χ_{aa}^D и D_{aa}^{HF} для комплексов $B \dots HF$ с $B = \text{Ar, Kr, Xe, N}_2, \text{CO, PF}_3, \text{H}_2\text{S, HCN, H}_2\text{O}$.

М. Р. Алиев

$\text{K}_2 \dots \text{HF}$
 $\text{Xe} \dots \text{HF}$
 $\text{N}_2 \dots \text{HF}$
 $\text{CO} \dots \text{HF}$

$\text{PF}_3 \dots \text{HF}$
 $\text{H}_2\text{S} \dots \text{HF}$
 $\text{HCN} \dots \text{HF}$
 $\text{H}_2\text{O} \dots \text{HF}$

Ar_2F^+ Шуркис А.А., Пакаус-
кас Р.У., и др. 1984

Шяуляйск. гос. пед. ин-т.

М. П. Шяуляй, 1984. Ис. Библиогр.
9 назв. (Рукопись деп.

в ЛитНИИНТИ 28 марта
1984 г., N 1213 Ли-84 деп.)

(сер. He_2F^+ ; III)

Ar_2F^+

1984

Шуркее А. А., Такаускае
Р. И. и др.

Научный. гос. изд. ИИ-м
Владив., 1984. Ис. Библиогр.

с. п.

9 изв. (Рукопись деп. в лит.
НИИТИ 28 марта 1984 г.,
N 1213 ЛЧ-84 деп.)

(см. He_2F^+ ; III)

Ar₂HF

1985

10 Б1336. Вращательный спектр и структура тримера Ar₂—HF. Rotational spectrum and structure of the Ar₂—HF trimer. Gutowsky H. S., Klotz T. D., Chuang C., Schmuttenmaer C. A., Emilsson T. «J. Chem. Phys.», 1985. 83, № 9, 4817—4818 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

На усовершенствованном высокочувствит. микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсной молекулярной струей в обл. частот 4—18 ГГц с точностью около 1 кГц измерен вращат. спектр слабосвязанного тримера Ar₂—HF в основном колебат. состоянии. Идентифицировано 22 вращат. перехода *b*-типа. Зарегистрировано свыше 10 вращат. переходов, принадлежащих тримеру Ar₂—DF. Из этого факта, что в МВ-спектре наблюдались только переходы $ee \leftrightarrow oo$ и отсутствовали переходы $eo \leftrightarrow oe$, а также из анализа МВ-данных установлено, что тример имеет *T*-образную форму C_{2v} -симметрии.

С. Н. Мурзин

М.П.

(11) ☒

Х. 1987, 19, N 10

Ar₂·HF

Om. 23902

1985

Гранам-
чекмп,
отрукмпа

/ 103: 203000t Rotational spectrum and structure of the argon (Ar₂)-hydrogen fluoride trimer. Gutowsky, H. S.; Klotz, T. D.; Chuang, Carl; Schmuttenmaer, C. A.; Emilsson, Tryggvi (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(9), 4817-18 (Eng). A study of the rotational spectrum and structure of the Ar₂-HF trimer indicated a T-shaped complex best described as an Ar₂ dimer attracted sym. to HF. Over 20 *b*-dipole transitions were obsd. and assigned to Ar₂-HF and >10 others to Ar₂-DF.

C.A. 1985, 103, N 24

Ar₂DF

1985

Gutowsky H. S.,
Klots T. D., et al.

u. n. J. Chem. Phys., 1985,
83, N 9, 4817 - 4818.

(see Ar₂HF; III)

Ar_3 -HF
 Ar_3 -DF

Вращат.
спектр,
структура

от. 23291

1985

6 Л161. Вращательные спектры и структуры небольших кластеров: Ar_3 -HF и Ar_3 -DF. Rotational spectra and structures of small clusters. Ar_3 -HF and Ar_3 -DF. Gutowsky H. S., Klotz T. D., Chuang Carl, Keen John D., Schmuttenmaer C. A., Emilsson Tryggvi. «J. Amer. Chem. Soc.», 1985, 107, № 24, 7174-7175 (англ.)

В молекулярном пучке методом микроволн. фурье-спектроскопии исследован чисто вращательный спектр молекулярных кластеров Ar_3 -HF и Ar_3 -DF. Измерены частоты и представлена интерпретация ряда переходов между вращательными состояниями Ar_3 -HF с $J=1, \dots, 7$. Для перехода с $K=0$, $J=1 \rightarrow 2$ в Ar_3 -HF и Ar_3 -DF измерены частоты компонент сверхтонкой структуры. Выполнен расчет геометрич. параметров наблюдаемых кластеров и дан сравнительный анализ геометрии кластеров Ar_3 -HF и Ar -(HF)₂. Показано, что структура Ar_3 -HF и Ar_3 -DF определяется геометрией симметричного волчка. В. К.

фр. 1986, 18, № 6

Ar₃-HF

DM-23291

1985

103: 202949x Rotational spectra and structures of small clusters: Ar₃-HF and Ar₃-DF. Gutowsky, H. S.; Klots, T. D.; Chuang, Carl; Keen, John D.; Schmuttenmaer, C. A.; Emilsson, Tryggvi (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1985, 107(24), 7174-5 (Eng). Microwave rotational spectra were obsd. for the 2 small clusters Ar₃-HF and Ar₃-DF, the 1st clusters to be so characterized. Their detection was made possible by sensitivity improvements to a Flygare spectrometer, which uses Fourier transform operation of a Fabry-Perot cavity in conjunction with a pulsed supersonic nozzle to generate the clusters. The sym. top transitions measured for $J = 1 \rightarrow 2$ to $J = 6 \rightarrow 7$ are fitted by rotational consts. B_0 , D_J and D_{JK} of 1188.212 MHz, 6.85 kHz and -5.76 kHz for Ar₃-HF and of 1180.379 MHz, 6.57 kHz and -5.15 kHz for Ar₃-DF. The compn. of the clusters was established by the hyperfine structure of their $K = 0$, $J = 1 \rightarrow 2$ transitions; by the absence of K states other than 0, ± 3 , and ± 6 ; and by anal. of the values found for B_0 . The H/DF lies along the 3-fold axis of the Ar₃ group, with the H/D end closest to Ar₃.

48 ccmpr,

ll. n.

C.A. 1985, 103, 124

F-Ar

10M-22237)

1985

Kirkpatrick Ch.C., Vick-
land L.H.,

Chem. Phys., 1985, 98,
N2, 227-231.

помещу-
ает
взаимо-
действ.

Ar-HF

1986

Б 2 Л158. Ван-дер-ваальсовские потенциалы из ИК-спектров комплексов HF-инертный газ. Van der Waals potentials from the infrared spectra of rare gas-HF complexes. Fraser G. T., Pine A. S. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 5, 2502—2515 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С использованием перестраиваемого лазера исследован ИК-спектр поглощения ван-дер-ваальсовских комплексов Ar-HF, Kr-HF и Xe-HF в газовой фазе при $t_{\text{ре}} \approx 211$ К. Для основных колебательно-вращательных полос ν_1 , обусловленных валентными HF-колебаниями комплексов, изучена вращательная структура полос вплоть до достижения вращательной преддиссоциации. Определены параметры радиального потенциала Майтланда—Смита и предсказаны энергии связей, колебательные частоты ν_3 и др. спектроскопич. параметры для основного ($\nu_1=0$) и возбужденного ($\nu_1=1$) состояний комплексов. Представлен сравнительный анализ изменений некоторых спектроскопич. параметров в ряду комплексов относительно параметров мономера HF. Библ. 72.

В. К.

М.П.

⊗

(+2)

ср. 1987, 18, № 2

Ar ... HF

(OM. 25936) 1986

105: 161175n Van der Waals potentials from the infrared spectra of rare gas-hydrogen fluoride complexes. Fraser, G. T.; Pine, A. S. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(5), 2502-15 (Eng). High-resoln. IR spectra of the Ar-HF, Kr-HF, and Xe-HF van der Waals mols. were recorded in the vicinity of the H-F stretching fundamentals, ν_1 , under thermal equil. conditions at $T \approx 211$ K with a tunable difference-frequency laser. Rotational structure was obsd. up to or approaching rotational predissocn., permitting one to model the effective radial van der Waals potentials for these complexes. These potentials provide good ests. for the binding energies, D_0 , and the van der Waals stretching frequencies, ν_3 , in the ground ($\nu_1 = 0$) and excited ($\nu_1 = 1$) states of the mols. For $\nu_1 = 0$ in Ar-HF, Kr-HF, and Xe-HF, $D_0 = 102, 133, \text{ and } 181 \text{ cm}^{-1}$ and $\nu_3 = 39.2, 41.1, \text{ and } 43.4 \text{ cm}^{-1}$, resp. The ν_3 modes characterized by the model potentials aid in the assignment of the $\nu_1 + \nu_3 - \nu_3$ hot bands obsd. in the spectra. The band centers for the ν_1 fundamentals are all down shifted in frequency from the isolated HF monomer by $\Delta\nu = -9.654, -17.518 \text{ and } -29.185 \text{ cm}^{-1}$ for the Ar, Kr, and Xe complexes, resp. indicating that the van der Waals bonds are some 10 to 15% stronger in the excited vibrational state.

(UK cncmp,
 ν_1, D_0)

(+2) ☒

c. A. 1986, 105, n18

Kr ... HF, Xe ... HF

$Ar_2 F$

1986

Gu Zhiyu, Wang Shaoy-
ing, et al.

спектр Wuli Xuebao 1986, 35,
(2), 228-34.

●
(cur. $Ar_2 F$; III)

ArHF

1986

А 19 Б1313. Бинарный комплекс аргон — фторид водорода: пример долгоживущей метастабильной системы. The argon — hydrogen fluoride binary complex: An example of a long lived metastable system. Huang Z. S., Jucks K. W., Miller R. E. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 12, 6905—6909 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С использованием одночастотного лазера на центрах окраски методами лазерной оптотермич. и лазерной штарковской спектроскопии (ЛШС) исследована ИК-полоса ν_1 вал. кол. Н—F-связи комплекса Ar—HF в молек. пучке. По времени пролета комплексов от точки пересечения молек. пучка с лазерным излучением до болометрич. детектора оценена нижняя граница времени жизни возбужденного состояния с $\nu_1=1$ ($\tau \geq 3 \cdot 10^{-4}$ с). Найденная методом ЛШС величина дипольного момента возбужденного состояния (1,495 Д) на 12% выше дипольного момента основного колеб. состояния комплекса Ar—HF. Е. В. Алиева

М.П.

X. 1987, 19, N 19

Ar · HF

1986

9 Л169. Бинарный комплекс аргон—фтористый водород: пример долгоживущей метастабильной системы. The argon-hydrogen fluoride binary complex: an example of a long lived metastable system. Huang Z. S., Jucks K. W., Miller R. E. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 12, 6905—6909 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

В условиях молекулярного пучка, сформированного из смеси 0,6% HF и 10% Ar в He изучен колебательно-вращательный спектр бинарного комплекса Ar—HF, полученный с помощью перестраиваемого лазера. С разрешением 25 МГц в области перехода $[10^0 0 \leftarrow \leftarrow 00^0 0]$ измерены положения нескольких колебательно-вращательных линий комплекса, а также штарковские расщепления линии R1. Приведены результаты анализа полученных эксперим. данных; дана оценка нижнего предела времени жизни комплекса в возбужденном колебательном состоянии ($3 \cdot 10^{-4}$ с), для возбужденного состояния определены значения геометрич. параметров комплекса и найдено значение дипольного момента. Библ. 27.

В. К.

М.П.

ср. 1987, 18, № 9

Ar ... HF

Om-26233

1986

/ 106: 57955b The argon-hydrogen fluoride binary complex: an example of a long lived metastable system. Huang, Z. S.; Jucks, K. W.; Miller, R. E. (Dep. Chem., Univ. North Carolina, Chapel Hill, NC 27514 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(12), 6905-9 (Eng). The optothermal laser-mol. beam method was used to measure the IR spectrum of Ar-HF [$10^{\circ}0 \leftarrow 00^{\circ}0$]. The results show that the vibrational predissocn. lifetime of this complex is greater than the flight time of the mols. from the laser crossing region to the bolometer detector. This gives a lower limit on the lifetime of 3×10^{-4} s. The upper vibrational state dipole moment was also obtained for the complex ($\mu_1 = 1.495$ D) by carrying out IR Stark spectroscopy. This corresponds to a 12% increase in the dipole moment upon vibrational excitation. This change can be related to a stiffening of the van der Waals bond, and hence a redn. in the amplitude of the bending motion, in the vibrationally excited state.

(ok cream)

c.A. 1987, 106, N 8

$\text{Ar} \cdots \text{HF}$

1986

10 Д53. Удлинение связи HF при образовании гетеродимеров $\text{B} \cdots \text{HF}$. Определение длины связи HF и ее зависимости от прочности водородной связи. The lengthening of the HF bond on formation of heterodimers $\text{B} \cdots \text{HF}$. Determination and dependence on the strength of the hydrogen bond. Legon A. C., Millen D. J. «Proc. Roy. Soc. London»; 1986, A404, 89—99, № 1826 (англ.)

Предложен способ определения величины δr удлинения связи HF при образовании гетеродимера $\text{B} \cdots \text{HF}$ по эксперим. данным для констант ядерного спин-спинового взаимодействия D^{HF} и квадрупольной связи χ^{D} ядра дейтерия в $\text{B} \cdots \text{DF}$. Способ основан на определении δr из D^{HF} при учете поправок нулевых колебаний к D^{HF} с использованием данных по χ^{D} . По известным данным по D^{HF} и χ^{D} для 9 димеров $\text{B} \cdots \text{HF}$ с $\text{B} = \text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}, \dots, \text{H}_2\text{O}$ определены величины δr , которые составляют от 0 до 0,016 Å. Рассмотр-

(м.п.)

(+3)

ср. 1986, 18, № 10.

на корреляция между δr и величиной силовой постоянной K_{σ} водородной связи. При этом использованы приближенные значения K_{σ} , вычисленные по центробежным постоянным по «двухатомной» модели. Показано, что δr является монотонно увеличивающейся (почти линейной) ф-цией K_{σ} .

М. Р. Алиев

ArHF

1986

9 Л182. ИК-лазерная спектроскопия высокого разрешения ван-дер-ваальсовых комплексов в щелевых сверхзвуковых потоках: наблюдение и анализ полос ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_1 + 2\nu_3$ в ArHF. High resolution IR laser spectroscopy of van der Waals complexes in slit supersonic jets: observation and analysis of ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$, and $\nu_1 + 2\nu_3$ in ArHF. Lovejoy Christopher M., Schuder Michael D., Nesbitt David J. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 9, 4890—4902 (англ.) Место хранения ГПНТЕ СССР

Исследованы спектры ИК-поглощения молекул ArHF (I), охлажденных в реактивных импульсных сверхзвуковых газовых потоках, со спектральным разрешением $0,0008 \text{ см}^{-1}$ при помощи перестраиваемой лазерной системы, генерирующей разностную частоту в нелинейном кристалле. Проведен колебательный анализ спектров I. Идентифицированы полосы вал. кол. ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_1 + 2\nu_3$ I в составе комплексов с ван-дер-ваальсовы-

ср. 1987, 18, № 9

ми связями. Рассчитаны молекулярные постоянные для основного электронного состояния I. Обсуждены изменения прочности связей в комплексах I при колебательном возбуждении. Отмечено эффективное взаимодействие деформационных и валентных колебаний I в составе комплексов.

И. В. А.

Ar-HF

1986

12 Л195. ИК-спектроскопия поглощения под доплеровским контуром комплекса $\text{Ar}-\text{HF}[(10^00) \leftarrow (00^00)]$ в линейной сверхзвуковой струе. Sub-Doppler infrared absorption spectroscopy of $\text{Ar}-\text{HF}[(10^00) \leftarrow (00^00)]$ in a linear supersonic jet. Lovejoy Christopher M., Schuder Michael D., Nesbitt David J. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 127, № 4, 374—376 (англ.)

Методом перестраиваемой разностно-частотной лазерной спектроскопии в условиях сверхзвуковой струи под доплеровским контуром линий исследован ИК-спектр поглощения слабосвязанного комплекса (К) $\text{Ar}-\text{HF}$. Для полосы вал. кол. $\text{H}-\text{F}$ измерены полуширины и с точностью 10^{-3} см^{-1} определены положения 26 линий, обусловленных колебательно-вращательными переходами в состояние (10^00) К. Отмечен красный сдвиг ($\sim 10 \text{ см}^{-1}$) вращательных линий К относительно линий свободного HF . В результате анализа наблюдаемой структуры с привлечением литер. данных о вра-

(М.П.)

Ф. 1986, 18, N 12.

щательных постоянных основного состояния найдено положение начала полосы и рассчитаны молекулярные постоянные K в колебательном состоянии (10^0). Представлена оценка времени жизни возбужденного состояния (10^0). В. К.

ИИЯ
ИЗМ

ArHF

1986

20 Б1249. Инфракрасная лазерная спектроскопия высокого разрешения вандерваальсовых комплексов в щелевых сверхзвуковых струях. Наблюдение и анализ полос ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_1 + 2\nu_3$ в ArHF. High resolution IR laser spectroscopy of van der Waals complexes in slit supersonic jets. Observation and analysis of ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$, and $\nu_1 + 2\nu_3$ in ArHF. Lovejoy C. M., Schuder M. D., Nesbitt D. J. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 9, 4890—4902 (англ.)

М.А.

С помощью перестраиваемого лазера разностной частоты, с высоким разрешением измерена вращат. структура полос ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_1 + 2\nu_3$ вандерваальсовых комплексов ArHF, образующихся в импульсной сверхзвуковой струе. Положение начал полос — 3951,768; 4022,1047 (П-) и 4022,1062 (П+); 4023,3880 см⁻¹. Значения вращат. постоянных B , D , H (в см⁻¹): состояние

Х. 1987, 19, № 20

$(00^00) - 0,102253; 2,33 \cdot 10^{-6}; 3,3 \cdot 10^{-10}; (10^00) - 0,102610;$
 $2,07 \cdot 10^{-6}; 3,0 \cdot 10^{-10}; (11^10), \Pi^- - 0,100325; 3,32 \cdot 10^{-6};$
 $6,0 \cdot 10^{-10}; (11^10), \Pi^+ - 0,102651; 4,14 \cdot 10^{-6}, -; (10^02) -$
 $B = 0,08183$. Параметры одномерного потенциала Лен-
 нарда—Джонса C_6 ($10^5 \text{ A}^6 \text{ см}^{-1}$), C_{12} ($10^8 \text{ A}^{12} \text{ см}^{-1}$),
 R_e (A), ω_e и D_e (см^{-1}): состояние (00^00) , $\Sigma^+ - 3,80;$
 $3,08; 3,427; 42,6; 117; (10^00) \Sigma^+ - 4,36; 3,53; 3,427;$
 $45,7; 135; (11^10) \Pi^- - 2,63; 2,19; 3,442; 34,9; 79.$
 Обсуждены корриолисовы взаимодействия между коле-
 бат. уровнями и их проявления в спектрах. В. М. Ковба

Ar-HF

(Om. 24083)

1986

(UK)

105: 69263s Sub-Doppler infrared absorption spectroscopy of argon-hydrogen fluoride (Ar-HF)[(10⁰0) ← (00⁰0)] in a linear supersonic jet. Lovejoy, Christopher M.; Schuder, Michael D.; Nesbitt, David J. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 127(4), 374-6 (Eng). Ultra-sensitive tunable difference frequency IR absorption spectroscopy in a slit supersonic jet was used to observe sub-Doppler spectra of Ar-HF in the (10⁰/0) HF stretch and (11¹3) HF stretch plus van der Waals bend modes. Linewidths yield a lower limit of 3×10^{-9} s for the predissocn. lifetime in the vibrationally metastable upper state. The sensitivity of these direct absorption methods ($\leq 2 \times 10^9$ mols./cm³ per quantum state), in conjunction with the wide tunability of the difference frequency laser (2.2-4.2 μ m) permit high-resoln. studies of a large class of van der Waals complexes.

C.A. 1986, 105, N 8

ArHF

DM 26188

1986

20 Б1249. Инфракрасная лазерная спектроскопия высокого разрешения вандерваальсовых комплексов в щелевых сверхзвуковых струях. Наблюдение и анализ полос ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_1 + 2\nu_3$ в ArHF. High resolution IR laser spectroscopy of van der Waals complexes in slit supersonic jets. Observation and analysis of ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$, and $\nu_1 + 2\nu_3$ in ArHF. Lovejoy C. M., Schuder M. D., Nesbitt D. J. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 9, 4890—4902 (англ.)

М.Н.

С помощью перестраиваемого лазера разностной частоты, с высоким разрешением измерена вращат. структура полос ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_1 + 2\nu_3$ вандерваальсовых комплексов ArHF, образующихся в импульсной сверхзвуковой струе. Положение начал полос — 3951,768; 4022,1047 (П-) и 4022,1062 (П+); 4023,3880 см^{-1} . Значения вращат. постоянных B , D , H (в см^{-1}): состояние

X. 1987, 19, N 20

$(00^00) - 0,102253; 2,33 \cdot 10^{-6}; 3,3 \cdot 10^{-10}; (10^00) - 0,102610;$
 $2,07 \cdot 10^{-6}; 3,0 \cdot 10^{-10}; (11^10), \Pi^- - 0,100325; 3,32 \cdot 10^{-6};$
 $6,0 \cdot 10^{-10}; (11^10), \Pi^+ - 0,102651; 4,14 \cdot 10^{-6}, -; (10^02) -$
 $B = 0,08183$. Параметры одномерного потенциала Лен-
 нарда—Джонса $C_6 (10^5 \text{ A}^6 \text{ см}^{-1}), C_{12} (10^8 \text{ A}^{12} \text{ см}^{-1}),$
 $R_e (\text{A}), \omega_e$ и $D_e (\text{см}^{-1})$: состояние $(00^00), \Sigma^+ - 3,80;$
 $3,08; 3,427; 42,6; 117; (10^00) \Sigma^+ - 4,36; 3,53; 3,427;$
 $45,7; 135; (11^10) \Pi^- - 2,63; 2,19; 3,442; 34,9; 79.$
 Обсуждены кориолисовы взаимодействия между коле-
 бат. уровнями и их проявления в спектрах. В. М. Ковба

ArHF

OM 26188

1986

(Di)

ack chempr

105: 215930a High resolution IR laser spectroscopy of van der Waals complexes in slit supersonic jets: observation and analysis of ν_1 , $\nu_1 + \nu_2$, and $\nu + 2\nu_2$ in argon-hydrogen fluoride (ArHF). Lovejoy, Christopher M.; Schuder, Michael D.; Nesbitt, David J. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309-0440 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(9), 4890-902 (Eng). IR spectra of jet cooled Ar-HF were obtained via direct absorption of a high resolu. tunable difference frequency laser in a 2.54 cm path length, slit supersonic pulsed expansion at <10 K. Detection limits of 2×10^9 mols./cm³/quantum state permit observation of the high frequency ν_1 fundamental stretch (10^00) $\leftarrow$ (00^00), the $\nu_1 + \nu_2$ van der Waals bend plus stretch combination band (11^10) $\leftarrow$ (00^00), as well as transitions to the (10^02) triply vibrationally excited state that are weakly allowed via Coriolis interactions with the Π^+ component of the (11^10) manifold. The ground state (00^00) mol. consts. are in excellent agreement with previous microwave data. From the changes in rotational and centrifugal distortion consts., the vibrationally averaged van der Waals well depth is estd. to increase (+15%) with ν_1 excitation, but decrease dramatically (-42%) upon subsequent excitation of the $l = 1$ ν_2 bend. L-Doubling in the $\nu_1 + \nu_2$ (11^10) perpendicular bending state is large and neg. [-69.8(18) MHz] and

C.A. 1986, 105, N24

indicates the presence of a near resonant Coriolis coupled vibration of Σ^+ symmetry at lower energy. The decrease in the B rotational const. and the vibrationally averaged well depth upon ν_2 excitation confirms the strong coupling between van der Waals stretch and bend coordinates. The split expansion geometry quenches perpendicular velocity distributions and therefore offers intrinsically sub-Doppler resolu. in an unskimmed mol. beam. Residual linewidths in the Ar-HF spectra are all below the app. resolu. limit of ± 25 MHz, which translates into a lower limit for the predissocn. lifetime of 3 ns, i.e., in excess of $2 \times 10^6 \nu_1$ vibrational periods.

C

Ar₃F

(Om. 25969)

1986

check my

105; 105056n Optical emission and kinetic reactions of a four-atomic rare gas halide exciplex: argon fluoride (Ar₃F). Sauerbrey, R.; Zhu, Y.; Tittel, F. K.; Wilson, W. L., Jr. (Dep. Electr. Comput. Eng., Rice Univ., Houston, TX 77251-1892 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(3), 1299-302 (Eng). A new broadband emission from electron beam excited high pressure Ar/F₂ and Ar/NF₃ mixts. at 435 ± 50 nm is reported. This gas phase spectrum as well as previously unassigned broadband emission at 455 ± 55 nm obsd. in optically excited liq. Ar/F₂ mixts. was assigned to the 4-at. rare gas halide exciplex Ar₃F. Ar₃F is produced by 3-body collisions from Ar₂F, but it is easily destroyed by 2-body collisions due to its small binding energy.

C.A. 1986, 105, x12

Ар.МФ

[от. 28370]

1987

Алехин А.Б., Вениславская Т.И. и др.

струк-
тура
колебат.
частоты

Таблицы рекомендуемых
справочных данных.

Депонирован. во ВНИИКИ
Госстандарта СССР 17.02.87г.
N 295.

Ar_2-HF
 Ar_2-DF

On 26381 1987

№ 8 Л180. Вращательные спектры и структура тримеров Ar_2-H/DF . Rotational spectra and structures of the Ar_2-H/DF trimers. Gutowsky H. S., Klotz T. D., Chuang Carl, Schmittenmaier C. A. Emilsson Tryggvi. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 2, 569—576 (англ.)

С помощью импульсного микроволн. фурье-спектрометра в области частот 3—18 ГГц наблюдались 26 вращательных переходов ван-дер-ваальсовых кластеров Ar_2-HF и 19 переходов кластеров Ar_2-DF . Проанализирована тонкая структура наблюдавшихся спектров. По полученным эксперим. данным найдены значения вращательных постоянных, постоянных центробежного искажения, расстояний между атомами $Ar-Ar$ и $Ar-H/D$, а также среднее значение углов между осями инерции кластера и линией, соединяющей атом F с центром тяжести молекулы Ar_2 . Подробно анализируется силовое поле рассматриваемых кластеров. Показано, что рассмотренные тримеры являются плоскими высокоасимметричными волчками. В. А. Морозов

М. П.

ср. 1987, 18, № 8

Ar₂-HF

om. 26381

1987

№ 16 Б1305. Вращательные спектры и структура тримеров Ar₂-H/DF. Rotational spectra and structures of the Ar₂-H/DF trimers. Gutowsky H. S., Klots T. D., Chuang Carl, Schmuttenmaer C. A., Emilsson Tryggvi. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 2, 569—576 (англ.)

В диапазоне 3—18 ГГц измерены вращат. спектры ван-дер-ваальсовских комплексов Ar₂-HF и Ar₂-DF, образующихся в сверхзвуковой струе. Значения (в МГц) вращат. постоянных A'', B'', C'': Ar₂-HF — 3576,5077; 1739,1389; 1161,0544; Ar₂-DF — 3506,7907; 1744,0559; 1155,6361. Приведены также параметры центробежного искажения комплексов ($\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_{aaaa}, \tau_{bbbb}, \tau_{cccc}, H_{JK}, H_{KJ}, H_K$); рассчитанные силовые постоянные ($F_{11}, F_{12}, F_{22}, F_{33}$), параметры $\Delta, \tau_{aabb}, \tau_{abab}$; постоянные СТ взаимодействия; амплитуды торс. кол. Рассчитаны и приведены геометрич. параметры комплексов, полученные как без учета, так и с учетом торс. колебаний.

В. М. Ковба

М.П

⊗ (H)

х. 1987, 19, n 16

Ar₂ HF
Ar₂ DF

Граням-
чеконь,
Граням-
ночно-м.

C.A. 1987, 106, N 10

OM 26381

1987

106: 75263d Rotational spectra and structures of the diatomic argon-hydrogen fluoride/deuterium fluoride trimers. Gutowsky, H. S.; Klotz, T. D.; Chuang, Carl; Schmuttenmaer, C. A.; Emilsson, Tryggvi (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(2), 569-76 (Eng). The feasibility of studying weakly bound, neutral van der Waals clusters through their microwave rotational spectra was shown by identifying and characterizing Ar₂-HF/DF. Detection of the trimeric complexes was accomplished with the Flygare Mark II Fourier transform spectrometer, modified to better utilize its inherent sensitivity. Twenty-six *b*-dipole transitions (all *ee*→*oo*) were obsd. at 3-18 GHz for Ar₂-HF, and 19 for Ar₂-DF, and their hyperfine structures were analyzed. Fitting of the line centers with W.H. Kirchhoff's (1972) NBS program gave values (all in MHz) for J.K.G. Watson's (1967) determinable parameters of 3576.508(1), 1739.139(1), and 1161.054(1) for the rotational consts. *A*", *B*", and *C*" in Ar₂-HF, and of 3506.791(1), 1744.056(1), and 1155.636(1) in Ar₂-DF. The centrifugal distortion consts. *τ*₁, *τ*₂, *τ*_{aaaa}, *τ*_{bbbb}, and *τ*_{cccc} were -0.2039(3), -0.0522(1), -0.5353(5), -0.1159(1), and -0.02021(1) in Ar₂-HF, and -0.2116(7), -0.0528(2), -0.4941(7), -0.1123(1), and -0.0191(1) in Ar₂-DF. Three small 6th order terms were necessary to

fit the data within exptl. error. The trimer is a planar T-shaped, highly asym. top ($\kappa = -0.521$) with the equil. position of the H/DF on the C_{2v} figure axis (the b axis), the H/D end pointing toward the 2-Ar atoms. The structure can be viewed as a composite of 3 dimers, the Ar_2 and 2 Ar-HF/DF's. In the trimer, the Ar-Ar and the 2 Ar-HF/DF distances are a bit longer (0.04 and 0.01 Å) than in the dimers, suggesting the presence of 2nd-order effects. This picture is supported by an approx., pseudotriat. anal. of the force field, based on the 4 independent planar centrifugal distortion consts. The cluster is quite floppy. The hyperfine structure shows that torsional oscillations of the H/DF are comparable with those in the Ar-H/DF dimers, but anisotropic, being 3° larger in-plane than out-of-plane. The in-plane torsional oscillation of the Ar_2 is considered.

Ar₃-HF

OM 27 790

1987

5 Б1317. Вращательные спектры и структура малых кластеров Ar₃-HF и Ar₃-DF. Rotational spectra and Structures of the Small Clusters Ar₃-HF and Ar₃-DF. Gutowsky H. S., Klots T. D., Chuang Carl, Keen John D., Schmuttenmaer C. A., Emilsson Tryggvi. «J. Amer. Chem. Soc.», 1987, 109, № 19, 5633—5638 (англ.)

Измерены МВ-спектры кластеров ⁴⁰Ar₃-HF и ⁴⁰Ar₃-DF, образующихся в импульсном сверхзвуковом потоке при расширении смеси Ar с HF(DF) (0,5—1%). Определены частоты чисто вращат. переходов с $I=1$ — 6 в основном колебат. состоянии. Рассчитаны след. значения спектроскопич. постоянных: Ar₃-HF— $B_0=1188,2123(2)$ Мгц, $D_1=6,646(3)$ кгц, $D_{1K}=-5,753(6)$ кгц, $D_c=101,6(15)$ кгц, Ar₃-DF— $1180,3785(3)$ Мгц, $D_1=6,566(4)$ кгц, $D_{1K}=-5,142(6)$ кгц, $\chi_c=174,5(6)$ кгц. Для исследуемых кластеров предложена структура симметрии C_{3v} , в к-рой фрагмент HF расположен на оси третьего порядка, причем атом H (или D) лежит ближе к фрагменту Ar₃. Расстояние между центрами масс Ar₃ и HF оценено в 2,735 А. Обсуждена форма потенциала взаимодействия между Ar₃ и HF.

С. Б. Осин

М.П.

17(4)

Х. 1988, 19, №5

Ar₃-HF

(Om. 27790)

1987

Ar₃-DF

197.123523h Rotational spectra and structures of the small clusters Ar₃-HF and Ar₃-DF. Gutowsky, H. S.; Klotz, T. D.; Chuang, Carl; Keen, John D.; Schmittenmaer, C. A.; Emilsson, Tryggvi (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). J. Am. Chem. Soc. 1987, 109(19), 5633-8 (Eng). Microwave rotational spectra were obsd. for the 2 small clusters ⁴⁰Ar₃-HF and ⁴⁰Ar₃-DF, the 1st clusters to be so characterized. Their detection was made possible by sensitivity improvements to a Flygare spectrometer, which uses Fourier transform operation of a Fabry-Perot microwave cavity in conjunction with a pulsed supersonic nozzle to generate the clusters. The sym. top transitions measured for J = 1 → 2 to J = 6 → 7 are fitted by rotational consts. B₀, D_J, and D_{JK} of 1188.212 MHz.

Yf cplxmp,
Krausam-red.

(H) 18 Ar₃DF

C.A. 1987, 107, ~14

6.35 kHz, and -5.76 kHz for $\text{Ar}_3\text{-HF}$ and of 1180.379 MHz, 6.57 kHz, and -5.156 kHz for $\text{Ar}_3\text{-DF}$. The compn. and C_{3v} symmetry of the clusters were established by the conditions of their formation, by the hyperfine structure of their transitions, by the absence of K states other than 0, ± 3 , and ± 6 , and by anal. of the values found for B_0 . The H/DF lies along the threefold axis of the Ar_3 group, with the H/D end closest to Ar_3 . Anal. of the moments of inertia and torsional amplitudes for the 2 isotopic species gives an approx. Ar_3 c.m. to HF c.m. distance of 2.735 Å and an est. of 3.835 Å for the Ar-Ar distance. Tilt of the Ar_3 group is considered in the est. The Ar to HF c.m. and Ar-Ar distances in the clusters are comparable with those in the Ar_2 and Ar-HF dimers and $\text{Ar}_2\text{-HF}$ trimer. The shape of the interaction potential between Ar_3 and the H/DF is discussed.

Ar HF

1987

107: 14857z Structure and dynamics of molecular clusters via high resolution IR absorption spectroscopy. Nesbitt, David J. Nat. Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309-0440 (USA). Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng. 1987, 742(Laser Appl. Chem. Dyn.), 16-20. (Eng). The combination of high resolu. ($\approx 10^{-3}$ cm $^{-1}$) continuous-wave tunable difference frequency generation (2.2-4.2 μ m) with high sensitivity (10^{-6} /√Hz) long path length absorption methods in pulsed slit supersonic jets has permitted spectroscopic investigation of many weakly bound mol. complexes. The discussion focuses on 3 complementary areas of experimentation: (1) cluster formation in the mol. beam is probed via sub-Doppler, velocity resolved absorption profiles of monomer species; spatially dependent beam clustering is strongly manifested through loss of monomer absorption intensity at line center; (2) IR spectra of simple van der Waals mols. such as ArHF are obtained in the ν_1 HF stretching region; information on all modes in the complex is extd.; (3) IR spectra of H bonded complexes such as HFCO $_2$ are obsd. which exhibit large changes in av. mol. geometry as a function of vibrational state. Surprisingly low intermol. bending frequencies are evidenced in the spectra via hot bands, and provide dynamical information on coupled vibrational-rotational motion in floppy mol. systems.

UK crexmp

(4) 

C.A. 1987, 107, N2

HF CO $_2$

ArHF

1987

108: 46119x Slit jet IR absorption spectroscopy of molecular complexes. Nesbitt, David J. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309 USA). NATO ASI Ser., Ser. C 1987, 212 (Struct. Dyn. Weakly Bonded Mol. Complexes), 107-30 (Eng). The combination of high resolu. ($\leq 10^{-3}$ cm $^{-1}$) continuous-wave tunable difference frequency generation, high sensitivity ($\leq 10^{-6}$ /√Hz), direct absorption methods, and long path length (2.54 cm) pulsed slit expansions provide a powerfully general technique for studying weakly bound complexes in a cold mol. beam environment. Transient absorption of the narrow band laser provides a nonintrusive probe of the quantum state, velocity, temporal and spatial dependence of cluster formation in the pulsed mol. beam. High resolu. fundamental, combination and hot band spectra of ArHF, HFN $_2$ and HFCO $_2$ complexes are presented. Information on the mol. structure is detd. for vibrationally excited states which sample the potential energy surface far from the ground state, near equil. geometry.

См.рук.м.п.т.
на ар.ар.м.п.
вк.чек.м.п.

(+2) ~~IX~~

C.A. 1988, 108, N 6

Слабосвязанные
комплексы,
как, напр.,

Ar · HF

1987

108:45935y Bibliography of rotational spectra of weakly bound complexes. Novick, Stewart E. (Dep. Chem., Wesleyan Univ., Middleton, CT 06457 USA). NATO ASI Ser., Ser. C 1987, 212 (Struct. Dyn. Weakly Bonded Mol. Complexes), 201-12 (Eng).

A review with many refs. The bibliog. contains refs. to high resolu. exptl. studies of weakly bound complexes. The list was originally compiled to include only microwave expts., but grew to include other expts. done to rotational resolu. Some exptl. oriented theor. calcs. were included. For ease of use, refs. to some complexes appear twice; e.g., Ar HF will appear in the Ar and HF listings.

(Библиограф.
Французский
спектр)

С.А. 1988, 108, N 6

АрHF

От 31208

1988

± 6 Д50. Потенциальная функция ArHF. The potential function of ArHF / Burden F. R., Cuno A. // J. Mol. Struct.— 1988.— 189, № 1/2.— С. 25—30.— Англ.

Найдены значения параметров, определяющих вид потенц. поверхности взаимодействия ядер в молекуле ArHF в аналитич. форме, представленной в работе (Holmgren S. L. et al. // J. Chem. Phys.— 1978.— 69.— С. 1661). Для этого проведено численное решение ур-ния Шрёдингера, определены энергетич. состояния колебательно-вращательных уровней и проведено сопоставление теоретического колебательно-вращательного спектра с экспериментальным. Из этого сопоставления с использованием методики (Burden F. R. et al. // Mol. Phys.— 1987.— 62.— С. 33) и найдены иско-мые параметры потенц. ф-ции ArHF. Б. Ф. Гордиец

М.Н.

ср. 1989, № 6

ArHF

OM, 31208

1988

110: 45251p The potential function of argon-hydrogen fluoride (ArHF). Burden, F. R.; Cuno, A. (Chem. Dep., Monash Univ., Clayton, 3168 Australia). *J. Mol. Struct.* 1988, 189(1-2), 25-30 (Eng). The vibration-rotation spectrum of ArHF has been analyzed to produce a potential function, by using the exact Hamiltonian and numerical wave functions.

Kon. Krausam.
Cricking

C.A. 1989, 110, N6

~~Ar-H₂O~~

Ar-F

1988

4 Л231. Спектроскопия с перестраиваемым длинноволновым лазером комплексов с ван-дер-ваальсовой связью. Колебательно-вращательно-туннельные спектры Ar—H₂O. Tunable far infrared laser spectroscopy of van der Waals bonds: Vibration-rotation-tunneling spectra of Ar—H₂O / Cohen R. C., Busarow Kerry L., Laughlin K. B., Blake Geoffrey A., Havenith M., Lee Y. T., Saykally R. J. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 8.— С. 4494—4504.— Англ.

Получены спектры поглощения образованных в пучке димеров H₂O—Ar в области 18—28 см⁻¹. В качестве источника монохроматич. излучения использован длинноволн. ИК-лазер на парах муравьиной кислоты, частота генерации которого перестраивалась смещением его излучения с микроволновым на диоде Шотки; это обеспечивало сканирование в интервале до 75 ГГц от

М.А.

(74) 

ср. 1989, № 4

Ar-Cl,
Ar-NH₂, Ar-OH, Ar-SH,

линии генерации. Приведены частоты наблюдаемых линий и их отнесение вращательным линиям полос крутильных колебаний димера, которые сопровождаются туннельными переходами протонов. Определена структура колебательных уровней, вращательные и центробежные константы димера в этих состояниях. Найдены геометрич. параметры димера. Обсуждается строение и свойства димеров типа $\text{Ag}-\text{X}$ ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{OH}, \text{SH}, \text{NH}_2$). Библ. 49.

М. В. Т.



Ar₄-H/DF

1988

→ 9 Л158. Вращательные спектры и структуры малых кластеров: пентамеры Ar₄-H/DF. Rotational spectra and structures of small clusters: the Ar₄-H/DF pentamers. Gutowsky H. S., Chuang Carl, Klots T. D., Emilsson Tryggvi, Ruoff R. S., Krause Karl R. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 5, 2919—2924 (англ.)

М.П.

Изучены микроволновые вращательные спектры кластеров ⁴⁰Ar₄-HF и ⁴⁰Ar₄-DF в области частот 3,7—9 ГГц. Определены вращательные постоянные и геометрич. параметры кластеров. По данным сверхтонкой ядерной структуры линий сделан вывод, что группа атомов HF(DF) совершает деф. кол. относительно оси симметрии 3-го порядка. Средняя амплитуда колебаний HF при этом равна 40,4°, а DF — 25,1 (1,6)°.

В. А. Морозов

ср. 1988, 18, № 9

1988

Ar₄ - HF
Ar₄ - DF

М.П.

№ 18 Б1373. Вращательные спектры и структуры малых кластеров: пентамеры Ar₄—H/DF. Rotational spectra and structures of small clusters: the Ar₄—H/DF pentamers. Gutowsky H. S., Chuang C., Klots T. D., Emilsson T., Ruoff R. S., Krause K. R. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 5, 2919—2924 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в обл. частот 3,7—8,7 ГГц с разрешением около ,5 кГц при полуширинах линий около 10 кГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов пентамеров Ar₄—HF (I) и Ar₄—DF (II), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели симм. волчка с учетом квартичного центробежного искажения и сверхтонкой структуры вращат. переходов. Для I и II, соотв., определены вращат. постоянные $B_0=623,4539(1)$ и $618,5846(1)$ МГц, постоянные центробежного искажения $D_J=1,062(1)$ и $1,0295(4)$ кГц, $D_{JK}=0,611(31)$ и $0,665(4)$ кГц и постоянные сверхтонкой структуры. Полученные МВ-данные отнесены к пентамеру с группой Ar₄ в виде тетраэдра и с H/D, направленным в сторону Ar₄.

С. Н. Мурзин

X. 1988, 19, N 18

Ar₄-HF
Ar₄-DF

МЗ черны,
мпыкыра

1988

108: 176177a Rotational spectra and structures of small clusters: the argon tetramer-hydrogen fluoride(deuterium fluoride)(A= r₄-HF/DF) pentamers. Gutowsky, H. S.; Chuang, Carl; Klotz, T. D.; Emilsson, Tryggvi; Ruoff, R. S.; Krause, Karl R. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(5), 2919-24 (Eng). The ⁴⁰Ar₄-HF and -DF clusters were identified and characterized by their microwave rotational spectra using a Flygare-Balle Fourier-transform spectrometer with a pulsed supersonic nozzle to generate and detect the clusters. The obsd. $J = 2 \rightarrow 3$ to $6 \rightarrow 7$ transitions have fine structure limited to $K = 0, \pm 3$, and ± 6 , indicative of sym. tops with a 3-fold axis of symmetry produced by $I = 0$ nuclei. For Ar₄-HF, the rotational consts. B_0 (MHz), D_J (kHz), and D_{JK} (kHz) are 623.4539(1), 1.062(1), and 0.611(31), resp.; and for Ar₄-DF, 618.5846(1), 1.030(1), and 0.665(4). The clusters consist of the trigonal Ar₃-H/DF tetramer reported earlier, with a 4th Ar on the back side of the Ar₃ group to form a tetrahedral or near tetrahedral Ar₄. In both clusters, the H/DF lies along the 3-fold axis of the Ar₃ group, with the H/D end pointed at its face. Presuming an Ar-Ar distance of 3.85 Å for both clusters, the Ar₃ plane to HF center-of-mass distance for Ar₄-HF with a tetrahedral Ar₄ is 2.713 Å

C.A. 1988, 108, N20

compared to 2.735 Å for Ar₃-HF. The nuclear hyperfine structure of the rotational transitions shows that the H-DF⁺ experiences large amplitude bending vibrations with respect to the C₃ symmetry axis. The av. amplitude for HF⁺ (40.4°) is comparable with that reported for the smaller Ar_m-HF complexes (*m* = 1-3). For DF⁺ the apparent 25.1(1.6)° amplitude found is 10° less than that in the smaller complexes. The difference is attributed to an increased elec. field gradient at the D in the pentameter. A possibly related feature is an Ar₄ center-of-mass to F⁺ distance which is 0.013 Å longer for Ar₄-DF⁺ than for Ar₄-HF.

Ar₂F

1988

nonrepertive
cerium
photoreactions.

| 109: 82468q Photoabsorption cross-section measurement of argon fluoride (Ar₂F) excimer at 248 nm. Hakuta, Kohzo; Miki, Susumu; Takuma, Hiroshi (Inst. Laser Sci., Univ. Electro-Commun., Tokyo, Japan 182). *J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys.* 1988, 5(6), 1261-5 (Eng). The photoabsorption cross section of the Ar₂F excimer in the lowest excited state (4²Γ), which is produced by exciting an Ar/F₂ gas mix by a short-pulse relativistic electron beam, was detd. at 248 nm as $(3.3 \pm 1) \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ by observing the depletion of Ar₂F fluorescence induced by the irradiation of a short-pulse KrF laser beam. Observation of ArF fluorescence shows that the Ar₂F excimer is directly dissociated into ArF and Ar by absorbing a 248-nm photon.

C.A. 1988, 109, N10

Ar₂F [om. 30490] 1988
 Jacox M.E.,
Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
 Data, 1988, 17, n2, 349.

АрДФ

Дм 30353

1988

Краснов К.С.,
Филиппенко М.В.,

д.и.п.

ОМНИТЭХИМ.

(обзор)

Деп. N 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.



Армф

Дм. 30353

1988

Краснов Е.С.,
Сильченко М.В.,

д.р.н.

ОНИИТЭХИМ.

(обзор)

Дек. N 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.

Ar_2-HF (OM-32722) 1989

Ar_2-DF Klotz T.D., Gutowsky H.S.,

J. Chem. Phys. 1989, 91,
63-68.

Pravism.
Cherny

Rotational spectra of
 Ar_2-DCl and Ar_3-DCl , and

a pseudotriatomic force
field for $\text{Ar}_2\text{-H/DX}$.

ArHF

OM 33356

1989

17 Б1440. Внутримолекулярная динамика вандерваальсовых молекул: расширенное инфракрасное исследование ArHF. Intramolecular dynamics of van der Waals molecules: An extended infrared study of ArHF / Lovejoy C. M., Nesbitt D. J. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 5.— С. 2790—2807.— Англ.

Методом ИК-лазерной спектроскопии на разностной частоте с использованием сверхзвуковой молек. струи в области частот $3940-4100\text{ см}^{-1}$ с точностью $0,0002\text{ см}^{-1}$ измерен спектр девяти колебат. состояний вандерваальсова комплекса ArHF. Измеренные ИК-полосы отнесены к переходам между состояниями $(00^{\circ}0)$, $(00^{\circ}1)$, $(10^{\circ}0)$, $(10^{\circ}1)$, $(10^{\circ}2)$, $(10^{\circ}4)$, $(11^{\circ}0)$, $(12^{\circ}0)$ и $(11^{\circ}1)$. Анализ полос выполнен с учетом кватричного центробежного искажения и кориолисова взаимодействия. Спектроскопич. информация использована для определения потенциальной ПВ внутримолек. взаимодействия и равновесной конфигурации молек. комплекса. Предложена простая модель расчета частот и интенсивностей отдельных колебат. полос. С. Н. Мурзин

М.А.

X. 1990, N 17

Ar · HF

1989

111: 84433q Rydberg-Klein-Rees inversion of high resolution van der Waals infrared spectra: an intermolecular potential energy surface for argon + hydrogen fluoride ($v = 1$). Nesbitt, David J.; Child, Mark S.; Clary, David C. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Natl. Inst. Stand. Technol., Boulder, CO 80309 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(9), 4855-64 (Eng). A method is described for extn. of two-dimensional (angular and radial) potential energy surfaces for triat. rare gas-hydrogen halide van der Waals complexes. The approach relies on extensive J rotational term values obtained by high resolu. IR laser jet spectroscopy for a family of bending vibrational states to deduce the radial and angular dependence of the intermol. potential. First, effective 1D radial potentials for a series of bending states are obtained by rotational RKR anal. of exptl. obsd. rotational progressions. These 1D potentials, which represent vibrational avs. over different bending wave functions, are then inverted to det. the radially dependent coeffs. of a Legendre expansion to the full surface, i.e., $\sum V_l(R)P_l(\cos \theta)$. This relies on adiabatic angular motion with respect to radial degrees of freedom, the validity of which is discussed. This approach is tested with exptl. data from the (10⁰0) (fundamental), (12⁰0) (HF parallel bend), and (11¹0) (HF perpendicular bend) of Ar + HF ($v = 1$), excited up to $J \leq 25$. The accuracy of the resulting surface is verified by exact quantum bound state calens. which quant. reproduce the rovibrational input data, as well as predict the spectroscopic properties of five other vibrational states obsd. in the Ar + HF ($v = 1$) system but not used in the fitting procedure.

nomikus.
notexxocms

C.A. 1989, 111,
N 10

ArHF

1989

Chenmp,
M. N.

111: 183293a Intramolecular dynamics of van der Waals molecules: an extended infrared study of argon-hydrogen fluoride (ArHF). Lovejoy, Christopher M.; Nesbitt, David J. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Natl. Inst. Stand. Technol., Boulder, CO 80309-0440 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(5), 2790-807 (Eng). The near-IR spectrum of ArHF prep'd. in a slit supersonic expansion is recorded with a difference frequency IR laser spectrometer. By virtue of the high sensitivity of the technique, and the lack of appreciable spectral congestion at the 10 K jet temp., 9 of the 11 vibrational states with energies below the $\text{Ar} + \text{HF}(v = 1, j = 0)$ dissociation limit were obs'd. These include (10^0_0) , the lowest bound $\text{HF}(v = 1)$ state, the singly, doubly, and quadruply van der Waals stretch excited states (10^0_1) (10^0_2) , and (10^0_4) , both the Σ bend (12^0_0) and Π bend (11^1_0) , and the multiply excited, Π bend plus van der Waals stretch (11^1_1) . Two $\text{Ar} + \text{HF}(v = 0)$ states, (00^0_0) and (00^0_1) , are also characterized. This spectroscopic information is quite sensitive to the $\text{Ar} + \text{HF}$ potential energy surface away from the equilibrium configuration and thus provides a rigorous test of trial potential energy surfaces. Excellent agreement is obtained between expt. and the predictions of a recently reported $\text{Ar} + \text{HF}(v = 1)$ potential.

C.A. 1989, 111, N 20

Ar₂F

1989

Peters Peter J.

Bastiaens Bert M. et al.

crkmp Proc. SPIE-Int. Soc.
pycpces. Opt. Eng. 1989, 1023,
66-70.

(cur. ArF; III)

Ar ... F⁻

1991

Andrzej J.

потенц.
кривая,
теор.
расчет

Chem. Phys. 1991,
157(1-2), 123-33.

(ср. ● Ne ... F⁻; III)

Ar-MF [Am. 36 201]

1991

Dvorak M.A., Reeve S.W.,
et al.,

M.N.

Chem. Phys. Lett., 1991,
185, N3,4, 399-402.

Observation ● or three inter-

molecular vibrational states
of Ar-HF.

ArF₆

1991

14 Б1036. Квантовохимические расчеты, связанные с проблемой «стереохимически активных» электронных пар. Quantum chemical calculations on the problem of stereochemically active electron pairs : Contain. Abstr. Pap. 13th Int. Symp. Fluorine Chem., Bochum, Sept. 2—6, 1991 / Schmitz Frank, Kutzelnigg Werner // J. Fluor. Chem.— 1991.— 54, № 1—3.— С. 354.— Англ.

Методом ССП рассчитаны молекулы ArF_6 , KrF_6 , XeF_6 и изоэлектронные им ионы ClF_6^- , BrF_6^- и IF_6^- . Проведены как полноэлектронные расчеты, так и расчеты с использованием неэмпирич. псевдопотенциалов. При оптимизации геометрии в рамках группы симметрии C_{3v} получены искаженная структура для XeF_6 , слегка искаженная структура для KrF_6 и правильные октаэдрич. структуры для остальных систем. Рассчитанные равновесные межъядерные расстояния удовлетворительно согласуются с имеющимися эксперим. данными. Рассмотрены причины, определяющие стереохим. активность электронных пар.

А. А. Сафонов

М.Н.

(X) 15

X. 1992, N 14

Ar-HF

1992

Hutson J. M.

MB, UK,
not recy.
pub.

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

(see  Ar-HCl; III)

1992

Ar-HF

Ar-DF

пометис. σ -ил,
 предсказание
 в атомной конст.
 их энергии

C. A. 1992,
 117, N2

117: 14681u Vibrational dependence of the anisotropic intermolecular potential of argon-hydrogen fluoride. Hutson, Jeremy M. (Jt. Inst., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(9), 6752-67 (Eng). A new intermol. potential for Ar-HF is obtained by fitting to results from high-resoln. microwave, far-IR, and IR spectroscopy. The new potential, designated H6(4,3,2), is a function of the diatom mass-reduced vibrational quantum no. $v = (v + 1/2)/(\mu k)^{1/2}$ as well as the intermol. distance R and angle θ , and has 22 adjustable parameters. It reproduces all the available spectroscopic data for levels of Ar-HF correlating with HF, $v = 0, 1$, and 2, and DF, $v = 0$ and 1. The H6(4,3,2) potential is qual. similar to previous potentials, with a linear Ar-H-F equil. geometry and a secondary min. at the linear Ar-F-H geometry. Compared to the potential of Nesbitt et al. [*J. Chem. Phys.* 90, 4855 (1989)], obtained from spectra of Ar-HF ($v = 1$), the H6(4,3,2) potential is rather deeper near the equil. geometry (Ar-H-F), but shallower around the secondary min. (Ar-F-H). The abs. well depth increases by 19 cm^{-1} between HF $v = 0$ and $v = 1$. The vibrationally averaged induction energy is calcd. to be substantially (8.1 cm^{-1}) greater for $v = 1$ than for $v = 0$, and is responsible for most of the obsd. red shift in the complex. Predictions of addnl. spectroscopic properties that would test the new potential are given, including far-IR and overtone spectra of Ar-DF and dipole moments of excited states of Ar-HF and Ar-DF.

ArHF

1992

/ 120: 17979v A spectroscopic puzzle in argon-hydrogen fluoride (ArHF) solved: the test of a new potential. Lovejoy, C. M.; Hutson, J. M.; Nesbitt, D. J. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Natl. Inst. Stand. Technol., Boulder, CO 80309-0440 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(11), 8009-18 (Eng). The perturbed (v,b,K,n) = (1210),(1113) ← (0000) band of ArHF is obsd. in a tunable laser/slit supersonic expansion spectrometer. The (1210) level correlates with $j = 2$ rotation of the HF within the complex, and therefore provides a test of high-order terms in a Legendre expansion of the intermol. potential. Transitions to (1113) are obsd. due to intensity sharing with (1210), induced by a strong homogeneous (J-independent) perturbation that is analyzed quant. The (1113) level has three quanta of van der Waals stretch and thus probes the radial dependence of the potential close to the dissocn. limit. The vibrational and rotational assignment is made possible by predictions based on the new H6(4,3,2) intermol. potential of Hutson (1992), which agree nearly quant. with expt.

(check mp, M.N)

C.A. 1994, 120, N2

Ar_nHF

1992

118: 67215x Intermolecular hydrogen fluoride motion in argon-hydrogen fluoride (Ar_nHF) micromatrixes ($n = 1, 2, 3, 4$): classical and quantum calculations on a pairwise additive potential surface. Mellroy, Andrew; Nesbitt, David J. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309-0440 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(9), 6044-56 (Eng). The availability of pairwise additive "two-body" potentials for van der Waals systems from near-IR, far-IR, and microwave data permitted detailed prediction of librational behavior for isolated HF chromophores solvated by successive nos. of rare gas Ar atoms. Theor. calcs. were made of Ar_nHF equil. structures and intermol. HF vibrational frequencies, based on an Ar_nHF "two-body" potential energy surface developed from previously detd. Ar-Ar and Ar-HF potentials. Isomeric structures were predicted from local min. on these multidimensional surfaces, and are found to be in excellent qual. agreement with near-IR observations of Ar_nHF clusters with $n = 1, 2, 3$, and 4 Ar atoms. Quantum-mech. calcs. were done for the HF librational and van der Waals stretching modes against a rigid Ar_n frame. These pairwise additive potentials predicted a strongly increasing angular anisotropy for the HF bending coordinate with no. of Ar atoms (for small n), and provided predictions of HF intermol.

теор. расчет
модель

C.A. 1993, 118, 28

van der Waals bend and stretch vibrational frequencies. Fourier-transform (FT)-microwave and near-IR data, on the other hand, demonstrated only a minor dependence of the anisotropy on n ; this suggested the pairwise additive potentials can systematically overest. the angular anisotropy for HF bending. Selected cuts through these potential surfaces indicated significant coupling between the Ar_n-HF stretch, Ar-Ar stretch, and Ar-Ar bending vibrations. This strong vibrational coupling indicated that a full quantum treatment of all intermol. coordinates might be required in order to make quant. comparison with van der Waals vibrational data. In the limit of sufficient Ar atoms to fill the first coordination sphere around the HF, the calcs. indicated a nearly perfect cancellation of angular anisotropy for HF librational motion, consistent with the nearly free internal rotation of the HF obsd. in cryogenic Ar matrixes.



Ar-HF

1993

NO METEUS. QP-HU

LL-N.

C.A. 1994, 120, N12

120: 147691f The Ar-HF intermolecular potential: overtone spectroscopy and ab initio calculations. Chang, Huan C.; Tao, Fu Ming; Klemperer, William; Healey, Catherine; Hutson, Jeremy M. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(12), 9337-49 (Eng). The vibrational dependence of the intermol. potential of Ar-HF is investigated through the spectra of levels correlating with HF ($v = 3$). The authors have previously reported measurements of the (ν bKn) = (3000), (3100), and (3110) levels of Ar-HF using intracavity laser-induced fluorescence in a slit supersonic jet [*J. Chem. Phys.* 96, 2497 (1993)]. These levels are found to be well reproduced (within 0.1 cm^{-1}) by the Ar-HF H6(4,3,2) potential [*J. Chem. Phys.* 96, 6752 (1992)]. The second overtone expts. are extended to include the (3002) state which is coupled to (3110) through Coriolis interaction, and the (3210) state which is more sensitive to higher-order anisotropic terms in the potential. The observations establish that the level (3002) lies 0.229 cm^{-1} below (3110), with upper state rotational const. $B = 0.08589 \text{ cm}^{-1}$. This is in good accord with the predictions of the H6(4,3,2) potential. The (3210) state lies at $11484.745 \text{ cm}^{-1}$ with $B = 0.09979 \text{ cm}^{-1}$. The band origin is 1.7 cm^{-1} higher than predicted, and thus contains important new information on the vibrational dependence of the potential. Several detailed features of the spectra can be explained using the H6(4,3,2) potential.

The Q-branch lines of the (3210) $\leftarrow$ (0000) band show evidence of a weak perturbation, which can be explained in terms of mixing with the (3112) state. The (3210) spectrum exhibits parity-dependent rotational predissocn. and the widths of the P- and R-branch lines and the magnitude of the l-type doubling can be explained in terms of coupling to the (3200) state, which is est.d. to lie 4 cm^{-1} below the (3210) state. The Q-branch lines show a predissocn. cutoff above Q(16); this is in reasonable agreement with the predictions of the $\text{H}\delta(4,3,2)$ potential, but suggests that the binding energy calcd. for the potential may be about 3 cm^{-1} too large.e. To examine the potential further, high-level ab initio calcns. are performed, with an efficient basis set incorporating bond functions. The calcns. give a well depth of 92%-95% of that of the $\text{H}\delta(4,3,2)$ potential at $\theta = 0^\circ$ for $v = 0$ and $v = 3$, resp.; this is in line with earlier results on rare gas pairs. The calcns. also reproduce the anisotropy of the $\text{H}\delta(4,3,2)$ potential and its vibrational dependence. The dependence of the intermol. potential on HF bond length is found explicitly.

ArHF

1993

118: 179299j Observation of argon-hydrogen fluoride ($\text{ArHF} = \text{F}(3000)$) and its combination modes by laser-induced fluorescence. Chang, Huan C.; Klemperer, William (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(4), 2497-506 (Eng). Laser-induced fluorescence is used to obtain the second overtone spectrum of ArHF . The method exploits intracavity circulating power of a Ti-sapphire ring laser to pump the weakly bound complex generated in a supersonic slit jet from $v = 0$ to $v = 3$. Fundamental ($\Delta v = -1$) emission is monitored using an IR PbS detector. Intense fluorescence allows recording of the rotationally resolved sub-Doppler spectra of $(300) \leftarrow (0000)$, $(3100) \leftarrow (0000)$, and $(3110) \leftarrow (0000)$ transitions. The authors det. vibrational band origins of $\omega = 11,339.034 \text{ cm}^{-1}$, $11,412.438 \text{ cm}^{-1}$, $11,422.375 \text{ cm}^{-1}$ and rotational consts. of $B = 0.103, 30 \text{ cm}^{-1}$, $0.102, 76 \text{ cm}^{-1}$, $0.101, 15 \text{ cm}^{-1}$ for the (3000) , (3100) , and (3110) bands, resp. Both the band origins and the rotational consts. indicate that the weak Ar-HF van der Waals bond is strengthened as the HF stretch is vibrationally excited to higher states. All the observations are in near perfect accord with extrapolations of related consts. in the HF stretching states of $v = 0-2$.

лазерный
спект.
флуоресц.
М.Н.

C.A. 1993, 118, 2498

$Ar-HF$

1993
751230. Улучшенные вращательные постоянные в основном состоянии для димера аргон-фтористый водород. Improved ground state rotational constants for the argon-hydrogen fluoride dimer /Stockman P. A., Blake G. A. //J. Chem. Phys. .—1993 .—98 ,№ 5 .—С. 4307—4308 .—Англ.

На микроволновом спектрометре волноводного типа со сверхзвуковой молек. струей в области частот 24—80 ГГц с точностью около 10 кГц измерен вращат. спектр димера Ar—HF для вращат. переходов вплоть до $l=13 \leftarrow 12$ в основном колебат. состоянии. Анализ полученных данных выполнен с учетом кватричного, секстичного и октичного центробежного искажения. С учетом существующих микроволновых данных выполнен глобальный анализ вращат. спектров в основном и первом возбужденном колебат. состояниях и определены вращат. постоянные в состояниях $v=0$ и $v=1$ соотв., $B=3065, 7063$ и $3076,84$ МГц, частота колебат. перехода $E_v=3951,76842$ (55) cm^{-1} и постоянные центробежного искажения высших порядков. С полученными данными предсказан спектр для вращат. состояний вплоть до $l=20$ с точностью выше 1 МГц и до $l=40$ с точностью выше 30 МГц.

С. Н. Мурзин

М.Н.
X.1994, №7

Ar · (HF)₂

1993

118: 201387k Improved, ground-state rotational constants for the argon-hydrogen fluoride dimer. Stockman, Paul A.; Blake, Geoffrey A. (Div. Chem. Chem. Eng., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91125 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(5), 4307-8 (Eng). Extended microwave and millimeter-wave measurements are given for the ground vibrational state rotational transitions up to $J(13 \leftarrow 12)$ for the argon-hydrogen fluoride dimer. Microwave transitions, rotational consts and assocd. distortion consts. are presented.

Грассам-
ночмоет

C. A. 1993, 118, N 20

Ar₂HF

1993

720 Б1045. Неаддитивные взаимодействия для кластеров Ar₂HF и Ar₂HCl. Неэмпирическое исследование. The nonadditive interactions in the Ar₂HF and Ar₂HCl clusters: An ab initio study /Szczęśniak M. M., Chałasinski G., Piecuch P. //J. Chem. Phys. .—1993 .—99 ,№ 9 .—С. 6732—6741 .—Англ.

М.П.

(17) 18

Ar₂HCl



X-1994, N 20

Ar₂HF

1993

120: 38773p The nonadditive interactions in the argon-hydrogen fluoride and argon-hydrogen chloride (Ar₂HF and Ar₂HCl) clusters: an ab initio study. Szczesniak, M. M.; Chalasinski, G.; Piecuch, P. (Dep. Chem., Oakland Univ., Rochester, MI 48309 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(9), 6732-41 (Eng). The three-body effects in the Ar₂HX (X = F, Cl) are studied by means of the supermol. Moeller-Plesset perturbation theory in conjunction with the perturbation theory of intermol. forces. In both systems the nonadditive interactions are large and repulsive around the equil. geometry. The in-plane bending potential of H-F in the Ar₂HF cluster reveals a double min. with the barrier of ca. 2-3 cm⁻¹. The barrier is due to the three-body interactions. In Ar₂HCl the analogs potential has a single min., and the three-body effects make it shallower. The three-body interaction energy is dissected into its components such as exchange, polarization, and dispersion. The anisotropy of the total nonadditivity in Ar₂HF is dominated by polarization and exchange effects, and, consequently, it can be well reproduced at the SCF level of theory. The overall nonadditivity in Ar₂HCl is quite similar in magnitude, but it displays a different compn. The most anisotropic

ab initio
paper

□
④ Ar₂HCl

C. A. 1994, 120, N 4

is polarization followed by dispersion and exchange effects. The dispersion effect is the largest in magnitude. The long-range part of the polarization nonadditivity is analyzed via the multipole approxn. The calcns. indicate that the multipole expansion carried out to the inverse 12 power of R correctly describes the anisotropy of this effect. In Ar_2HF the effect of intrasystem correlation on dispersion nonadditivity is also investigated via the supermol. coupled cluster calcns. These calcns. provide an est. of 13.8 cm^{-1} for the total three-body effect in the equil. Ar_2HF trimer. This value may still be underestimated due to the basis-set unsatn. of dispersion nonadditivity.

Ar-HF

1994

121: 216258e Infrared-infrared double resonance spectroscopy of Ar-HF. Intermolecular state dependence of the dipole moment and vibrational predissociation in $v_{HF} = 2$. Block, P. A.; Miller, R. E. (Department of Chemistry, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 226(3-4), 317-24 (Eng). Stark spectra have been measured for Ar-HF in several excited intermol. bending and stretching states assocd. with $v_{HF} = 1$. The resulting dipole moments are compared with those calcd. using the most recent potential energy surface. IR-IR double resonance spectroscopy is used to access the corresponding states in $v_{HF} = 2$ where, in the absence of intermol. excitation, dissocn. occurs before the mols. can reach the detector. Simultaneous excitation of the Σ or Π bending vibrations, which have the effect of making the hydrogen atom point away from argon atom on av., results in lifetimes in excess of the mol. flight time (0.3 ms).

Cremp, Rpe -
Gucco

C. A. 1994, 121, N18

Ar-HF

1994

120: 230168m Spectral line shape parameters for HF in a bath of Ar are accurately predicted by a potential inferred from spectra of the van der Waals dimer. Green, Sheldon; Hutson, Jeremy (Inst. Space Stud., NASA Goddard Space Flight Cent., New York, NY 10026 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(2), 891-8 (Eng). An interaction potential for Ar-HF, which was recently dedd. from extensive spectroscopic data for the van der Waals dimer and which includes dependence on the HF vibrational state, was used with accurate close-coupling mol. scattering calens. to predict line shape parameters for the pure rotational and the fundamental and 1st overtone vibrational bands of HF in a bath of Ar. Agreement with expt. is good; in fact, considering inconsistencies among the exptl. values, the theor. values may be the more reliable. This confirms the accuracy of the Ar-HF interaction potential, including the dependence on the HF vibrational level which is sensitively probed by the line shift cross sections.

nomerel, no
rextocms

C.A. 1994, 120, N18

Ar_nHF

n = 1-14

теорет. расч.
рем. параметров
модель

1994

121:118243b Equilibrium structures and approximate HF vibrational red shifts for Ar_nHF (n = 1-14) van der Waals clusters. Liu, Suyan; Basic, Zlatko; Moskowitz, Jules A.; Schmidt, Kevin E. (Dep. Chem., New York Univ., New York, NY 10003 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(10), 7166-81. This paper presents a theor. study of the size evolution of equilibrium structures and approx. HF vibrational red shifts for Ar_nHF van der Waals clusters, with n = 1-14. Pairwise additive Ar_nHF intermolecular potential energy surfaces were constructed from spectroscopically accurate Ar-Ar and anisotropic Ar-HF potentials. The latter depend on vibrational excitation of the HF monomer. The global and energetically close-lying local min. of Ar_nHF, n = 1-14, for HF v = 0 and v = 1, were detd. using simulated annealing followed by a local minimization scheme. The results reproduce the exptl. variations of the shifts for n = 1-4.

C.A. 1994, 121, N10

AsHF

[DM. 37510]

1994

McDowell S.A.C., Tregey M.B.;
Buckingham A.D.

M.N. - Mol. Phys., 1994, 81, N5,
1225-1237

Ar-HF

1994

ab initio
расчет
потенци.
поверхн.

121:142216r Accurate ab initio potential energy surfaces of Ar-HF, Ar-H₂O, and Ar-NH₃. Tao, Fu-Ming; Klemperer, William (Department of Chemistry, Harvard University, Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 101(2), 1129-45 (Eng). The authors present accurate potential energy surfaces for Ar-HF, Ar-H₂O, and Ar-NH₃ from the supermol. calcs. using Mceller-Plesset ~~perturbation theory~~ up to the complete fourth-order (MP4) and efficient basis sets contg. bond functions. Preliminary calcs. on Ar-HF are given to show the usefulness of bond functions and the stability of the results with respect to the change of the basis set. Detailed MP4 calcs. on Ar-HF with a fixed HF bond length of $r = (r)_{\text{eq}}$ give a global potential min. with a well depth of 200.0 cm⁻¹ at the position $R = 3.470 \text{ \AA}$, $\theta = 0^\circ$ (linear Ar-H-F), a secondary min. with a well depth of 88.1 cm⁻¹ at $R = 3.430 \text{ \AA}$, $\theta = 180^\circ$ (linear Ar-F-H), and a potential barrier of 128.3 cm⁻¹ that separates the two min. near $R = 3.555 \text{ \AA}$, $\theta = 90^\circ$ (T shaped). Further calcs. on the three main configurations of Ar-HF with varying HF bond length are performed to obtain vibrationally averaged well depths for $v = 0, 1, 2$.



(42)

C.A. 1994, 121, N12

Ar-H₂O
Ar-NH₃

and 3. The authors' primary wells are about 15 cm^{-1} higher than those of Hutson's H644.3.29 potential for $v = 0, 1, 2$, and 3, and the authors' min. distances are about $0.05\text{ \AA}$ longer. Extensive MP2 calcs. ($R = 3.1\text{--}5.0\text{ \AA}$) and brief MP4 calcs. (near the radial min.) are performed for the internal potentials of Ar-H₂O and Ar-NH₃ with the monomers held fixed at equil. geometry. For Ar-H₂O, MP4 calcs. give a single global min. with a well depth of 130.2 cm^{-1} at $R = 3.603\text{ \AA}$, $\theta = 75^\circ$, $\phi = 0^\circ$, along with barriers of 22.6 and 26.6 cm^{-1} for in-plane rotation at $\theta = 0^\circ$ and 180° resp., and a barrier of 52.6 cm^{-1} for out-of-plane rotation at $\theta = 90^\circ$, $\phi = 90^\circ$. All these are in good agreement with expt. esp. with Cohen and Saykally's AW2 potential. The dependence of the Ar-H₂O potential on an OH bond length is calcd. to study the effect from excitation of the bond stretching vibration and the result agrees well with the red shift obsd. For Ar-NH₃, MP4 calcs. give a single global min. with a well depth of 130.1 cm^{-1} at $R = 3.628\text{ \AA}$, $\theta = 90^\circ$, $\phi = 60^\circ$, along with barriers of 55.2 and 38.0 cm^{-1} for end-over-end rotation at $\theta = 0^\circ$ and 180° , resp., and a barrier of 26.6 cm^{-1} for rotation about NH₃ symmetry axis at $\theta = 90^\circ$, $\phi = 0^\circ$. All these are in good agreement with expt. and Schmutterer et al. AA1 potential. The effects on potential from the change of the normal NH₃ pyramidal geometry to the planar geometry are calcd. and the results indicate that the Σ states with tunneling motion perpendicular to the radial coordinate remain virtually unchanged from free NH₃ whereas the Π states with tunneling motion parallel to the radial coordinate have the tunneling motion nearly quenched. Comparisons of the potentials for the systems from Ar-HF, Ar-H₂O, to Ar-NH₃ are made to reveal the periodic trends of bonding and structure in the van der Waals complexes.

Ar_nDF
(n = 1, 2, 3)

UKC Pucok
P. Azpucok

C.A. 1995, 123
N 14

1995

123: 182092v Pairwise and nonpairwise additive forces in weakly bound complexes: high resolution infrared spectroscopy of Ar_nDF (n = 1, 2, 3). Farrell, John T., Jr.; Davis, Scott; Nesbitt, David J. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309-0440 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(7), 2395-11 (Eng). High resolu. IR spectra of the $\nu_{DF} = 1 \leftarrow 0$ stretch in Ar_nDF (n = 1-3) were recorded using a slit-jet IR spectrometer. Anal. of the rotationally resolved spectra provides vibrationally averaged geometries and vibration origins for a DF chromophore sequentially solvated by Ar atoms. Calcns. using pairwise additive Ar-Ar and Ar-DF potentials predict lowest energy equil. structures consistent with the vibrationally averaged geometries inferred spectroscopically. Variational calcns. by Ernesti and Hutson [A. Ernesti and J. M. Hutson, *Faraday Discuss. Chem. Soc.* (1994)] using pairwise additive potentials predict rotational consts. which are in qual. agreement with, but consistently larger than, the exptl. values. The inclusion of nonpairwise additive (3-body) terms improves the agreement, though still not to within the uncertainty of the pair potentials. The vibrational redshifts of 8.696, 11.677, and 14.461 cm⁻¹ for n = 1-3, resp., reflect a nonlinear dependence of the redshift on the no. of Ar atoms. Both the variational calcns. of Ernesti and Hutson and diffusion quantum Monte Carlo calcns. [M. Lewerenz, *J. Chem. Phys.* (in press)] using pairwise additive potentials corrective 3-body terms. Anal. of the Ar_nDF (n = 2, 3) rovibrational line shapes reveals an upper limit to homogeneous broadening ~2-3 MHz, consistent with vibrational predissocn. lifetimes >50 ns.

1995

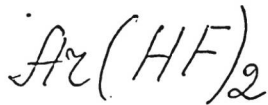
F: ArHF+

P: 3

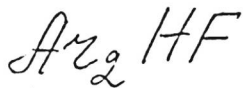
7B125. Электронная структура слабо связанных систем. II. Бимолекулярные катионы $\text{NeX}\{+\}$ и $\text{ArX}\{+\}$ ($\text{X}=\text{H}_2\text{O}$, HCl и HF). The electronic structure of weakly bound systems. II. $\text{NeX}\{+\}$ and $\text{ArX}\{+\}$ ($\text{X}=\text{H}_2\text{O}$, HCl , and HF) bimolecular cations / Lopez Gustavo E. // J. Comput. Chem. - 1995. - 16, N 6. - С. 768-776. - Англ.

Неэмпирически (с использованием неограниченного метода ХФ, МП2, МП4, квадратичного метода КВ) исследован указанный в заглавии ряд бимолекулярных катионов, состоящих из атома инертного газа и молекулярного катиона. Во всех случаях минимумам на поверхностях потенциальных энергий отвечают Н-связанные изомеры. Энергии связывания систем изменяются в интервале 0,1-1,0 эВ.

РХ 1997



1995



Suhm M. A.,
Nesbitt D. J.

UK criekmp

Chem. Soc. Rev. 1995,
24(1), 45-54.

( HF_3 ; III)

Ar^+F^-

(DM. 38509)

1996

Bresler C., Lawrence W.B.
et al.;

J. Chem. Phys., 1996,
105 (23), 10178.

Ar₂ HF

Om. 38503

1996

Ar₂ DF

John T. Farrell, Jr and
David J. Nesbitt,

J. Chem. Phys., 1996, 105

(21), 9421-

Probing three-body intermo-
lecular forces: ● Near-infra-

red spectroscopy of Ar_2 RF
and Ar_2 DF van der Waals
modes.

1996

F: Ar-HF

P: 3

16B158. Расчет квантовым методом Монте-Карло кластеров аргон-HF. Неаддитивные силы, изомеризация и сдвиги частот HF. Quantum Monte Carlo calculation of argon-HF clusters: Nonadditive forces, isomerization, and HF frequency shifts / Lewerenz Marius [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 3. - С. 1028-1039. - Англ.

РМХ 1997

$(\text{HF})_2 \text{Ar}_n$

1996

номер.
р-ид,
сирект.

Nemukhin A.V.,
Grigorenko B.L., et al.
Chem. Phys. Lett. 1996,
250 (2), 226-31.

(сир. $(\text{HF})_2$; I)

1996

F: Ar(HF)2

P: 3

19B120. Ван-дер-ваальсовы кластеры Ar[n]HF (n=1-4). Изучение квантовым методом Монте-Карло энергий, структуры и сдвигов колебательных HF-частот в основном состоянии. Ar[n]HF (n=1-4) van der Waals clusters: A quantum Monte Carlo study of ground state energies, structures and HF vibrational frequency shifts / Niyaz P., Bacic Z., Moskowitz J. W., Schmidt K. E. // ~~COST~~ Chem.-D3: Eur. Workshop COST Chem.-D3: "Quantum Syst. Chem. and Phys.", San Miniato (Pisa), 14-17 Apr., 1996. - [San Miniato (Pisa)], 1996. - С. P9. - Англ.

P21X, 1998, N19

Диффузионным методом Монте-Карло с использованием модели жесткого тела исследованы межмолек. колебательные основные состояния кластеров $\text{Ar}[n]\text{HF}$ с $n=1-4$ для HF с $v=0$ и 1. Рассчитанные колебательно усредненные кластерные структуры находятся в хорошем согласии с эксперим. геометрическими параметрами.

F: ArHF

1996

P: 3

19B120. Ван-дер-ваальсовы кластеры $\text{Ar}[n]\text{HF}$ ($n=1-4$). Изучение квантовым методом Монте-Карло энергий, структуры и сдвигов колебательных HF-частот в основном состоянии. $\text{Ar}[n]\text{HF}$ ($n=1-4$) van der Waals clusters: A quantum Monte Carlo study of ground state energies, structures and HF vibrational frequency shifts / Niyaz P., Bacic Z., Moskowitz J. W., Schmidt K. E. // COST Chem.-D3: Eur. Workshop COST Chem.-D3: "Quantum Syst. Chem. and Phys.", San Miniato (Pisa), 14-17 Apr., 1996. - [San Miniato (Pisa)], 1996. - С. P9. - Англ.

Диффузионным методом Монте-Карло с использованием модели жесткого тела исследованы межмолек. колебательные основные состояния кластеров $\text{Ar}[n]\text{HF}$

РЖХ, 1998, №9

с $n=1-4$ для HF с $v=0$ и 1. Рассчитанные колебательно усредненные кластерные структуры находятся в хорошем согласии с эксперим. геометрическими параметрами.

1996

F: Ar₃HF

P: 3

9B138. Ван-дер-ваальсовы кластеры Ar[n]HF (n=1-4). Изучение в основном состоянии методом Монте-Карло энергетических характеристик, структуры кластеров и сдвигов колебательных частот HF. Ar[n]HF (n=1-4) van der Waals clusters: A quantum Monte Carlo study of ground state energies, structures and HF vibrational frequency shifts / Niyaz Parhat, Basic Zlatko, Moskowitz Jules W., Schmidt Kevin E. // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 252, N 1 - 2. - С. 23-32. - Англ.

РМХ 1997

1996

F: Ar₂HF

P: 3

9Б138. Ван-дер-ваальсовы кластеры Ar[n]HF (n=1-4). Изучение в основном состоянии методом Монте-Карло энергетических характеристик, структуры кластеров и сдвигов колебательных частот HF. Ar[n]HF (n=1-4) van der Waals clusters: A quantum Monte Carlo study of ground state energies, structures and HF vibrational frequency shifts / Niyaz Parhat, Basic Zlatko, Moskowitz Jules W., Schmidt Kevin E. // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 252, N 1 - 2. - С. 23-32. - Англ.

РЖХ 1997

1996

F: ArHF

P: 3

9Б138. Ван-дер-ваальсовы кластеры $\text{Ar}[n]\text{HF}$ ($n=1-4$). Изучение в основном состоянии методом Монте-Карло энергетических характеристик, структуры кластеров и сдвигов колебательных частот HF. $\text{Ar}[n]\text{HF}$ ($n=1-4$) van der Waals clusters: A quantum Monte Carlo study of ground state energies, structures and HF vibrational frequency shifts / Niyaz Parhat, Basic Zlatko, Moskowitz Jules W., Schmidt Kevin E. // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 252, N 1 - 2. - С. 23-32. - Англ.

РЖХ 1997

1996

∫

F: Ar₄HF

P: 3

9Б138. Ван-дер-ваальсовы кластеры Ar[n]HF (n=1-4). Изучение в основном состоянии методом Монте-Карло энергетических характеристик, структуры кластеров и сдвигов колебательных частот HF. Ar[n]HF (n=1-4) van der Waals clusters: A quantum Monte Carlo study of ground state energies, structures and HF vibrational frequency shifts / Niyaz Parhat, Bacic Zlatko, Moskowitz Jules W., Schmidt Kevin E. // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 252, N 1 - 2. - С. 23-32. - Англ.

РЖХ 1997

Ar_nHF

$n = 1 \div 4$

См. кн., Help
Земля,
мел. павет

1996

124: 299418t Ar_nHF ($n = 1-4$) van der Waals clusters: a quantum Monte Carlo study of ground state energies, structures and HF vibrational frequency shifts. Niyaz, Parhat; Bacic, Zlatko; Moskowitz, Jules W.; Schmidt, Kevin E. (Department of Physics and Astronomy, Arizona State University, Tempe, AZ 85287 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 252(1,2), 23-32 (Eng). Rigid-body diffusion quantum Monte Carlo (DQMC) calcns. of the intermol. vibrational ground states of Ar_nHF clusters with $n = 1-4$, for HF $v = 0$ and $v = 1$, are reported. The intermol. degrees of freedom of the clusters are treated in full dimensionality, and the best available pairwise additive potential surfaces are used. The calcns. yield intermol. ground state energies, probability distributions of intermol. coordinates and HF vibrational red-shifts. The vibrationally averaged cluster structures are consistent with exptl. geometries. Small but systematic differences between the pairwise additive DQMC red-shifts and exptl. values for the $n = 2-4$ clusters are indicative of the need for the inclusion of nonadditive interactions.

C. A. 1996, 124, N 22

ArHF, ArFH
структура, энергия
(теор. расчет)

1996

125: 231178e Molecular structure and analytical potential energy function for Ar-FH system. Xie, Hongping; Tan, Mingliang; Jiang, Gang; Zhu, Zhenghe (Dep. Chem., Sichuan Teacher's Coll., Nanchong, Peop. Rep. China 637000). *Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao* 1996, 13(1), 36-42 (Ch). By using the Gaussian 92 program with the CID/6-311G* method, two kinds of equil. linear structures, ArHF and ArFH, were found, and the equil. geometries and dissociation energies for the two kinds of van der Waals complexes were calcd. By using the Gaussian 92 program with the MP2/6-311G* method, force constants for two kinds of complexes were also calcd. The anal. potential energy function for ArHF ($X^1\Sigma^+$) was derived by using many-body expansion based on the above results. The linear structures for ArHF and ArFH were rationalized, and the structure for ArHF (Cs) was predicted from the potential energy surface.

CA 1996, 125, 118

1997

128: 67952s Laser-induced fluorescence spectroscopy of Ar₂-HF at $\nu_{\text{HF}}=3$: An examination of three-body forces. Chuang, Cheng-Chi; Tsang, Susy N.; Hanson, Jason G.; Klemperer, William; Chang, Huan-Cheng (Department of Chemistry, Harvard University, Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(18), 7041-7056 (Eng), American Institute of Physics. The vibrational spectrum of Ar₂-HF in the 11,320-11,430 cm⁻¹ region is recorded by intracavity laser-induced fluorescence. The intramol. vibrational state, Σ_0 , in combination with the intermol. vibrations, assigned as $\Pi_{\text{in-plane}}$, $\Pi_{\text{out-of-plane}}$ and Σ_1 , of the complex were obsd. The Σ_0 state correlates adiabatically with $j = 0$ of HF ($\nu = 3$); the $\Pi_{\text{in-plane}}$, $\Pi_{\text{out-of-plane}}$, and Σ_1 states correlate adiabatically with $j = 1$ of HF ($\nu = 3$), resp. The authors detd. the vibrational band origins (and rotational consts.) of $\nu_0=11,323.784$ cm⁻¹ ($A = 0.120$ 15, $B = 0.058$ 30, $C = 0.038$ 94 cm⁻¹), $\nu_0=11,387.730$ cm⁻¹ ($A = 0.122$ 68, $B = 0.057$ 05, $C = 0.038$ 42 cm⁻¹), $\nu_0=11,426.815$ cm⁻¹ ($A = 0.120$ 27, $B = 0.058$ 15, $C = 0.038$ 71 cm⁻¹) and $\nu_0=11,427.400$ cm⁻¹ ($A = 0.120$ 26, $B = 0.058$ 15, $C = 0.038$ 71 cm⁻¹) for Σ_0 , $\Pi_{\text{in-plane}}$, $\Pi_{\text{out-of-plane}}$, and Σ_1 states, resp. The vibrational red shift for the pure HF stretch from $\nu_{\text{HF}} = 0-3$ is 49.023 cm⁻¹. The in-plane and out-of-plane bending frequencies are 63.947 and 103.031 cm⁻¹. The Σ_1 state, which may be viewed as the Ar₂FH structure is located 103.616 cm⁻¹ above the Ar₂HF Σ_0 state. The spectral line shapes appear to be

Ar₂ HF
Ar₂ FH

комбам.
и фукан.
снелмф

C.A. 1998,

128,
N6

F: ArHF

P: 3

20B119. Расчет структуры кластеров $\text{Ar}[n]\text{HF}$ с ДКМ-потенциалом ArHF / Григоренко Б. Л., Немухин А. В., Султанов В. Б. // Хим. физ. - 1997. 16, 12. - С. 3-9. - Рус.

Методом двухатомных комплексов в молекулах (ДКМ) с учетом нейтральных и ионных состояний фрагментов построена поверхность потенциальной энергии системы Ar-HF . С использованием новой поверхности методами молек. динамики и Монте-Карло проведено моделирование строения ван-дер-ваальсовых кластеров $\text{Ar}[n]\text{HF}$ ($n=1-12$). Результаты для малых кластеров ($n=1-4$) хорошо согласуются с эксперим. данными. Полученные результаты для конфигураций кластеров $\text{Ar}[n]\text{HF}$ ($n=1-12$) объясняют механизм их роста.

РЖХ, 1998, №20.

ArHF

1997

№ 24Б163. Неэмпирическое изучение структуры и энергетических характеристик комплекса ArHF . Ab initio characterization of the structure and energetics of the ArHF complex / Van Mourik Tanja, Dunning Thom H. Jr. // J. Chem. Phys.— 1997.— 107, № 7.— С. 2451–2462.— Англ.

С использованием неэмпирических методов (МП2–МП4, связанных кластеров) и базисов различного качества, определена полная трехмерная поверхность потенциальной энергии ArHF и рассчитаны равновесные структуры и энергии связывания для трех структур, отвечающих трем стац. точкам. Библ. 63. Н. С.

М.А.

Х. 1997, № 24

Ar HF

1997

ab initio
pacem

127: 225480x Ab initio characterization of the structure and energetics of the ArHF complex. van Mopurik, Tanja; Dunning, Thom H., Jr. (Environmental Molecular Sciences Lab., Richland, WA 99352 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(7), 2451-2462 (Eng), American Institute of Physics. The ArHF complex has been investigated using correlation consistent basis sets at several levels of theory, including Moller-Plesset perturbation theory (MP2, MP3, MP4) and coupled cluster techniques [CCSD, CCSD(T)]. The three stationary points (the primary linear Ar-HF min., the secondary linear Ar-FH min., and the interposed transition state TS) on the counterpoise-cor. potential energy surface have been characterized. Calcns. with the aug-cc-pV5Z basis set predict D_e for the Ar-HF min. to be (with estd. complete basis set limits in parentheses) -215 (-218) cm^{-1} for MP4 and -206 (-211) cm^{-1} for CCSD(T). For the Ar-FH min. and the TS, calcns. with the d-aug-cc-pVQZ sets predict D_e 's (and CBS limits) of -97 (-99) and -76 (-78) cm^{-1} (MP4) and -93 (-94) and -75 (-76) cm^{-1} [CCSD(T)], resp. The corresponding values for the H6(4,3,2) potential of Hutson are -211.1 ± 4 cm^{-1} , -108.8 ± 10 cm^{-1} , and -82.6 ± 10 cm^{-1} . While the agreement of our CCSD(T) est. with Hutson's value is excellent for the global min., it is less so for the other two stationary points, suggesting that the H6-(4,3,2) potential may be too attractive around the secondary min. and the transition state.

C. A. 1997, 127, N16

Al₃HF

[Om. 39420]

1998

Cheng-Chi Chuang, Susy N.
Tsang, et al.,

M.N.

J. Chem. Phys., 1998, 109,

N2, 484-491.

1998

Ar₂-HF

128: 172342r Symmetry-adapted perturbation theory of nonadditive three-body interactions in van der Waals molecules. II. Application to the Ar₂-HF interaction. Moszynski, Robert; Wormer, Paul E. S.; Heijmen, Tino G. A.; van der Avoird, Ad (Department of Chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warsaw, Pol.). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(2), 579-589 (Eng), American Institute of Physics. Symmetry-adapted perturbation theory (SAPT) of three-body forces is applied to characterize the nonadditive interactions in the Ar₂-HF trimer. The origins of the anisotropy of the nonadditive Ar₂-HF potential are discussed, and the results are compared with the existing ab initio data. The multipole-expanded expressions for the induction, induction-dispersion, and dispersion nonadditivities in terms of the multipole mo-

miop-
panem
homozymen

ments and (hyper)polarizabilities are derived for the special case of atom-atom-diatom complexes, and the validity of the multipole approxn. is investigated by comparison of the expanded and non-expanded energies computed at the same level of the theory and in the same basis sets. Finally, recent (semi)empirical models of nonadditive interactions in Ar₂-HF based on the exchange quadrupole electrostatic interaction are analyzed in terms of contributions as defined by SAPT. It is shown that the present level of the SAPT theory correctly accounts for the terms included in the exchange quadrupole electrostatic model.

C.A. 1998, 128, N14

ArMF

1998

Van Mourik Tanya;
et al.,

неопрем.
пациент
и их
корркт.
гид де,
де, we,
надежда
судимент

Adv. Quantum. Chem.
1998, 31, 105-135

(Ch. ● Na; III)

1998

F: ArHF

P: 3

131:107055 Theoretical calculations of
molecular structure for ArHF and KrHF. Tan,
Mingliang; Zhu, Zhenghe (Institute of Physics,
Sichuan Union University, Peop. Rep. China).
Sichuan Lianhe Daxue Xuebao, Gongcheng Kexueban,
2(4), 104-107 (Chinese) 1998 Mol. structure
parameters have been calcd. using Gaussian 92 with
the CID/6 - 113G* method. The equil. geometry of
the ground state for ArHF is linear and KrHF is
bent.

C.A. 1999, 131

F: ArnHF

1999

P: 3

132:28474 Structures, vibrational frequency shifts and photodissociation dynamics of ArnHF van der Waals clusters. Bacic, Zlatko Department of Chemistry, New York University New York, NY 10003, USA Theory At. Mol. Clusters, 54-85. Edited by: Jellinek, Julius. Springer: Berlin, Germany. (English) 1999.

54-85 A review with 136 refs. Our theor. work on the equil. structures, HF vibrational frequency shifts and the photodissocn. of HF in ArnHF cluster with $n = 1 - 14$, 54, is reviewed. The main objective of these studies has been to reveal how the frequency shift and the photofragmentation dynamic the solute HF mol. evolve in the course of formation

C. A. 2000, 132

and closing of the f solvent (Arn) shell, at $n = 12$ and, in the case of photodissozn., upon ad of the complete second solvent layer, for $n = 54$. All spectroscopic and dynamical properties of ArnHF clusters that we have studied exhibit strong dependence on the cluster size and isomeric structure.

F: Ar-HF

P: 3

2000

132:300365 Weak bond stretching for three orientations of Ar-HF at $\nu_{HF}=3$.

Chuang, Cheng-Chi; Higgins, Kelly J.; Fu, Henry C.; Klemperer, William

Department of Chemistry and Chemical Biology,
Harvard University Cambridge, MA 02138, USA J.

Chem. Phys., 112(16), 7022-7031 (English) 2000.

Three new ArHF ($\nu_{HF} = 3$) states, (3001), (3101), and (3111), were obsd. between 11,350 and 11,420 cm^{-1} by the hot band transitions from (0001) using intracavity laser induced fluorescence. The term values and rotational consts. of these levels are: (3001) $\nu_0=11,385.928\ 98(28)\ \text{cm}^{-1}$, $B = 0.095,546(32)\ \text{cm}^{-1}$; (3101) $\nu_0=11,444.258\ 12(68)\ \text{cm}^{-1}$, $B = 0.090,617(37)\ \text{cm}^{-1}$; and (3111) $\nu_0=11,456.076\ 51(36)\ \text{cm}^{-1}$, $B = 0.091,863(14)\ \text{cm}^{-1}$. Observation

C.A. 2000

of the ArHF (3001) state provides the van der Waals stretching frequency for ArHF at $v = 3$, $46.8945(4)$ $\text{cm}^{-1} = (3001) - (3000)$. This value shows an increase of 8.208 cm^{-1} (21%) upon HF $v = 3$ 0 valence excitation. The stretching frequency for the T shaped ArHF is $(3111) - (3110) = 33.7055(5) \text{ cm}^{-1}$. This value is only 7% greater than that obsd. at $v = 1$. The ($v_{\text{HF}}101$) .SIGMA. bend-stretch combination state, corresponding to ($\nu_{\text{u.s}} = 1$) of the Ar-FH configuration, was not obsd. at $v_{\text{HF}} = 0-2$. The stretching frequency here is $(3101) - (3100) = 31.8178(8) \text{ cm}^{-1}$. The soft-mode frequencies reveal strong bend-stretch coupling in the complex. Excellent agreement (within 0.3 cm^{-1}) is found between expt. and prediction from Hutson's $\text{H}_6(4, 3, 2)$ potential [J. Chem. phys. 99, 9337(1993)], for the three new levels. Large basis set coupled cluster calcns. [CCSD(T)] of the Ar- HF intermol. potential surface, $V(R, .\theta., r)$, are presented for $r = 0.6-2.0 \text{ \AA}$ and $.\theta.=0-180.\text{degree.}$ on a grid with $15.\text{degree.}$ spacing. This is an enlargement of the HF valence coordinate of more than double the equil. value. The dependence of the intermol. potential upon the HF valence coordinate, r , is very anisotropic, being maximal for $.\theta.=0.\text{degree.}$ and becoming essentially independent of r for $.\theta..gt.90.\text{degree.}$

~~weak bond, stretch, bend, bend-stretch, bend-bend~~

ArF_3^+
 ArF_5^+
 ArF_2^{2+}
 ArF_3^{2+}

(от. 40578)

2000

Чаркин О.П., Клименко А.М.
и др.,

стр.-ра, Ал. неопам. химии, 2000,
стабильн., 45, N 9, 1498 - 1507.
крист. спектр

Неэммеральское исследование структур,
стабильности и колебат. спектров
молекул и ионов фторидов и оксидов
хлора и аргона

ArHF

2001

135: 187017g Calculations of the vibrational spectrum and dynamics of the ArHF complex with the use of a semiempirical potential energy surface. Buchachenko, A. A.; Grigorenko, B. L.; Nemukhin, A. V.; Stepanov, N. F. (Khim. Fak., Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow, Russia). *Zh. Fiz. Khim.* 2001, 75(3), 400-406 (Russ), MAIK Nauka. The electronic structure, vibrational spectra and rate of the vibrational predissocn. of ArHF and ArDF van der Waals complexes were studied using a semi-empirical model of two-at. fragments for a mol. The potential surface was modified taking into consideration dipole moments of lower electronic state of the HF mol. The spectroscopic potential were used to describe the HF and DF fragments. The wave functions contained a corrections allowing to take into an account the energy of the vibrational-rotational interactions of two-at. fragments. A better agreement was achieved between exptl. and theor. data.

И. Черныш,
Константин.
Черныш,

М.Д.

С-17. 2001, 135, N13

HArF

2001

134: 76664a A theoretical study of HArF, a newly observed neutral argon compound. Runeberg, Ning; Pettersson, Mika; Khrichtchev, Leonid; Lundell, Jan; Rasanen, Markku (Department of Chemistry, University of Helsinki, FIN-00014 Helsinki, Finland). *J. Chem. Phys.* 2001, 114(2), 836-841 (Eng), American Institute of Physics. Computational results up to the CCSD(T)/aug-cc-pV5Z level are presented as support for the newly obsd. argon contg. compd.; argon fluoride hydride (HArF). The mol. was calcd. to be linear with $R(H-Ar)=132.9$ pm and $R(Ar-F)=196.9$ pm. The calcd. vibrational frequencies, cor. for anharmonicity and matrix effects, are 462 (Ar-F stretch), 686 (bend) and 1916 cm^{-1} (Ar-H stretch). These are in good agreement with the corresponding exptl. obsd. frequencies of 435.7, 687.0; and 1969.5 cm^{-1} for the matrix isolated species [*Nature* 406, 874 (2000)]. Including corrections for the finite basis set as well as for the zero-point energy, the new mol. is stable by 0.15 eV compared to the dissocd. atoms. HArF

meop. rasanen
CMP-AR
(2 H-Ar, 2 Ar-F,
Di, Do)

C.A. 2001, 134, N6

is further stabilized by an addnl. barrier of 0.18 eV, arising from the avoided crossing between the states corresponding to the ionic ($\text{HAr}^{\delta+}$)-($\text{F}^{\delta-}$) equil. structure and the covalent ($\text{HAr})(\text{F})$ dissociation limit. The dissociation of HArF via bending into the thermodynamic ground-state system, consisting of Ar and HF, is protected by a 1.0 eV barrier.