

Cl_3, Cl_3^{+-}

Cl_3^+

Melton C. E., Ropp G. A., Rudolph P. S.
(1958)

Cl_3^-

J. Chem. Phys. 29, 54, 968

Масс-спектр. исследование свободных
3-атомных ионов Cl и Br .

Катионы Cl_3^+ и Cl_2^+ Br_3^+ и Br_2^+

1966

α_3^-

Vibrational spectra of the Cl_3^- ion, and evidence of the existence of Cl_3^- . J. C. Evans and G. Y. S. Lo (Chem. Phys. Res. Lab., Dow Chem. Co., Midland, Mich.). *J. Chem. Phys.* 44 (9), 3638-9(1966)(Eng). Cl_3^- was prepd. from the Et, *n*-Pr, and *n*-Bu compds. of tetraalkylammonium trichloride. Raman spectra were detd. for the yellow solids in the form of thin layers in glass cells, and their solns. in MeCN or benzene with 6328-A. excitation from a He-Ne laser. Ir spectra were detd., 35-600 cm^{-1} . In the solid phase spectra of the Pr compd., strong bands at 268 and 242 were assigned to Raman and ir spectra, resp. In soln., a strong ir band at 232 cm^{-1} was assigned to the antisym. stretching mode ν_3 , and a medium band at 281 to the sym. stretching mode ν_1 . The doubly degenerate bend-

C.A. 1966.65.10

14652 de

ing mode ν_2 was estd. to be near 165 cm.^{-1} . A band near 93 cm.^{-1} was assigned to an interionic vibrational mode of ion aggregates. The spectra of Cl_3^- showed weak bonding with a large degree of interaction between bonds. Evidence of Cl_3^- was obtained from Raman spectra of MeCN solns. contg. molar ratios of $\text{Cl}_2/\text{Cl}^- > 1$. After the disappearance of Cl_3^- at a Cl_2/Cl^- ratio of 3, the Cl_2 band and a feature at 482 cm.^{-1} were prominent. The latter was assigned to Cl_5^- .

William T. Anderson, Jr.

Cl₃

ν_3

cur. nos

BP-XI-1317

1964

44332t Infrared detection of the trichloride radical, Cl₃.

Leonard Y. Nelson and George C. Pimentel (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 47(9), 3671-2(1967)(Eng). The infrared spectra of Cl₃ with Kr as a diluent are reported and a series of bands near 374 cm.⁻¹ was observed. The spectrum is explained as the ν_3 fundamental of linear and slightly asym. (C_{∞v}) Cl₃. The 2 principal force consts. were detd. as 1.309 and 1.214 millidynes/A.

CJJN

C.A. 1968. 68. 10

Cl₃

1314
X-17
Bp-17

14 Б161. Определение радикала Cl_3 методом ИК-спектроскопии. Nelson Leonard Y., Pimentel George C. Infrared detection of the trichloride radical, Cl_3 . «J. Chem Phys.», 1967, 47, № 9, 3671—3672 (англ.)

Методом ИК-спектроскопии доказано существование радикала Cl_3 . Вывод о существовании Cl_3 сделан на основании изучения структуры полосы поглощения 374 см^{-1} в спектре р-ра Cl_2 в твердом Ag. Перед осаждением на охлаждаемую подложку из CsJ смесь Kr и обогащенного (33% Cl^{37}) Cl_2 пропускалась через разрядную трубку. Показано, что структуру полосы 374 см^{-1} нельзя объяснить, предполагая, что она связана с молекулами KrCl_n . Как число линий, так и расстояния между ними согласуются с предположением о том, что эта полоса связана с линейным радикалом Cl_3 . Отмечено, что это первый случай спектроскопич. обнаружения радикалов типа X_3 . А. П. Коузов

X. 1968. 14

ВФ-Х1-1317

1967

Cl₃

6 Д393. Доказательство существования радикала Cl₃ методом ИК-спектроскопии. Nelson Leonard Y., Pimentel George C. Infrared detection of the trichloride radical, Cl₃. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 9, 3671—3672 (англ.)

Методом ИК-спектроскопии доказано существование радикала Cl₃. Отмечено, что это первый случай спектро-

9. 1968. 68

скопич. обнаружения радикалов типа X_3 . Вывод о существовании Cl_3 сделан на основании изучения структуры полосы поглощения 374 см^{-1} раствора хлора в твердом аргоне. Перед осаждением на охлаждаемую подложку из CsI смесь криптона и обогащенного ($33\% ^{37}Cl$) хлора пропускалась через разрядную трубку. Показано, что структуру полосы 374 см^{-1} нельзя объяснить, предполагая, что она связана с молекулами $KrCl_n$. Как число линий, так и расстояния между ними согласуются с предположением о том, что эта полоса связана с линейным радикалом Cl_3 . А. П. Коузов

1971

 Cl_3^- K_c

Термод. —

50761p Analysis of dissolution curves for chlorine in hydrochloric acid solutions. Shimonis, I. V. (Vses. Zaochn. Politekh. Inst., Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1971, 16(11), 2902-6 (Russ). The soly. of Cl in HCl solns. is given and the soly. curves are constructed for -4, 0, 10, 20, and 25°. A linear correlation exists between the $\log [Cl_3^-]$ and $\log [Cl^-]$ of the system at the above temps. The system forms only 1 complex anion, Cl_3^- . The equil. consts. and the thermodynamic parameters of the reaction, $Cl_{2(g)} + Cl^- \rightleftharpoons Cl_3^-$ are given.

C.A. 1972-76-10

1971

Cl₃⁻

17 Б62. Средне-квадратичные амплитуды колебаний ионов тригалогенидов. Unnikrishnan Nayag S., Aruldas G. Mean square amplitudes of vibration of trihalide ions. (Short communication). «Acta chim. Acad. sci. hung.», 1971, 67, № 1, 61—62 (англ.)

С использованием лит. значений частот нормальных колебаний вычислены силовые коэф. и средне-квадратичные амплитуды колебаний ионов $\text{JCl}_2^-(D_{\infty h})$, $\text{JBr}_2^-(\text{I})(D_{\infty h})$, $\text{BrJ}_2^-(\text{II})(C_s)$ и $\text{J}_3^-(\text{III})(C_s)$. Из рассмотрения вычисленных средне-квадратичных амплитуд колебаний сделан вывод, что II можно рассматривать состоящими из иона Br^- и молекулы J_2 , что находится в согласии с рентгенографич. данными. На основании рассмотрения вычисленных средне-квадратичных амплитуд колебаний обсужден характер переноса заряда с центрального на концевые атомы в I—III.

А. П. Александров

Сил. котор.

+4

X. 1971.17

+3



I_2^+ ; Br_2^+ ; Cl_2^+ ; I_3^+ ; Br_3^+ ; $X\bar{I}378b$ $\left(\begin{array}{l} v_i \\ \text{cum.} \\ \text{norm.} \end{array} \right)$ 1972
 Cl_3^+ ; $Cl_3^+AsF_6^-$; $Cl_2F^+AsF_6^-$;
 $ClF_2^+AsF_6^-$; $BrF_2^+AsF_6^-$; $ICl_2^+SbCl_6^-$;
 $I_2Cl^+SbCl_6^-$

Gillespie R. J., Morton M. J., Sowa J. M.,

Advan. Raman Spectrosc., 1972,
 1, 539-45 (anul.)

Raman spectra of halogen and
 interhalogen cations. 9

10



CA, 1973, 79, N26, 151107x

Cl_3^+

1973

Gillespie R. J.; et al.

"Adv. Raman. Spectrosc.

Vol 1, Proc. 3rd Int.

Conf. Reims, 1972, "

London, e.a. 1973, 539-45

curr.
norm.
te



(cur I_2^+ ; III)

Cl₃⁺

1974

Andrews Yester

Allen Ralph O, et. al

Di

"J. Chem. Phys." 1974, 61,
v5, 2156-2157 (anon)

(see CCl₃⁺ III)

p. 1975. N2

Cl₃[±]

1974

Чаркин О.П. и др.

Proc. Int. Conf. Coord
Chem. 16th 1974, 2.3a, 3pp.

(кв. мех
расчет
тр. структур)

(cell $Az\overline{Tx}^{\pm}$) III

ClF_2 ; Cl_3 (реакт. смес., реакт.) 1974
Vasini E., Castro E., XI 4315
Y. Mol. Struct., 1974, 22, N3, 415-419
(англ.)

The geometry of 21 valence
electron radicals.

Proc Lum., 1975, 3529

10

Ⓟ

6

$\text{CCl}_3, \text{CCl}_2, \text{CCl}_3^+, \text{CCl}_2^+, \text{X1442-1 } 1975$
 $\text{Cl}_3^+, \text{Cl}_2\text{CCl}_2^+, \text{Cl}_4^+, \text{Cl}_3^- \text{ (vi). 11,14}$

Andrews L., Przybowski Z. M.,
Allen R. O.,

J. Phys. Chem., 1975, 79 (9), 904-12.

Infrared spectra of the molecular
ions and radicals produced by proton
radiolysis of carbon tetrachloride
in argon during condensation at 15°K.
C. A. 1975. 82N26-01781452. 1 to (4) 10

50307.8842
Ch, Ph, TC, DB

40771

1975

Cl_3^-

(Vi)

#4-9697

Ault Bruce S., Andrews Lester.
Salt-molecule matrix reactions. Infrared
spectra of the $M^+HCl_2^-$ and $M^+Cl_3^-$ ion pairs
in solid argon.
"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 97, N 13,
3324-3326

0428 пик.

(англ.)

395 397

4 2 0

ВИНИТИ

F_2^- , Cl_2^- , Cl_3^- (sol. enicirp) 1976.

MF_2^- , MCl_2^- (спектр в матриц.)

M - ионизован. металл.

Andrews L., X-9752

J. Amer. Chem. Soc., 1976, 98 (8),
2147-52.

Optical spectra of the difluoride, dichloride, and trichloride ions in the matrix - isolated...
C.A. 1976. 84 N 24. 1717958. 110. (4)

1976

Cl₃v₁, v₃

несимметрич.

связь с

металлом

85: 101557x Infrared and Raman spectra of the $M^+Cl_3^-$ ion pairs and their chlorine-bromine counterparts isolated in argon matrixes. Ault, Bruce S.; Andrews, Lester (Dep. Chem., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(12), 4853-9 (Eng). The Ar matrix reactions of alkali chloride salts with Cl_2 were investigated through ir and Raman spectra. In each ir expt., an intense product band was obsd. between 327 and 375 cm^{-1} and assigned to the antisymmetric stretching vibration v_3 of the Cl_3^- anion in the ion pair $M^+Cl_3^-$. Raman spectra of these reaction mixts. yielded the same v_3 bands and, in addn., new signals between 253 and 276 cm^{-1} which are assigned to the symmetric stretching vibration v_1 of Cl_3^- in the $M^+Cl_3^-$

species. The observation of 2 stretching modes in the Raman spectra indicates that the Cl_3^- ions are asymmetric in these ion pairs. Bromine counterparts and the mixed chlorine-bromine anions were also formed, and used to verify that the anion in the $M^+X_3^-$ species contains 3 halogen atoms, with the metal ion beside the anion in an asymmetric T shaped structure.

C.A. 1976

85 N14

X-9 - 15781

1976

Cl₃⁻

485: 198607z An ab initio energy surface for the trichloride ion, Cl₃⁻. A comparison of CNDO and ab initio results for a model trihalide ion. Riedel, E. F.; Willett, Roger D. (Chem. Phys. Program, Washington State Univ., Pullman, Wash.). *Theor. Chim. Acta* 1976, 42(3), 237-46 (Eng). A potential energy surface for the Cl₃⁻ was calcd. via an ab initio SCF MO method. The significant feature of the surface is the existence of a single min., indicating the isolated Cl₃⁻ ion exists in a sym. (D_{3h}) configuration. The calcd. Cl-Cl bond length is 0.26 Å longer than the Cl-Cl bond length calcd. for the Cl₂ mol. The calcd. charge distribution is in excellent agreement with that deduced from NQR data. Std. CNDO calcs. gave a very poor description of the bonding in the trichloride ion. However, by reparameterizing β to give the correct bond distance for the Cl₂ and excluding *d* orbitals, excellent agreement between the CNDO and ab initio results was obtained.

kb. exx.
jccrem.

At 15-1X-485
Bp-15-485

C.A. 1976. 85 N26

45-15481

1976

Cl₃⁻

Cl₂

Cl⁻

(u, m; 20)

7 Б22. Неэмпирическая поверхность энергии для трихлорид иона Cl₃⁻. Сравнение неэмпирических данных и результатов ППДП для модельного тригалогенидного иона. Riedel E. F., Willett Roger D. Ab initio energy surface for the trichloride ion, Cl₃⁻. A comparison of CNDO and ab initio results for a model trihalide ion. «Theor. chim. acta», 1976, 42, № 3, 237—246 (англ.)

Методом Хартри—Фока—Рутана проведены расчеты поверхности потенциальной энергии линейного иона Cl₃⁻, а также молекулы Cl₂ и иона Cl⁻. Использован канонич. набор сгруппированных гауссовых функций s- и p-типа, описанный Клементи. На поверхности энергии обнаружен единственный минимум, соотв-щий конфигурации симметрии D_{∞h} с межъядерным расстоянием между соседними атомами на 0,26А большим, чем в

(+2) X

X.1577N7

45-15481
BR-17-161

молекуле Cl_2 . Оценка энергии связи по отношению к системе $\text{Cl}_2 + \text{Cl}^-$ привела к значению 32,6 ккал/моль. Найденные значения распределения заряда хорошо согласуются с данными ЯКР. Для сравнения проведены также вычисления в рамках станд. процедуры ППДП. Полученные значения межъядерных расстояний, энергии связи силовых постоянных вал. кол. и распределения заряда совершенно не согласуются с данными неэмпирич. расчета. Достаточно хорошего соответствия (кроме величины силовой постоянной) удалось добиться за счет исключения d -орбиталей и дополнительного варьирования параметра β_{AB}^0 . А. Г. Гухин

Cl_3^-

кв. мет.
расчет,
м.н.

ф. 1977
N 4

4 Д137. Неэмпирический расчет потенциальной поверхности иона Cl_3^- . Сравнение результатов неэмпирических расчетов и расчетов в приближении ППДП для модельного тригалогенид-иона. Riedel E. F., Willett Roger D. An ab initio energy surface for the trichloride ion, Cl_3^- . A comparison of CNDO and ab initio results for a model trihalide ion. «Theor. chim. acta», 1976, 42, № 3, 237—246 (англ.)

В рамках метода МО ЛКАО проведены неэмпирич. расчеты отдельных участков потенц. поверхности иона Cl_3^- . В качестве базисных ф-ций были использованы сжатые гауссовы орбитали. Анализ результатов расчета позволяет сделать вывод, что на потенц. поверхности существует единственный минимум, соответствующий линейной конфигурации иона Cl_3^- . Длина связи $Cl-Cl$ в Cl_3^- на 0,26А больше, чем в молекуле Cl_2 . Распределение электронной плотности находится в согласии с эксперим. данными. Отмечается, что расчеты иона Cl_3^- методом ППДП с использованием стандартной параметризации Попла приводят к плохим результатам. Однако если параметр β_{Cl-Cl} выбрать из условия, чтобы в молекуле Cl_2 воспроизводилась эксперим. длина связи $Cl-Cl$, то результаты расчета по методу ППДП с полученным таким образом значением β_{Cl-Cl} находятся в хорошем согласии с результатами неэмпирич. расчета.

А. И. Панин

1976

18.6.51-57

Cl₃-

(ATTACH 5423)

1977

пачет
коопер.

Jaszanski M.
Kochanski E.

J. Amer. Chem. Soc.

1977, 99 N 14, 4624-28

Cl_3^-

Br_3^-

I_3^-

№ 18395

1977

11 Д175. Расчет электронных состояний анионов трехатомных галогенов. Tasker P. W. A calculation of the electronic states of the trihalide anions. «Mol. Phys.», 1977, 33, № 2, 511—518 (англ.)

В приближении валентной связи с учетом остовных электронов по методу псевдопотенциала проведен расчет электронных свойств и построены кривые потенц. энергии основных состояний анионов Cl_3^- , Br_3^- , I_3^- . Вычисленные величины длин связей, энергий диссоциации, колебательных частот и энергий перехода на нижнее возбужденное состояние удовлетворительно согласуются с эксперим. данными. Представлены также результаты вычислений кривой потенц. энергии, описывающей взаимодействие аниона X^- с молекулярным ионом X_2^- .

А. Обухов

E, D_0, D_1, E_i
крив. потенц. энергии

(+2) ☒

Ф. 1977 N 11

(+2)

ХЗ - 18395

1977

Cl₃⁻

22 Б45. Расчет электронного строения анионов тригалогенидов. Tasker P. W. A calculation of the electronic states of the trihalide anions. «Mol. Phys.», 1977, 33, № 2, 511—518 (англ.)

Cl₃²⁻

В рамках метода ВС в валентном приближении рассчитано электронное строение одно- и двухзарядных отриц. ионов тригалогенидов: X_3^- и X_3^{2-} , где $X = Cl, Br$ и J . Взаимодействие остовных и валентных электронов учтено методом псевдопотенциала. В расчетах использована та же расчетная методика, что и в проведенных ранее расчетах (Molec. Phys., 1976, 32, 1651) анионов X_2^- . С целью проверки исходного базиса определены равновесные длины связи и энергия диссоциации в молекулах X_2 . Показано, что рассчитанные длины связи превышают на 10—15% опытные значения, а энергия диссоциации завышена более чем вдвое. Вычисленные равновесные длины связей в X_3^- соответствуют симм. конфигурации ядер и равны среднему значению длин связей в X_2 и X_2^- , т. е. сумме ионного и ковалентного радиусов. Правильные продукты диссоциации (X^- и

Br₃⁻Br₃²⁻J₃⁻J₃²⁻

+2

расчет
Мол. физ.

Ж. 1977 № 22

X_2^- получены только для потенциала несимм. конфигурации. Опытные оценки по энергии диссоциации воспроизведены с точностью до ~ 1 эв. Отмечено, что полная энергия связи в ряду X_3^- , так же как и в ряду X_2^- и X_2^- , падает от Cl к J. Оценена энтальпия р-ции $X_2 (г.) + X^- (г.) = X_3^- (г.)$, а также теплота образования X_3^- . На основании вычисленных значений энергий переходов и колебательных частот интерпретированы опич. спектры поглощения. Изучен потенциал взаимодействия X^- и X_2^- . Показано, что анионы X_3^{2-} являются нестабильными и их можно рассматривать как переходное состояние при миграции V_k -центров (X_2^-) в кристаллах галогенидов щел. и щел.-зем. элементов.

С. Долин

1978

Cl₃

Ungemach S. R.

From Energy Res Abstr. 1978,
3(9), Abstr No 21947

recess
practic

(see ClF₂; III)

Cl_3^-

1979

Lee Z. C., et al.

porozuccos.

J. Chem. Phys., 1949, 20,
N 4, 3237-46.



ex. Cl_2^- - III

Cl_3^-

Виттис 7776

1979

15 B772. Образование иона Cl_3^- в газовой фазе. Robbiani Richard, Franklin J. L. Formation of the trihalide ion Cl_3^- in the gas phase. «J. Amer. Chem. Soc.», 1979, 101, № 3, 764—765 (англ.).

Методом масс-спектропии изучены ион-молек. р-ции в сульфурилхлориде в присутствии хлористого водорода. Для расчетов использованы лит. значения теплот образования SO_2Cl_2 , SO_2 , HCl , $COCl_2$, CO , Cl_3 , а также анионов Cl^- , Cl_2^- и HCl_2^- . Установлены нижний и верхний пределы теплот образования иона Cl_3^- (по р-ции $Cl^- + SO_2Cl_2 \rightarrow Cl_3^- + SO_2$), составляющие $-72,7$ и $-82,8$ ккал/моль соотв. Кроме того, рассчитаны верхний ($-143,6$ ккал/моль) и нижний ($-153,7$ ккал/моль) пределы теплот образования иона SO_2Cl^- (по р-ции $Cl^- + SO_2Cl_2 \rightarrow SO_2Cl^- + Cl_2$), а также верхние пределы теплот образования анионов $SO_2Cl_3^-$ и $S_2O_4Cl^-$ в р-ции ионов SO_2Cl^- с SO_2Cl_2 , составляющие $-156,4$ и $-228,4$ ккал/моль соотв. Установлено, что сродство к электрону молекулы $Cl_3 > 4,3$ эв.

В. Винц

(Ae^-)

① $SO_2 Cl_3^-$
(NH)

г. 1979, N15

Cl₃

ommuek 11830

1981.

De B.R., Samigrali A.

павловск.
реферат

сис. ное.

номер.
книжка

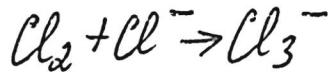
кв. лех.
расчет

Int. J. Quant. Chem.
1981, 19, 485-88.

● (сш. ClF₂; III)

Омонуск 13979

1982



ион-молекул.
реакция

Babcock L. M., Streit G.

J. Chem. Phys., 1982,
76, N 5, 2407-2411.



Cl₃

Omniuck 14849

1982

Castro E.A., Vasini E.,

перем
смыкык

Int. J. Quantum,

Chem., 1982, 22, N2,

● 433-434.

Cl₃

[Ummuck 14851]

1982

De B.R., Sannigrahi A.B.,

электрон.
структура,
равновес.
координаты

Int. J. Quantum. Chem,
1982, 22, N 2, 345-440.

Cl_3^-

1983

10 Д253. Динамика реакций ассоциации и распада. Модельное исследование реакции $\text{Cl}^- + \text{Cl}_2 \rightleftharpoons \text{Cl}_3^-$ методом квазиклассических траекторий. Dynamics of association and decay. A model study of $\text{Cl}^- + \text{Cl}_2 \rightleftharpoons \text{Cl}_3^-$ using quasiclassical trajectories. Babcock Lucia M., Thompson Donald L. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2394—2401 (англ.)

Методом квазиклассич. траекторий исследована динамика реакций ассоциации и распада $\text{Cl}^- + \text{Cl}_2 \rightleftharpoons \text{Cl}_3^-$. Использовалась модельная поверхность потенц. энергии,

Do;

ср. 1983, 18, N 10

составленная из парных потенциалов, причем морзевская ф-ция фрагмента Cl_2^- выбиралась так, чтобы получалось значение 1,06 эВ для энергии диссоциации Cl_3^- на $\text{Cl}^- + \text{Cl}_2$. Рассчитаны полные сечения образования комплексов Cl_3^- и зависимость их от времени жизни Cl_3^- , а также константы скорости диссоциации Cl_3^- . Обнаружена экспоненц. зависимость сечений комплексообразования от времени жизни комплексов и энергии относит. движения. Усреднением по скоростям получены константы скорости, которые оказались меньшими ланжевеновского значения. Константа скорости

распада определялась как наклон $\ln \frac{N(t)}{N_0}$ (где $N(t)$ — число траекторий с временем жизни t , N_0 — полное число траекторий) в зависимости от времени жизни. Исследована зависимость констант скорости распада от относит. энергии и прицельного параметра. Найдено, что распределение по временам распада является случайным.

А. А. Зембеков

Al_3^+

from 21862

1983

Bhattacharjee S., Sannigrahi A. B., et al.,

Равновесн.
геометрия
основного
состояния,
структура

Indian J. Chem., 1983,
A22, N 12, 1001-1006.

Cl_3^-

[Om. 2862]

1983

Равновесн.
геометрия
основного
состояния,
структура

Bhattacharjee S., Sannigrahi A. B., et al.,

Indian J. Chem., 1983,
A 22, N 12, 1001-1006.

Cl₃

(DM-21862)

1983

Bhattacharjee S., Sannigrahi A. B., et al.,

Indian J. Chem., 1983,
A22, N12, 1001-1006.

Равновесн.
геометрия
основного
состояния,
структура.

Cl_3^+

am. 17790 1983

3 Л231. Спектры комбинационного рассеяния Cl_3^+ и Br_3^+ при температуре 12 К, образованные при реакции HCl или HBr с NO_2 . Raman spectra of Cl_3^+ and Br_3^+ at 12 K produced from the reaction of HCl or HBr with NO_2 . Chen L.-H., Nour E. M., Laane J. «J. Raman Spectrosc.», 1983, 14, № 4, 232—235 (англ.)

Получены спектры комб. рас. ($100\text{--}2000\text{ см}^{-1}$) ионов Cl_3^+ (I) и Br_3^+ (II), образованных в ходе реакции молекул HCl и HBr с NO_2 , осажденных из газовой фазы на твердую подложку при т-ре 12 К, и возбуждении рассеяния лазерными линиями 457,9; 488,0 и 514,5 нм. Установлено, что реакция между HCl и NO_2 приводит к образованию I и 8-и других соединений, тогда как ионы II являются единственным продуктом реакции молекул HBr и NO_2 при низкой т-ре. Идентифицированы частоты фундаментальных колебаний и обертонов I и II. В рамках модели гармонич. осциллятора проведен расчет силовых постоянных связей I и II. Показано, что прочность связей в I и II меньше прочности связей в 2-х атомных молекулах Cl_2 и Br_2 соответственно. Предположено, что дублетная структура ряда

спектр КР.

④ X

ср. 1984, 18, №3

линий комб. рас. I и II обусловлена влиянием кристал-
лич. поля в твердых пленках, содержащих эти ионы.
И. В. А.



Cl_3^+

Om. 17790

1983

99: 184221w Raman spectra of triatomic chlorine(1+) and triatomic bromine(1+) at 12 K produced from the reaction of hydrogen chloride or hydrogen bromide with nitrogen dioxide. Chen, L. H.; Nour, E. M.; Laane, J. (Dep. Chem., Texas A and M Univ., College Station, TX 77843 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1983, 14(4), 232-5 (Eng). The products of the reactions of HCl or HBr with NO_2 at 12 K were examd. by Raman spectroscopy. For the $\text{NO}_2 + \text{HCl}$ reaction, spectroscopic evidence for Cl_3^+ , *asym*- N_2O_2 , N_2O_3 , N_2O_4 , ClNO_2 , ClNO_3 , NO_3^- , NO_2^- , and *sym*- N_2O_2 was found. For the reaction with HBr, only Br_3^+ was detected due to resonance Raman enhancement effects. These results are consistent with the previously proposed gas-phase reaction scheme for $\text{HCl} + \text{NO}_2$. However, the reaction proceeds further at low temp. to produce Cl_3^+ (or Br_3^+). The Raman frequencies for Cl_3^+ were obsd. at 515(ν_3), 462(ν_1), and 236 cm^{-1} (ν_2). The Br_3^+ resonance Raman spectra, which represent the 1st well documented spectra for this species, show strong fundamental bands at 281(ν_1) and 227 and 238 cm^{-1} (doublet for ν_2) as well as an overtone doublet at 471 and 487 cm^{-1} .

(CKP, Vi)

④

Br_3^+

C.A. 1983, 99, N 22

Cl₃

1983

Koshi M., Ito H.,
Matsui H.

потемн.
поверхн.,
теор.
расчёты

Chem. Phys. Lett.
1983, 103 (3), 180-6.

( сел. F₃ ; III)

$\text{Cl}_3^{\pm}$

1984

Bhattacharjee S.,
Sannigrahi A. B.

meop.
pacrim Indian J. Chem., Sect. A
1984, 23A (4), 285-91.

● (cer. $\text{F}_3^{\pm}$; III)

Cl_3^-

1984

Bowmaker Graham A.,
Boyd Peter D.W., et al.

meopem. J. Chem. Soc., Faraday
proc. Trans. 2 1984, 80(9),
1125-43.

● (see Y_3^- ; III)

Cl_3^-

[DM-20617]

1984

ядерно-
кваруполь-
ное
взаимо-
действие,
теорет.
расчет.

Bowmaker G.A., Boyd D.W.,
et al.,
J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 2, 1984, 80,
1125-1143.

$\text{Cl} + \text{Cl}_2$

ОМ 19667

1984

24 Б1095. Топография поверхностей потенциальной энергии. Поверхность для $\text{Cl} + \text{Cl}_2$, вычисленная методом ДФМ (двухатомных фрагментов в молекулах). Topography of potential-energy surfaces. DIM (Diatomics-in-molecules) Surface for $\text{Cl} + \text{Cl}_2$. Duggan John J., Grice Roger. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1984, PT 2, 80, № 7, 809—816 (англ.)

Методом двухатомных фрагментов в молекулах (ДФМ) рассчитаны Пв потенциальной энергии состояний $^2A'$ и $^2A''$ для системы $\text{Cl} + \text{Cl}_2$. Использован такой же набор многоатомных базисных функций, как и для $\text{F} + \text{F}_2$ (см. пред. реферат). Так же, как и для фтора, найдено, что седловой точке поверхности низшего состояния симметрии $^2A'$ отвечает нелинейная конфигурация ядер (с углом отклонения от линейности около 35°), а состояния $^2A''$ — линейная конфигурация (с симметрией волновой функции $^2\Pi_u$). Высота потенциального барьера для состояния $^2A'$ равна 28 кДж/моль, для состояния $^2A''$ — 75 кДж/моль. Результаты приближения ДФМ согласуются с предсказаниями по правилам Уолша.

А. В. Немухин

расчет
структур,
Цо

X, 1984, 19, № 24

$\text{Cl} + \text{Cl}_2$

Ом. 19667 1984

12 Д267. Топография поверхностей потенциальной энергии. МДФ поверхности для $\text{Cl} + \text{Cl}_2$. Topography of potential-energy surfaces. DIM (diatomics-in-molecules) Surface for $\text{Cl} + \text{Cl}_2$. Duggan John J., Grice Roger. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1984, PT2, 80, № 7, 809—816 (англ.)

Методом двухатомных фрагментов (МДФ) рассчитаны потенциальные поверхности системы $\text{Cl} + \text{Cl}_2$. Методика расчета описана в предыдущей публикации (см. реф. 12Д266). Потенциальная поверхность $^2\text{A}'$ имеет барьер 28 кДж/моль при симметричной конфигурации ядер. Аналогичный вид имеет поверхность состояния $^2\text{A}''$, но с большим значением барьера (75 кДж/моль). Рассчитаны также энергии активации и геометрия переходных состояний $\text{Cl} + \text{Cl}_2$. Полученные результаты сравнены с данными расчетов для системы $\text{F} + \text{F}_2$. А. И. Дементьев

геометр.,
структура,
Но, потенциал.
поверхн.

Ф. 1984, 18, N 12.

$Cl_3^{\pm}$

1984

Shattacharjee S.
Sannigrani A.B.

геоцентризм,
структура

Indian J. Chem., 1984,
23, N4, 285-291.

● (cer. $F^{\pm}$; III)

Cl₃

1986

105: 140034a Ab initio SCF and CI study of the electronic structure of the trichlorine radical. Sannigrahi, A. B.; Peyerimhoff, Sigrid D. (Dep. Chem., Indian Inst. Technol., Kharagpur, 721302 India). *Int. J. Quantum Chem.* 1986, 30(3), 413-20 (Eng). Ab-initio SCF and CI calcns., with a double-zeta plus polarization basis set, were done on Cl₃ to det. its electronic structure. The min. energy was detd. for a bent structure with a bond angle of 146° and bond lengths of 2.18 Å (SCF) or 2.22 Å (CI). For the linear geometry, a $^2\Pi_u$ state was the lowest, approx. 7 kcal above the bent min., followed by a $^2\Sigma_g^+$ state, which was around 4 kcal higher. This suggested that, for low quantum nos., a complex vibrational pattern in the Cl₃ IR spectrum is to be expected due to spin-orbit coupling, and coupling of the electronic, vibrational, and rotational motions.

ab initio
расчет, компьютер
исследование, D

C. A. 1986, 105, N 16

Cl_3^-

(Om. 28171)

1987

№10 Б1034. Неэмпирическое исследование методом КВ электронной структуры и спектров трихлорид-иона. An ab initio CJ study of the electronic structure and spectrum of the trichloride ion. Sannigrahi A. B., Peyerimhoff S. D. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 141, № 1—2, 49—52 (англ.)

Методом КВ с учетом одно и двукратных возбуждений относительно нескольких исходных конфигураций рассчитана равновесная геометрия основного состояния иона Cl_3^- , а также вертикальные энергии возбуждения, силы осцилляторов и времена жизни возбужденных состояний. Использован базис (2s8p/6s4p), дополненный поляризац. d-ф-циями и диффузными p-ф-циями. В базис также включены p-ф-ции, центрированные на середине каждой связи Cl—Cl. Рассмотрена только центросимм. конформация иона. Равновесное значение длины связи Cl—Cl найдено равным 2,34 А. Н. В. Харчевникова

М.Н.

Х. 1988, 19, №10

Cl_3^-

(Om. 28 171)

1987

Б.Д.103. Неэмпирическое КВ изучение электронной структуры и спектра иона трихлорида. An ab initio CI study of the electronic structure and spectrum of the trichloride ion. Sannigrahi A. B., Peyerimhoff S. D. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 141, № 1—2, 49—52 (англ.)

(ϵ_i)

ф. 1988, 18, N 6

Cl_3^-

(DM-28171)

1987

ab initio
pacem, 2e,
 $X^1\Sigma_g$, 2, 5, 11, 11

108:45960c An ab initio CI study of the electronic structure and spectrum of the trichloride ion. Sannigrahi, A. B.; Peyerimhoff, S. D. (Dep. Chem., Indian Inst. Technol., Khagapur, 721302 India). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 141(1-2), 49-52 (Eng). The equil. geometry of the ground state ($X^1\Sigma_g$), vertical excitation energies, and assocd. oscillator strengths or lifetimes were calcd. for Cl_3^- by the ab initio MRD CI method using a double-zeta plus polarization basis set. The calcd. transition energies agree with expt.

C.A. 1988, 108, N 6

Cl_3^-

(DM. 30931)

1988

Burdett J. K., Marsden C. F.,

ab initio
pacem

New. J. Chem. 1988, 12,
N 10, 797-809.

Cl_3^+

(om. 30931)

1988

Burdett J. K., Marsden C. J.,

ab initio
pacem

New. J. Chem. 1988, 12,
N10, 797-809.

α_3^+

(30535)

1988

Краснов К. С.,
Филиппенко М. В.,

и.и.
(обзор)

ОНИИТЭХИМ.
Деп. N 378-хл-86,
Черкассы, 1988.

Cl_3^-

(DM-31022)

1988

Novoa J. J., Mota F., et al.,

Структура
и
стабильность.

J. Phys. Chem. 1988, 92,
N 23, 6561-6566.

Structure and stability
of the X_3^- Systems ($\text{X} = \text{F},$
 $\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) and Their Interaction

With Cations.

Cl_3^-

1989

Ае, γ,
некомпон.
соедин.

112: 1051-43p The electronic structures of the XYZ- trihalide anions: X, Y, Z = chlorine, bromine, iodine. Gutsev, G. L. (Inst. Khim. Fiz., USSR). Zh. Strukt. Khim. 1989, 30(5), 41-7 (Russ). The electronic structures of the Cl_3^- , Br_3^- , I_3^- , $BrCl_2^-$, BrI_2^- , $BrICl^-$, and $BrII^-$ ions were calcd. by the X α -discrete variation method. The electron affinity (EA) of the trihalogens is close to the vertical EA and to the first ionization potential (IP) of their mononeg. ions. The IP's are similar, 3.3-3.8 eV.

(46) 

с. А. 1990, 112, N 12

Al_3^-

1989

5 Б1082. Электронная структура анионов тригалогенидов XYZ^- ; X, Y, Z = Cl, Br, I / Гуцев Г. Л. // Ж. структур. химии.— 1989.— 30, № 5.— С. 41—47.— Рус.

Электронная структура анионов Cl_3^- , Br_3^- , I_3^- , $BrCl_2^-$, BrI_2^- , $BrICl^-$ и $BrII^-$ рассчитана дискретно-вариационным X_α -методом. Согласно расчетам, адиабатич. сродство к электрону (СЭ) молекул тригалогенидов близко к вертикальному СЭ и первому вертикальному Потенциалу ионизации (ПИ) соотв. однозарядных анионов. Рассчитанные первые ПИ всех анионов довольно близки по величине и составляют 3,3—3,8 эВ. На этом основании тригалогениды отнесены к классу «слабых» супергалогенов. Библ. 33.

Резюме

электронная
структура

+6

XI

X. 1990, N5

Cl_3^+

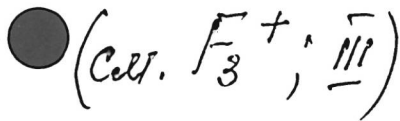
DM 34371

1990

Li Yi, Wang Xuebao,
et al.

расчет
структур
энергии
состояний

J. Am. Chem. Soc. 1990,
112 (10), 3922-6.



Cl₃-

(DM 36436)

1991

Gutsev G. L., Ziegler T.

Can. J. Chem. 1991, 69,

mpyrr

993-999.

The structure of the CCl_n
($n=1-4$) anions and electronic
affinities of ● the correspon-

ding neutrals.

Cl_3^+

1992

14 Б1268. Катион-радикалы в смесях Cl_3P и Me_2S . Исследование методами ЭПР и квантовой химии. Radical cations in mixtures of Cl_3P and Me_2S . A combined ESR and quantum chemical study / Aagaard Olav M., de Waal Bas F. M., Cabolet Marcoen J. T. F., Janssen René A. J. // J. Phys. Chem.— 1992.— 96, № 2.— С. 614—623.— Англ.

Методом ЭПР зарегистрированы и идентифицированы радикалы, возникающие в ходе рентгеновского облучения при 77 К р-ров Cl_3P и Me_2S в CFCl_3 , CF_3CCl_3 , $\text{CF}_2\text{CCFCl}_2$ и CH_2Cl_2 . В случае разбавленных р-ров обнаружено образование исключительно катион-радикалов $\text{Cl}_3^{\cdot+}$ и $\text{Me}_2\text{S}^{\cdot+}$. Показано, что в случае $\text{Me}_2\text{S}^{\cdot+}$ в CFCl_3 имеет место суперсверхтонкое вз-вие с ядрами хлора и фтора молекул матрицы. Установлено, что при увеличении конц-ии (или т-ры) катион-радикалы легко реагируют с молекулами р-ренных Cl_3P или Me_2S с

М.А.

ⓧ (41)

Х. 1992, N 14

$(\text{CH}_3)_2\text{S}$

образованием катион-радикалов $\text{Cl}_3\text{P}\cdot-\text{PCl}_3^+$, $\text{Me}_2\text{S}\cdot-\text{SMe}_2^+$ и $\text{Cl}_3\text{P}\cdot-\text{SMe}_2^+$ с двухцентровой трехэлектронной связью $\sigma^2\sigma^{*1}$, а в конц. замороженных р-рах образуется тример $\text{Cl}_3\text{P}(\text{SMe}_2)_2\cdot^+$, имеющий октаэдрич. конфигурацию с очень сильным сверхтонким вз-вием с ядром ^{31}P . Проведены обширные неэмпирич. расчеты (ХФ/3-21ГФ*), и их результаты подтвердили выполненное отнесение спектров, а также дали новые сведения о молек. геометрии, электронной конфигурации и стабильности катион-радикалов. В. М. Промыслов



Cl₃

(M-36910)

1992

Gutsev G. L.

Zh. Fiz. Khim. 1992,

66 (11), 2998-3005.

Do, Ae,
cūpykm,
mop.
pacim

● (сер. F₃; III)

№3-

ОМ - 36910

1992

электрон.
и
геометр.
структура,
до, теор.
расчет

Зуев П.Л.,

М. физ. химии, 1992,
66, N 11, 2998 - 3005

ЛЗ

ОМ. 36 910

1992

Гусев П.А.,

экстрон.
и
геометр.
структура,
Аз, До
мюр. расет

Дл. Физ. химии, 1992, 6.6,
N 11, 2998 - 3005

123

1992

116: 183589e Ab initio calculations on the ground and low-lying electronic states of the chlorine trimer radical: emission from the chlorine trimer. Wright, Timothy G.; Bell, Andrew J.; Frey, Jeremy G. (Dep. Chem., Southampton Univ., Southampton, UK SO9 5NH). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 189(4-5), 297-302 (Eng). Broad band, low level emission is obsd. in the region 370-420 nm following the photolysis of Cl_2 in a flow system at a pressure of 400 torr in the presence of nitrogen buffer gas. It is suggested that the decay of an excited electronic state of the Cl_3 radical is responsible for this emission. To support this claim a series of ab initio calcns. on the Cl_3 radical were performed with 6-31G and 6-31 G* basis sets at the SCF and CI levels. The calcd. C_{2v} ground state agrees with previous calcns. but a lower min. with an asym. structure, probably a van der Waals state, was also found. Ab initio SCF calcns. on the ground state of Cl_3^- were also performed.

ab initio

param ocrn.

u klzncnals

meknyn. cocrn

cmrnpa

C.A. 1992, 116, N 18



(ab initio

param ocrn.
cocrn.)

$\text{Cl}_3, \text{Cl}_3^-$

1993

Wright T. G., Lee E. P. F.

Mol. Phys. 1993, 79

(5), 995-1009.

ab initio
расчет

структурн.
свойств.

● (см. F_3, F_3^- ; III)

Al_3^+

[om. 38285]

1996

электрон.
структура,
геометр.
сущ. пост.,
колебам.
частоты

Jun Li, Stephan Irle et al.,

Inorg. Chem., 1996, 35, N1,
100 - 109.

Electronic Structure
and Properties ● of Trihalogen

Cations X_3^+ and XY_2^+ ($X, Y =$
 $= F, Cl, Br, I$)

Cl₃

1996

спектры
электрон
поглощения
и испуск.

7 11Б4371. Фотолиз изолированных в матрице комплексов $\text{HCl}-\text{Cl}_2$: спектры электронного поглощения и испускания, условно приписанные к Cl_3 . Photolysis of matrix-isolated $\text{HCl}-\text{Cl}_2$ complexes: Electronic absorption and emission spectra provisionally assigned to Cl_3 / Lawrence W. G., Fulgum R. M., Heaven M. C. // J. Phys. Chem.— 1996.— 100, № 48.— С. 18702—18707.— Англ. Место хранения ГПНТБ

Х. 1997, N 11

Cl_3^+

7.39696

1998

структура,
стабильность,
спектр

130: 100962m Gaseous Cl_3^+ and Cl_2F^+ cations. A joint mass (spectrometric and theoretical study. Cacace, Fulvio; de Petris, Giulia; Pepi, Federico; Rosi, Marzio; Sgamellotti, Antonio (Dipartimento di Studi di Chimica e Tecnologia delle Sostanze Biologicamente Attive dell'Universita "La Sapienza", 00185 Rome, Italy). *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 1998, 12(23), 1911-1913 (Eng), John Wiley & Sons Ltd.. The Cl_3^+ cation was obtained by chlorine chem. ionization (Cl_2/Cl) via the exothermic reaction of Cl^+ transfer from Cl_2^+ to chlorine or by the endothermic reaction of Cl_2^+ with chlorine, whereas Cl_2F^+ was obtained from the reaction of XeF^+ with chlorine. Both cations were structurally and energetically characterized by Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry and theor. calcs. at the B3LYP/6-311++G(3df,3pd)//CCSD(T)/cc-pVQZ levels of theory.

(11)

Cl_2F^+

C. A. 1999, 130, N 8

Cl₃

05.39227

1998

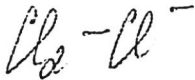
128:249072n Ab initio molecular-orbital study of the trichlorine radical, Cl₃. Kaledin, A. L.; Heaven, M. C.; Lawrence, W. G.; Cui, Q.; Stevens, J. E.; Morokuma, K. (Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation and Department of Chemistry, Emory University, Atlanta, GA 30322 USA). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(7), 2771-2783 (Eng), American Institute of Physics. We report a rigorous ab initio study of the ground and low-lying excited-state potential-energy surfaces (PESs) of the Cl₃ radical at CASSCF, CASPT2, and MRSDCI levels of theory. The ground state has two Cl...Cl₂ van der Waals complexes, $\bar{X}L$

ab initio
packet

and $\bar{X}B$. The linear asym. min. ($\bar{X}L$) is $^2\Pi$, with a Cl-Cl distance $r=3.90$ bohr, and a Cl-M (M: the Cl₂ center-of-mass) distance $R=8.70$ bohr. The bent asym. min. ($\bar{X}B$) is of $^2A'$ symmetry, with $r=3.90$ bohr, $R=6.85$ bohr, and the angle between $\bar{r}$ and $\bar{R}$, $\gamma=68.4^\circ$. Spin-orbit CI predicts that the global min. is linear- $\bar{X}L$ ($^2\Pi_{3/2}$) with a bond dissociation energy of $D_0(Cl_2(X)-Cl)$ of 280 cm^{-1} . Low-lying doublet excited states have only one strongly bound structure, a linear sym. $\bar{A}L$ ($1^2\Pi_g$) state with a bond distance of 4.67 bohr. This state is bound by -4300 cm^{-1} with respect to the $Cl_2(^2\Pi_u)+Cl$ asymptote, and its min. lies about 8700 cm^{-1} above the $\bar{X}L$ van der Waals min. Transition dipole moment calcns. show that the $\bar{A}-\bar{X}$ transition is fully allowed. Two bound quartet min. were located. The most deeply bound was $QD3h$ ($1^4A_1'$) with a D_{3h} equil. geometry ($r=5.00$ bohr) about $11,300\text{ cm}^{-1}$ above $\bar{X}L$. The other state, $QC2v$ (1^4A_2) had a C_{2v} equil. geometry ($r_1=4.83$ bohr and $\theta=101.7^\circ$) and an energy of about $13,500\text{ cm}^{-1}$ relative to $\bar{X}L$. Although $Cl_3(X)$ is shown to be unstable, the present results support the notion that Cl₃ participates in Cl atom recombination processes. However, the energies and transition moments of the low-lying excited states are not consistent with electronic spectra that have been tentatively assigned to Cl₃.

CA 1998,
128, N20

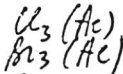
1998



(Do)



(74)

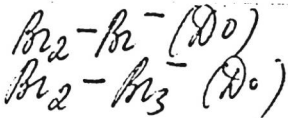


C.A.

1998,

129,

~ 21



129: 281846z Gas-Phase Thermochemistry of Polyhalide Anions. Nizzi, Katrina Emilia; Pommerening, Cynthia Ann; Sunderlin, Lee S. (Department of Chemistry, Northern Illinois University, DeKalb, IL 60115 USA). *J. Phys. Chem. A* 1998, 102(39), 7674-7679 (Eng), American Chemical Society. A flowing afterglow-tandem mass spectrometer has been used to det. 0 K bond strengths in three hypervalent polyhalide ions: $D(\text{Cl}_2-\text{Cl}^-) = 99 \pm 5 \text{ kJ/mol}$, $D(\text{Br}_2-\text{Br}^-) = 127 \pm 7 \text{ kJ/mol}$, and $D(\text{Br}_2-\text{Br}_3^-) = 40 \pm 7 \text{ kJ/mol}$. These bond strengths are close to the previously measured values $D(\text{I}_2-\text{I}^-) = 126 \pm 6 \text{ kJ/mol}$ and $D(\text{I}_2-\text{I}_3^-) = 49 \pm 6 \text{ kJ/mol}$. In contrast, Cl_5^- and F_3^- are not formed at room temp. in the flowing afterglow. Solvation energies for the trihalides derived from this work and literature thermochem. are inversely correlated with the size of the ion, in reasonable agreement with the predictions of the Born model. The electron affinities $\text{EA}(\text{Cl}_3) = 4.60 \pm 0.09 \text{ eV}$ and $\text{EA}(\text{Br}_3) = 4.55 \pm 0.10 \text{ eV}$ can also be derived. The gas-phase bond strengths are more consistent with the three center-four electron bond model than with the expanded octet model.

Cl_3^-

1998

Ogawa, Yasushi, et al.,

стр-ра
и стабильн-
расчм

THEOCHEM 1998, 424(3),
285-292.

(cell: F_3^- ;



III)

F: Cl3-

P: 3

131:108517 Cl3- electron photodetachment spectrum: measurement and assignment. Kaledin, Alexey L.; Heaven, Michael C.; Morokuma, Keiji; Neumark, Daniel M. (Cherry L. Emerson Center for Scientific Computing and Department of Chemistry, Emory University, Atlanta, GA 30322, USA). Chem Phys. Lett., 306(1,2), 48-52 (English) 1999 An electron photodetachment spectrum of Cl3- is reported for 193 nm (6.42 eV) excitation. The spectrum was assigned using high-level ab initio calcn. for the Cl3 radical and the Cl3- ion. A broad band centered around 1.25 eV (electron kinetic energy) was assigned to the Cl3-(X 1.SIGMA.g+) Cl3(X 2.PI.u) and Cl3(1 2.SIGMA.g+) transitions. Vertical photodetachment accesses the transition state region for the Cl exchange reaction: Cl+Cl2 Cl2+Cl. A narrow doublet band at 0.55 eV is assigned to the Cl3-(X 1.SIGMA.g+) Cl3(1 2.PI.g) transition, split by spin-orbit interaction. mo chlorine ion electron photodetachment

C.A. 1999, 131

1999

F: Cl3-

P: 3

131:108517 Cl3- electron photodetachment
spectrum: measurement and assignment. Kaledin,

Alexey L.; Heaven, Michael C.; Morokuma, Keiji; Neumark, Daniel M. (Cherry L. Emerson Center for Scientific Computing and Department of Chemistry, Emory University, Atlanta, GA 30322, USA). Chem Phys. Lett., 306(1,2), 48-52 (English) 1999 An electron photodetachment spectrum of Cl3- is reported for 193 nm (6.42 eV) excitation. The spectrum was assigned using high-level ab init calcn. for the Cl3 radical and the Cl3- ion. A broad band centered around 1.25 eV (electron kinetic energy) was assigned to the Cl3-(X 1.SIGMA.g+) Cl3(X 2.PI.u) and Cl3(1 2.SIGMA.g+) transitions. Vertical photodetachment accesses the transition state region for the Cl exchange reaction: Cl+Cl2 Cl2+Cl. A narrow doublet band at 0.55 eV is assigned to the Cl3-(X 1.SIGMA.g+) Cl3(1 2.PI.g) transition, split by spin-orbit interaction.

C.A. 1999, 131

1999