

CLN

NI - 660

1965

Таймашовы (сирект. параметр,
квант.-мех. расчет)

Wiebenga E.H.,

Stereochim. Inorg., Acad. Naz.

Lineei, Corso Estivo Chim. 9th, 1965
(Publ. 1967), 319-331 (Uranus)

CA, 1969, 71, 21, 128926g | 10.

XI-661

1965

Томманоисис (амрр, стабильность)

Wiebenga E.H.;

Stereschin. Inorg. Accad. Naz. Lincei,
Corso Estivo Chim., 9th, 1965 (Publ. 1964),
303-317

M. 10

CA, 1969, 71, N26, 131189g

$(Cl_2)_n$

1983

Ae;

798: 78419m Electron attachment to molecular clusters by collisional charge transfer. Bowen, K. H.; Liesegang, G. W.; Sanders, B. S.; Herschbach, D. R. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Phys. Chem.* 1983, 87(4), 557-65 (Eng). Endoergic charge transfer via $A + X_n \rightarrow A^+ + X_n^-$ in single collisions is used to study electron attachment to weakly bound mol. clusters. Two supersonic beams are employed, one to produce fast alkali atoms (usually $A = Rb$), the other to produce mol. clusters (typically $X = Cl_2$ or SO_2). From threshold energies for ion-pair formation, nominal electron affinities as a function of cluster size are derived for $(Cl_2)_n$, $Cl(Cl_2)_{n-1}$, and $(SO_2)_n$, with $n = 1-4$, $2-4$, and $1-5$, resp. The collisional charge-transfer process which forms the neg. cluster ions occurs on a subpicosecond time scale. The results are interpreted in terms of an impulsive-collision model, with incomplete vibrational relaxation for cluster ions larger than dimers.

~~(+2)~~ $(SO_2)_n$



$Cl(Cl_2)_{n-1}$

C. A. 1983, 98, N10.

$\text{Cl}(\text{Cl}_2)_{n-1}$

1983

Bower K.H., Liesegang

G.W., et al.

At;

J. Phys. Chem. 1983, 87

(4), 557-565.

(see. $(\text{Cl}_2)_n$; III)

$Cl\bar{m}$

(DM. 25938)

1986

($m=1-15$)

Ross U., Schulze Th.,

J. Chem. Phys., 1986,
85, N5, 2664-2670.

ClAl_4^{3+}

(DM-31281)

1988

Choi S.C., Boyd R. F.,
Knop O.,

τ , meop.
perceim

Can. J. Chem., 1988, 66,
N9, 2465-2475.

Аб

(оп. 32254)

1989

Тущев Т. Л., Богдырев А. У.,

Изв. АН СССР. Сер. Хим.

1989, №, 1679-1682.

Ас;

О проблеме второго и более
высокого сродства к элек-
тронной системе ● ических соеди-

repeated,



1991

5 Б1041. Структура и стабильность кластеров Cl_n^- , $n=2-7$. The structure and stability of Cl_n^- clusters, $n=2-7$ / Gustev G. L. // Chem. Phys.— 1991.— 156, № 3.— С. 427—437.— Англ.

Методом Хартри—Фока—Слейтера в приближении ЛКАО рассчитаны кластеры Cl_n^- ($n=2-7$) в основных и низших возбужденных электронных состояниях, а также соотв-щие нейтр. кластеры. Использованы локальные корреляц. поправки при параметризации обменно-корреляц. потенциала, а также нелокальная поправка Бекке. Оптимизированы геометрич. параметры кластеров. Определение адиабатич. и вертикальное сродство нейтр. кластеров к электрону; наибольшее сродство к электрону имеет Cl_7 (адиабатич. величина 5,4 эВ). Показано, что в основных состояниях все заряженные кластеры имеют более низкую энергию чем нейтр. и устойчивы к диссоциации по низшему каналу; нек-рые из них имеют и устойчивые низшие возбужденные состояния. Напротив, нейтр. кластеры Cl_4 и Cl_5 мало устойчивы, а Cl_6 — неустойчив относительно диссоциации с отщеплением Cl_2 . Библ. 50. А. А. Сафонов.

X. 1992, NS

Cl_n^-

$n=2-7$

1991

2 Д184. Структура и стабильность кластеров Cl_n^- , $n=2-7$. The structure and stability of Cl_n^- clusters, $n=2-7$ / Gutsev G. L. // Chem. Phys.—1991.—156, № 3.— С. 427—437.— Англ.

Методом функционала плотности в приближении локальной плотности с поправками на нелокальные эффекты исследовано электронное строение Cl_n^- , $n=2-7$, а также Cl_n . Приведены значения вертикального сродства к электрону и адиабатич. потенциалов ионизации (адиабатич. поправка во всех случаях мала) и равновесная геометрия. Все анионы стабильны по отношению к отщеплению электрона и диссоциации, а для некоторых стабильны и первые возбужденные состояния. Из нейтральных систем наиболее стабильны Cl_2 и Cl_3 , а у систем с большим n увеличивается склонность к фрагментации. Начиная с $n=3$ анионы стабильнее нейтральных систем по отношению к диссоциации. Все системы нейтральные обладают большим положит. сродством к электрону, максимальным, для Cl_7 (5,4 эВ).

электрон.
строение

ср. 1992, № 2

1991

Cl_m^-
($m=2,3$)

сверх-
мра
Ar

Gutsev G. L.,
Ziegler Tom.
Can. J. Chem. 1991.
69, N 6. C. 993-999.

(сир. Cl_n^- ; III)

$(Cl_2)_2$

1993

9Д102. Неэмпирическое исследование стационарных точек на поверхности потенциальной энергии ван-дер-ваальсова гомодимера $(Cl_2)_2$. An ab initio investigation of the stationary points on the potential energy surface for the $(Cl_2)_2$ van der Waals homodimer / De Almeida Wagner B. // J. Phys. Chem.. — 1993. — 97, № 11. — С. 2560—2563. — Англ.

The ground state potential energy surface for the $(Cl_2)_2$ homodimer has been examined at the Hartree—Fock and MP2 level of theory employing the 6—31+G* basis set. Three stationary points exhibiting T-shaped, parallel, and linear structures have been located and characterized according to the eigenvalues of the Hessian matrix. Zero-point energy corrections and basis set superposition errors have also been evaluated. The minima that have been found are only slightly different in energy with the T-shaped arrangement predicted to be the global minimum energy structure at both HF/6—31+G* and MP2/6—31+G* levels of theory.

11.1

ф. 1993, № 9

1999
F: Cl₂n⁺

P: 3

131:175258 Dissociation of molecular chlorine in a Coulomb explosion: Pot curves, bound states and deviation from Coulombic behavior for Cl₂n⁺ (n = 2,3,4,6,8,10). Wright, J. S.; DiLabio, G. A.; Matussek, D. R.; Corkum, P. Ivanov, M. Yu.; Ellert, Ch.; Buenker, R. J.; Alekseyev, A. B.; Hirsch, G. (Department of Chemistry, Carleton University, Ottawa K1S 5B6, Can.). Ph Rev. A: At., Mol., Opt. Phys., 59(6), 4512-4521 (English) 1999 Highly charged mol. ions are generated in Coulomb explosion expts. involving multielectron dissociative ionization, but little is known about precise mechanisms involved in their formation. To help improve the understanding of such expts., potential

energy curves are calcd. in this for chlorine (Cl_2) and its ions Cl_2n^+ , where $n = 1, 2, 3, 4, 6, 8, 10$. Bound vibrational states are obtained in three low-lying electronic states for and one state for Cl_2^{3+} . Vertical excitation energies are given for step excitations up to Cl_2^{10+} . For all the ions examd. there is a significant defect (Δ) from the corresponding Coulomb potential, in one case re magnitudes of over 20 eV. We analyze the origin of these energy defects terms of residual chem. bonding, and discuss the contribution of strongly bonding configurations at short internuclear distance. Finally, we prese simple phys. model which describes the qual. behavior of $\Delta(R, Q)$.