1975

расчет ν_i, ω_i (MgH_2, AlH, AlH_3, SiH_4, PH_3, H_2S, HCl, Ar) IX-5060

Ahlrichs R., Keil F., Lischka H., Kutzelnigg W., Staemmler V.,

J. Chem. Phys, 1975, 63, №1, 455-463 (англ.)

PNO-CI and CEPA-PNO calculations of molecular systems. III. The molecules MgH_2, AlH_3, SiH_4, PH_3, H_2S, HCl, and the Ar atom.

Рис Хим, 1976, 1D37 10 15

60113.5

Ph, Ch, TC

96201

HCl (м.н)

1975

5-11143

Bonifacic V., Huzinaga S. Model potential calculations for HF and HCl. "Chem. Phys. Lett.", 1975, 36, N 5, 573-575 (англ.)

(см. HF; III)

0539 пик

509 510

ВИНИТИ

HCl (кв. мех. расчет) 1975

Bonifacic V.
Huzinaga S.
Chem. Phys. Lett., 1975,
36, (5) 573-5

C.A. 1976. 84 N12 80009g (из стр)

HCl

1975

11 Д334. Электронное возбуждение молекул HCl, изолированных в матрицах инертных газов. Boursey Etienne. Electronic excitation of HCl trapped in inert matrices. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 8, 3353—3354 (англ.)

спектр поглощ.

С целью наблюдений ридберговских состояний изучен спектр поглощения молекул HCl, изолированных в матрицах Ar, Ne, и CF_4 при 5° К. В области 1200—1300 Å в газовой фазе обнаружены полосы переходов из состояний $b^3\Pi_i$ и $C^1\Pi$ в основное, ридберговская природа полос подтверждена их колебательной структурой. В матрицах в этой же области обнаружены полосы поглощения, отнесенные на основании анализа колебательной структуры к переходу $C^1\Pi—X^1\Sigma^+$. Величина и знак сдвига полос в матрицах Ar и Ne не противоречат наблюдавшимся ранее для ридберговских состояний многоатомных молекул. Обсуждены причины необычного вида спектра HCl в матрицах. Библ. 15. В. А.

ф. 1975 №11

HCl

1975

(M. n.)

18217z Electronic excitation of hydrogen chloride trapped in inert matrixes. Boursey, Etienne (Lab. Interact. Mol. Hautes Pressions, CNRS, Meudon, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1975, 62(8), 3353-4 (Eng). The vacuum uv absorption spectra (1100-1300 Å) of HCl trapped in Ne, Ar, and CF_4 matrixes at 5°K indicate that charge transfer is important in HCl due to the presence of the H atom and demonstrate that Rydberg states can also be obsd. in solid-state diat. mols. The obsd. bands were assigned to the $C\Pi \leftarrow X\Sigma$ transition on the basis of measured vibrational spacings and relative intensities.

C.A. 1975. 83 N2

HCl

1975

(di)

21 Б180. Электронное возбуждение HCl в матрицах инертных газов. Boursey Etienne. Electronic excitation of HCl trapped in inert matrices. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, №8, 3353—3354 (англ.)

Получены спектры поглощения HCl в матрицах Ne, Ar, и CF_4 при $T=5°K$ в интервале 1300—1200 A. Наблюдаемые полосы сильно уширены, структура разрешается только в Ar-матрице. Отнесение проведено на основе этого спектра, а также на основании анализа контуров и интенсивностей полос. Диаметр молекулы HCl в основном состоянии меньше размеров элементарной ячейки решетки матриц, поэтому неясным является наблюдаемый сильный высокочастотный сдвиг относительно положения в газе полосы, обусловленной переходом $C\Pi \rightarrow X\Sigma$ HCl в CF_4. Направление и величина сдвига в Ne и Ar согласуются с имеющимися в лит-ре. Подтверждено предположение, что переходы серии Ридберга могут наблюдаться и в тв. фазе.

Б. Г. Антипов

ж 1975 №21

50324.9091 | 96201 | 1975
Ph, Ch, TC | HCl | #4-8333

Clark David T., Muller Jiri.
A non-empirical LCAO MO SCF investigations of electronic relaxations accompanying core ionizations in the series X_2 and HX (X=F, Cl and Br). "Chem. Phys. Lett.", 1975, 30, N 3, 394-397 (англ.) 0324 пик

307 307 0316 ВИНИТИ

51203.8365
TC, Ph, Ch, MGU

40392

HCl (2)

1975

4-10435

Cherlow J.M., Hyatt H.A., Porto S.P.S.

Raman scattering in hydrogen halide gases.
"J.Chem.Phys.", 1975, 63, N 9, 3996-4000

(англ.)

0500 тыс

480 486

ВИНИТИ

HCl

HBr

HJ

спектры комб. рассеян. J;

(+2) [X]

Ф 1976 N 4

4 Д394. Комбинационное рассеяние в газообразных галоидоводородах. Cherlow J. M., Hyatt H. A., Porto S. P. S. Raman scattering in hydrogen halide gases. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 9, 3996—4000 (англ.)

1975

Получены спектры комб. рас. газообразных HCl, HBr, HJ, возбужденные лазером Ar^+ 488 нм, в области основных колебательных переходов. В случае HJ изучена зависимость интенсивности от длины волны возбуждающей линии в интервале 457,9—514,7 нм. Определены сечения рассеяния для Q-ветвей изученных переходов по отношению к сечению рассеяния Q-ветви азота. В изменениях сечения рассеяния HJ не было замечено отклонений от закона пропорциональности ν^4, что указывает на отсутствие резонансных эффектов. На основании этого факта предполагается, что виртуальное состояние, ответственное за спектр комб. рас. галоидоводородов, имеет энергию, близкую к энергии 1-го ионизационного потенциала, а сечение рассеяния может быть рассчитано по теории поляризуемости. Вычисленные по спектрам величины производных поляризуемостей по длинам связей согласуются с рассчитанными теоретически только по порядку величины, что связано с грубостью использованных теоретич. моделей. Библ. 22.

М. В. Тонков

Ж-5 - 10435

1975

HCl

CH_3Cl

nonferr. cerium

152561k Electron cyclotron resonance technique. X. Interactions of thermal-energy electrons with molecules of chlorine, hydrogen chloride, and methyl chloride. Christodoulides, A. A.; Schumacher, R.; Schindler, R. N. (Inst. Chem. III, Kernforschungsanlage Juelich G.m.b.H., Juelich, Ger.). *J. Phys. Chem.* 1975, 79(18), 1904–11 (Eng). Rates of electron disappearance in the presence of the mols. Cl_2, HCl, and CH_3Cl were measured at room temp. For Cl_2 and HCl these measurements were extended to 240° and the activation energies for the electron loss process are examd. The obsd. concn. dependence of the rate of electron loss for these mols. is discussed. Total scattering cross sections for HCl and CH_3Cl have been detd. from changes in line width and line shape of the electron cyclotron resonance signals.

(+1) ⊠

C.A. 1975, 83 n18

51216.6671 Ch,Ph,TC,MGU	96601 HCl фотоэл. спектр *	1975 Ц-10887

Chong D.P., Herring F.G., McWilliams D. Calculation of the vibrational structure in molecular photoelectron spectra. "J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.", 1975, 7, N 6, 429-443 (см. HF; III)

(англ.) 0524 ГИК

487 491 516 ВИНИТИ

X8871

1975

HCl и др. (расчет гом. структ., 8i)

Dixon R.N., Hugo J.M.V.

Mol. Phys., 1975, 29, N3, 953-970 (англ)

10 (4)

HCl (обзор) 1975

Ewing R. E.

Accounts. Chem. Res.,

1975, 8 N6, 185-92

Структура и свойства

ван-дер-ваальсовых молекул.

(см. N2, III)

50910.7503
Ch, Ex-C, TC

40534 (9)
HCl (Ain)

1975
4360

Foster Michael S., Beauchamp J.L. Proton affinity and gas-phase ion chemistry of hydrogen fluoride. "Inorg. Chem.", 1975, 14, N 6, 1229-1232 (англ.)

0441 пик

427 428 0435 ВИНИТИ

50611.1860
TC, Ch, Ph

HCl 40892

1975
* 4-9253

Fitz D.E., Marcus R.A. Semiclassical theory of spectral line shapes. II. Applications to CO, HCl, and OCS, broadened by inert gases.

"J. Chem. Phys.", 1975, 62, N 9, 3788-3796 (англ.)

0382 пик

352 355

0374

ВИНИТИ

оттиск 3372 1975

HCl

2 Д107. **Рассмотрение ридберговых состояний линейных молекул с $^2\Pi$ остовом методом объединенного атома.** Greening F. R. A united-atom treatment of the Rydberg states of linear moleculs with $^2\Pi$ cores. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 34, № 3, 581—584 (англ.)

Получены выражения для энергии ридберговских состояний линейной молекулы с конфигурацией остова $^2\Pi$. Для оценки параметров используется метод объединенного атома. В качестве примера рассмотрены некоторые состояния молекулы HCl. Э. Р. А.

Ридберг состоян

Ф 1976 N2

*4 8.811 1975

HCl

спектр

16 Б273. **Исследование ширины и сдвига вращательных линий основной колебательной полосы хлористого водорода в смеси с аргоном при различных температурах.** Houdeau Jean-Pierre, Larvor Maurice, Haeusler Claude. Étude à basse température des largeurs et des déplacements des raies rovibrationnelles de la bande fondamentale du gaz chlorhydrique comprimé par l'argon. «C. r. Acad. sci.», 1975, 280, № 7, B175—B177 (франц., рез. англ.)

На спектрометре типа «СИСАМ» с разрешением 0,02 см$^{-1}$ измерены ширины и частоты центров вращательных линий с $m \leqslant 6$ основной ИК-полосы молекулы HCl в смеси с аргоном при т-рах 298, 253, 208 и 163° К. Выполнен также расчет ширины и сдвига линий по методу Андерсона и для линий с $m > 2$ получено удовлетворительное согласие с экспериментом. М. Р. Алиев

X 1975 N16

HCl

1975

поздр.
поглощ

84: 67078j Absorption coefficient of hydrogen chloride in the region 1400 to 2200 Å. Inn, Edward C. Y. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, Calif.). *J. Atmos. Sci.* 1975, 32(12), 2375-7 (Eng). Absorption coeff. measurements of HCl in the region 1400-2200 Å are reported and a comparison with previously published values indicates that the present results represent the best compromise of all measurements and should be used for any calcns. on the photodissocn. rate of HCl in planetary atms.

C.A. 1976, 84 N 10

H-Cl OMM. 4824 1975

Kerr J. A., et al

Handbook Chem. Phys.,

(Do) 55th Ed., 1974-75.

HCl 1975

Kiefer J.H., et el.,
Chem Phys. Lett., 1975, 30,(3),
424-28.

О преимуществе колебат. энергии в диссоц. ХХат. мол.

(см. H_2; III)

Katô H. Nonadiabatic contribution to the dipole moment of HCl.
"Chem. Phys. Lett.", 1975, 36, N 2, 256-258

(англ.)

1975

HCl

(м. п.)
расчет

Meyer W. et al

J. Chem. Phys., 1975, 63,
N6, 2356 – 2375

Cm LiH; III

X. 1976 N3

51003.8722
Ch, Ph, TC, MGU

40892

HCl

1975

*4-10037

Menard-Bourcin F., Menard J., Henry L. Study of reactive and inelastic collisions by time resolved gain spectroscopy. I. Chemical vibrational excitation and vibrational relaxation of HCl occurring with the reaction of hydrogen with chlorine. "J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 4, 1479-1486 (англ.)

436 437 4 14

ВИНИТИ

1975

HCl

21 Б216. Колебательная релаксация HCl ($v=1$) атомами Cl. Macdonald R. G., Moore C. Bradley, Smith I. W. M., Wodarczyk Francis J. Vibrational relaxation of HCl ($v=1$) by Cl atoms. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 8, 2934—2938 (англ.)

Описаны два метода определения времени релаксации колебательно-возбужденных молекул при соударениях с атомами постороннего газа, основанные на явлении лазерной флуоресценции. Проведены оценки абс. ошибок измерений каждого из методов. Измерено время релаксации HCl ($v=1$) при соударениях с атомами Cl. Полученные результаты совпадают в пределах ошибки и дают значения $\tau=(2{,}8\pm0{,}9)\cdot10^5$ сек$^{-1}$ мм$^{-1}$, что согласуется с лит. данными. Сравнение результатов для смесей HCl—Cl и HCl—Ar показывает, что важную роль в релаксац. механизме играет межмолек. хим. взаимодействие, приводящее к возникновению систем HCl_2 и ClHCl. То, что время релаксации не зависит от давления в довольно большом интервале, объясняются бимолек. характером релаксации.

Б. Г. Антипов

измерение время релаксац

х 1975 № 21

HCl^+

1975

Maex R.

Interact. between Ions and Mol. New York-London, 1975, 563-77.

(образов. возб. ионов)

(см. N_2^+; III)

*U-8336 1975

HCC

Peirl Cristian

paper in "Nucl. Phys"
1975, 29 N2, 641-43

Paper general. discussion

51003.7632 Ch, Ph, TC	40892 HCl	1975 3368

Porter R.N., Raff L.M., Miller W.H.
Quasiclassical selection of initial coordinates and momenta for a rotating Morse oscillator. "J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 5, 2214-2218 (англ.)

0458 пик

445 446 ВИНИТИ

50812.7632 Ch, Ph, TC	31603 HCl (мин) *	1975 4-9699

Rossi I., Brodbeck C., Bouanich J.P., Nguyen-Van-Thanh. Etude théorique du déplacement de tréquence des molécules diatomiques en solution liquide. Application à la fréquence fondamentale des molécules HF, HCl, DCl, HBr, HI, CO et NO en solution CCl_4. "Spectrochim. acta", 1975, A31, N 4, 433-443

HCl +

оттиск № 2948 1975

Радцис А.А.

(м.п, Do, I, см. пёт)

В. сб. „Химия плазмы" 1975, вып 2, 3-61, М, Атомиздат.

НСЕ

оттиск А 2948 1975

Радин А.А.

(см. До Г, сим. пет)

В сб. „Химия природы" 1975, вып 2, 3-61, см. автореф.

50806.4571
TC, Ch, Ph

40892

HCl

1975
№ У-9528

Spence David, Noguchi Tetsushi.
Feshbach resonances associated with Rydberg states of the hydrogen halides.
"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 1, 505-514

(англ.) 0426 пик

(см. HF; III)

394 396 4 1 8

ВИНИТИ

1975

HCl

CO_2

время колеб. релакс.

Ф1975N6

6 Д418. Исследование процесса колебательной релаксации в смеси $HCl—CO_2$. Слободская П. В., Ритынь Е. Н. «Оптика и спектроскопия», 1975, 38, № 3, 526—533

Произведены измерения сдвигов фазы сигналов спектрофона при возбуждении хлористого водорода (уровень $v=1$) и углекислого газа (уровни 00^01 и 01^10). Измерены времена $V-T$, R собственной релаксации молекулы HCl и $V-T$, R релаксации молекулы CO_2 при бесконечном разбавлении хлористым водородом, а также суммарная вероятность $k_4+0{,}07\,k_c$, (обозначенная в тексте). Показано, что при некоторых условиях относит. разность фаз, соответствующих возбуждению 2 систем колебательных уровней, не зависит ни от каких других параметров, кроме отношения энергий уровней, через которые происходит переход $V—V$. Благодаря этому, несмотря на большую скорость обмена $V—V$, этот переход может быть зафиксирован и из большого числа уровней выделены те, через которые он преимущественно осуществляется. Резюме

(+1)

X

60226.4816 | 35223 | 1975
Ch, Ph, TC | HCl (до) | 3838

Schlegel H.Bernhard, Wolfe Saul, Bernardi Fernando. Ab initio computation of force constants. II. The estimation of dissociation energies from ab initio SCF calculations. "Can. J. Chem.", 1975, 53, N 23, 3599-3601 (англ., рез. франц.)

(см. Н2, III)

545 546 0559 ВИНИТИ

51118.1862
TC, Ch, Pn

HCl (см. ИГ) 40892

1975
4-10345

Schlegel H. Bernhard. Wolfe Saul, Bernardi Fernando. Ab initio computation of force constants. I. The second and third period hydrides.
"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 8, 3632-3638. (англ.)

(см. HF; III)

0489 ПМК

476 478 4 К Х

ВИНИТИ

HCl

Ж43 – 11224

1975

11 Б87. Интерпретация спектров возбуждения остовных электронов в молекулах гидридов и свойства радикалов гидридов. Schwarz W. H. E. Interpretation of the core electron excitation spectra of hydride molecules and the properties of hydride radicals. «Chem. Phys.», 1975, 11, № 2, 217—228 (англ.)

Спектры поглощ. м. п.

Обсуждены спектры поглощения в мягкой рентгеновской области молекул HCl, H_2S, PH_3, SiH_4, CH_4 (РЖХим, 1973, 18Б130; 1970, 11Б188) и спектры потерь кинетич. энергии электронов на молекулах H_2O, NH_3, CH_4 (РЖХим, 1975, 6Б106). Проведено отнесение пиков и объяснены их энергии, ширины и интенсивности. Вычислены энергии связи внутренних электронов. На основании измеренных энергий пиков и ширины полос сделаны предсказания о возможном существовании и нек-рых св-вах радикалов гидридов ArH, ClH_2, SH_3, PH_4, FH_2, OH_3 и NH_4. Резюме

Х 1976 N 11

(+14)

HCl

1975

Schwarz W.H.

„Chem Phys" 1975, 9, N 1-2, 157-164 (англ)

отнесение полос

(см стр. III)

HCl

сечения поглощ.

Ф1976 N2

2 Д412. Автоионизация в двухатомных молекулах. Измеренные параметры формы линии и предсказываемые фотоэлектронные спектры для некоторых автоионизационных состояний галогеноводородов. Terwilliger D. Thomas, Smith Allan L. Autoionization in diatomics: measured line shape parameters and predicted photoelectron spectra for some autoionizing states of the hydrogen halides. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 2, 1008—1020 (англ.)

1975

С помощью континуума Хопфилда и системы сбора данных, управляемой ЭВМ, измерены относит. сечения поглощения HCl, DCl, HBr, DBr, HJ при разрешении 0,2 Å в диапазоне 1000—700 Å. Для анализа формы автоионизационных (АИ) колебательных полос применялась теория Фано. Оказалось, что параметры формы линии q, Г и ρ^2 не зависят от вращательного квантового числа, но могут зависеть от колебательного квантового числа АИ состояния. Вычисления показали, что в случае HCl эта зависимость сильнее всего проявляется при высоких ϑ. Полученные параметры q, Г, ρ^2 использовались для предсказания формы фотоэлектронных спектров этих АИ-состояний. Время жизни молекул в АИ-состояниях составило для HCl и DCl — $1{,}1 \cdot 10^{-14}$ сек, для HBr и DBr — $9{,}5 \cdot 10^{-15}$ сек. Библ. 32.

Ю. В. Чижов

☒ (+5) (+1) τ

1975

HCl
DCl
HBr
DBr
HJ
фотоэл. ☒
спект/п. (+4)
X 1976 N 6

6 Б168. Автоионизация двухатомных молекул; измеренные параметры формы линий в предсказанные фотоэлектронные спектры для некоторых автоионизованных состояний галогенводородов. Terwilliger D. Thomas, Smith Allan L. Autoionization in diatomics: measured line shape parameters and predicted photo electron spectra for some autoionizing states of the hydrogen halides. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 2, 1008—1020 (англ.)

В области 700—1000 А с разрешением 0,2 А измерены спектры поглощения молекул HCl, DCl, HBr, DBr и HJ. Идентифицированы колебательные прогрессии полос ридберговых серий, сходящихся к состоянию $A^2\Sigma^+$ ионов HX^+. Анализ формы полос с учетом автоионизации выполнен по теории Фано для атомов, распространенной авторами на случай двухатомных молекул. Экспериментально и теоретически показано, что ширина полос наиболее интенсивной прогрессии I для HCl с эффективным главным квантовым числом $n^* \simeq 2{,}75$ не зависит от колебательного квантового числа v' при $v' \leqslant 3$, но умень-

шается вдвое при переходе от полосы с $v=3$ к полосе с $v'=4$ (для полосы DCl с $v'=5$ вычисленная ширина отличается от измеренной). Для HBr и DBr ширина полос не зависит от v'. Ширина полосы с данным v в различных ридберговых сериях изменяется как n^{*-3}. Определены значения параметров Фано для формы полос (q, Г и ρ^2), по к-рым рассчитаны фотоэлектронные спектры исследуемых молекул. М. Р. Алиев

HCl

1975

спектр пропуск. эл-нов

+3

1 Б183. **Резонансы Фешбаха, связанные с ридберговыми состояниями галогенидов водорода.** Spence David, Noguchi Tetsushi. Feshbach resonances associated with Rydberg states of the hydrogen halides. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 1, 505—514 (англ.)

Измерены резонансы Фешбаха в спектрах пропускания электронов в HF, HCl, HBr и HJ, образованные добавлением пары ридберговых электронов к ионным основам. Спектры HCl, HBr и HJ подобны друг другу и спектрам изоэлектронных атомов Ar, Kr и Xe и состоят из 4 групп резонансов. Установлены электронные конфигурации, соотв-щие наблюдаемым резонансам. Показано, что большинство резонансов соответствует ридберговым состояниям с симметрией $^2\Pi_i$. Для энергии связи электронных пар к положит. ионным остовам в HCl, HBr и HJ получены значения 3,625; 3,620 и 3,680 эв, соответственно. В спектре HF обнаружена только одна серия резонансов, соотв-щих паре $3s\sigma$-электронов, связанных с $X^2\Pi$-остовом с энергией связи 3,18 эв.

М. Р. Алиев

☒

Х 1975 N 1

HD, H_2, HT, HCl, HBr, HJ (м.п.) 1975
XI 4447

Володичева М.И., Ребане Т.,

Вестн. Ленингр. ун-та. Сер. физ. хим., 1975, (1), 27-30.

Ядерное спин-вращательное взаимодействие в колеблющихся молекулах.

8

Ф

С.А. 1975. 83 №4. 35279р 10

60412.7268
Ch,Ph,TC

HCl (тв) 92847 (спектр)

1975
Ж-4-12095

К р. N 60412.7201

Vu H., Jean-Louis M., Thiery M.M., Fabre D., Avrillier S., Khatibi P.
I.R. and R. spectra of simple molecular solids up to 15 kbar at 4.2K.

"Rev.Phys.Chem.Jap.", 1975, Spec.Issue, 348-353 (англ.)

576 576 582 0590 ВИНИТИ

HCl
DCl
HBr

форма энерг. зависим. попер. сечен.

1975

3 Б206. Образование отрицательных ионов, колебательное возбуждение и спектроскопия пропускания галоидоводородов. Ziesel J. P., Nenner I., Schulz G. J. Negative ion formation, vibrational excitation, and transmission spectroscopy in hydrogen halides. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 5, 1943—1949 (англ.)

Измерена форма энергетич. зависимости поперечного сечения для образования X^- из молекул HCl, DCl, HBr, DBr, определены поперечные сечения колебательного возбуждения HCl, DCl, исследована структура полного поперечного сечения рассеяния по спектрам пропускания электронов для HCl, DCl, HBr. Измерения выполнены для процессов рассеяния электронов энергией от 0,5 до 2,5 эв. Поперечные сечения колебательного возбуждения резко возрастают вблизи порога, и порядок их величин может быть объяснен присутствием промежут. состояния. Это промежут. состояние может быть ответственным и за образование X^-. Найденные особенности энергетич. зависимости поперечных сечений могут быть объяснены конкуренцией между двумя каналами распада, диссоциативным и колебательным.

С. Н. Мурзин

+2

X 1976 №3

HCl

HBr

*43-12419

1976

15 Б262. **Инфракрасные спектры твердых HCl и HBr. Область обертонов.** Avrillier S., Mitra S. S., Vu H. Infrared spectra of solid HCl and HBr. The overtone region. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 5, 2202—2207 (англ.)

Измерены ИК-спектры тв. HCl и HBr в области 4000—6000 см$^{-1}$ при т-рах 4,2 и 77° К. В процессе охлаждения от 77 до 4,2° К образцы подвергали обработке давл. (до $6 \cdot 10^3$ атм). Наблюдаемые в спектрах HCl и HBr (4,2° К) полосы отнесены к обертонам (5291 и 4709 см$^{-1}$), парным переходам молекул, находящихся в соседних ячейках различных крист. фаз (5442, 5491 и 4835, 4868 см$^{-1}$) и их комбинациям с колебаниями решетки (5608, 5775, и 4747, 4770 см$^{-1}$). Исследовано влияние фазового состава и фазовых переходов на спектры тв. бромистого водорода. В. М. Ковба

и.к. спектр

(+1)

X 1976 N 15

HCl отт.ен. 4661 1976

2 Д174. **Влияние электронов на вращательную энергию двухатомной молекулы.** Asgharian A. Electronic effect on the rotational energy of a diatomic molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 3, 513—516 (англ.)

С учетом вклада электронов в момент инерции и взаимодействия электронного орбитального углового момента с вращательным угловым моментом получено общее выражение для вращательного гамильтониана двухатомной молекулы в $^1\Sigma$-состоянии. С учетом электронной поправки (найденной по известным электронным волн. ф-циям) вычислена центробежная постоянная 4-го порядка для молекулы HCl и получено удовлетворительное согласие с экспериментом. М. Р. Алиев

МП.

Ф. 1977. N2

HCl

оттиск 4681 1976

расчет электр. состоян.

2хат. молек.

(+1)

Х. 1977 N1

1 Б53. Влияние электронов на вращательную энергию двухатомной молекулы. Asgharian A. Electronic effect on the rotational energy of a diatomic molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 3, 513—516 (англ.)

Получен вращательный гамильтониан для двухатомной молекулы, учитывающий в первом приближении движение электронов за счет введения доп. к ядерному моменту инерции электронов. Показано, что выведенная общая форма вращательного оператора при ряде упрощающих предположений сводится к гамильтониану Кронига. Специально изучен случай электронных состояний $^1\Sigma$. Для молекулы $H^{35}Cl$ рассчитаны изменения во вращательной константе $D \equiv Y_{02} = 4B_e^2/\omega_e$ при введении момента инерции электронов. Величина момента инерции электронов найдена по неэмпирич. электронной волновой функции для HCl. После введения поправок на электронный момент инерции получена величина D, хорошо согласующаяся с эксперим. значением.

Б. И. Жилинский

HCl

ammn 4661

1976

85: 133014j Electronic effect on the rotational energy of a diatomic molecule. Asgharian, A. (Dep. Phys., Natl. Univ. Iran, Teheran, Iran). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 41(3), 513-16 (Eng). The rotational Hamiltonian for a diat. mol. was rederived from the total classical Hamiltonian. This procedure directly introduces the effect of electronic motion which is ordinarily neglected in zero-order approxn. Kronig's rotational Hamiltonian is discussed and is an approxn. of the findings. The general result is then specialized to $^1\Sigma$ states, and the theory tested by calcg. the obsd. fractional discrepancy between the exptl. detd. $H^{35}Cl$ energy level const. Y_{02} and its predicted value from Dunham's theory. When all corrections are summed, the results are in good agreement with expt.

MuN

C.A. 1976 85 N 18

NaH, AlH, HCl X-9895 1976
(кв. мех. расчет).
Bartlett R. J., Silver D. M.,
J. Chem. Phys., 1976, 64 (11)
4578-86.
Many-body perturbation
theory applied to ... 6
C.A. 1976. 85 N12. 83520y. 10

HCl

DCl

$(HCl)_2$

спект в матрице

1976

87: 191464h **Raman spectra of matrix isolated hydrogen and deuterium chloride: monomers and dimers.** Brunel, L. C.; Bureau, J. C.; Peyron, M. (Lab. Chim.-Phys., Inst. Natl. Sci. Appl. Lyon, Villeurbanne, Fr.). *Proc. Int. Conf. Raman Spectrosc., 5th* 1976, 96-7 (Eng). Edited by Schmid, Eduard D.; Brandmueller, J.; Kiefer, W. Hans Ferdinand Schulz Verlag: Freiburg/Br., Ger. Raman spectra were obtained for HCl and DCl isolated in Ar, Kr, and Xe matrixes; characteristic features of polymeric species appear on the low-frequency side of the *Q* branch. The lines at 2817 and 2854 cm^{-1} are assigned to dimers. Semiempirical calcns. on the intermol. forces in the dimers indicate that induction forces are small compared to electrostatic forces and that dipole-quadrupole and quadrupole-quadrupole interactions are more important than the dipole-dipole interaction.

+2

C.A., 1977, 87, N24

HCl
DCl

1976

5 Б205. Спектры КР матричноизолированных хлористого водорода и хлористого дейтерия: мономеры и димеры. Brunel L.-C., Bureau J.-C., Peyron M. Raman spectra of matrix isolated hydrogen and deuterium chloride: monomers and dimers. «Proc. 5th Int. Conf. Raman Spectrosc., Freiburg, 1976». Freiburg—Breisgau, 1976, 96—97 (англ.)

Исследованы спектры КР HCl и DCl, изолированных в твердых Ar, Kr и Xe при 7 К. Полоса 2868 см$^{-1}$ в Ar отнесена к Q-ветви мономерного HCl, полоса 2922 см$^{-1}$ — к S_0-переходу. С высокочастотной стороны Q-ветви в Xe-матрице наблюдается пик, приписанный комбинации между Q-ветвью и локализованной модой, которая также найдена в спектре с частотой 70 см$^{-1}$. Кроме полос мономерного HCl наблюдаются также полосы 2817 и 2854 см$^{-1}$, соотношение интенсивностей к-рых не зависит от условий приготовления образца. Обе полосы отнесены к димерному HCl. Согласно расчету электростатич. взаимодействия молекулы HCl в димере располагаются ортогонально. Определяющими взаимодействиями в комплексе HCl, по-видимому, являются диполь-квадрупольное и квадруполь-квадрупольное. Индукционные силы должны быть малыми.

Я. М. Кимельфельд

спектры К.Р.

(1+) $(HCl)_2$

$(DCl)_2$

☒

Х. 1977 № 5

HCl

DCl

спектр

примеси

1976

86: 24023m Raman spectra of matrix isolated hydrogen and deuterium chloride. Bureau, J. C.; Brunel, L. C.; Peyron, M. (Lab. Chim. Phys., Inst. Natl. Sci. Appl., Lyon, Villeurbanne). *Mol. Spectrosc. Dense Phases, Proc. Eur. Congr. Mol. Spectrosc., 12th* 1975 (Pub. 1976), 369-72 (Eng). Edited by Grosmann, M.; Elkomoss, S. G.; Ringeissen, J. Elsevier: Amsterdam, Neth. Raman spectra were obtained of HCl and DCl in Ar, Kr, and Xe matrixes down to 7 K and monomer, dimer, and higher order polymer lines were obsd. The main features of the spectra are assigned. Evidence of non-first nearest neighbor dimer frequencies is presented. The symmetry of dimers is discussed. The influence of impurities was studied.

C.A. 1977. 86 N4

HCl

HF

DCl

DF

Сдвиги колебат.-вращат. линий

Ф. 1977 N 6

*45-17132

1976

6 Д194. Сдвиги колебательно-вращательных линий поглощения двухатомных молекул, возмущенных двухатомными полярными молекулами. Теоретический анализ. Boulet C., Robert D., Galatry L. Shifts of the vibration-rotation absorption lines of diatomic molecules perturbed by diatomic polar molecules. A theoretical analysis. «J. Chem. Phys.», 1976, **65**, № 12, 5302—5314 (англ.)

В рамках ударного приближения вычислены сдвиги линий поглощения на колебательно-вращательных переходах двухатомных молекул HCl, HF, DCl, DF, обусловленные столкновениями с полярными молекулами. Анализ показывает существование двух типов сдвигов, зависящих от молекул — партнеров по столкновению. Первый тип, называемый «нормальным сдвигом», реализуется для линий молекул HCl, возмущаемых HCl и

(+3)

DCl, а также для HF, возмущаемых HF, и характеризуется апериодич. зависимостью величины сдвига от номера возбуждательного уровня m. При $m \geqslant 10$ сдвиг для обертонов линий при столкновениях HCl—HCl, HCl—DCl и HF—HF достигает значений соответственно $1{,}8 \cdot 10^{-2}$; $2 \cdot 10^{-2}$ и $3 \cdot 10^{-2}$ см$^{-1}$ атм$^{-1}$. Второй тип, называемый «осциллируемым сдвигом», характерен для DCl и DF, возмущаемых соответственно HCl и HF, и дает квазипериодич. осциллирующую зависимость величины сдвига от m. Соответствующие амплитуды этих сдвигов для линий обертонов равны $(3 \div 12) \cdot 10^{-3}$ и $(2 \div 5) \cdot 10^{-2}$ см$^{-1}$ атм$^{-1}$.

Б. Ф. Гордиец

Cl' + HCl

1976

реакция обмена высота барьера

7 Д304. Расчет высоты барьера коллинеарной реакции обмена Cl′+HCl—Cl′H+Cl методом ПЕО—АПСЕ. Botschwina Peter, Meyer Wilfried. A PNO—CEPA calculation of the barrier height for the collinear atom exchange reaction Cl′+HCl→Cl′H+Cl. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 44, № 3, 449—451 (англ.)

Методом ПЕО—АПСЕ (использующим псевдоестественные орбитали и аппроксимацию пар связанных электронов) рассчитана высота барьера коллинеарной реакции обмена Cl′+HCl→Cl′H+Cl. Найденная величина, равная 16,6 ккал·моль$^{-1}$, является несколько завышенной по сравнению с «реальной» из-за недооценки дальнодействующего взаимодействия, поскольку использованный базис был недостаточно гибок, чтобы учесть поляризационные эффекты. Неучтенные 30% корреляционной энергии также могут уменьшить найденную величину на 5—10 ккал·моль$^{-1}$. А. Зембеков

Ф. 1977 №7

Вф-5120-XI 1976

HCl

24 Б142. Длина связи в газообразном HCl. Compton D., George W. O., Haines P. J. Bond length in gaseous HCl. «Educ. Chem.», 1976, 13, № 1, 18—20 (англ.)

М, П

Описана природа вращательных спектров двухатомных молекул. На примере HCl показано, как из вращательного и колебательно-вращательного спектров может быть определена длина связи в двухатомной молекуле. В. М. Ковба

Х.1976, N 24

HCl

1976

Clark T. A.

„Nature" 1976, 260, N 5546

спектр
непрер.

31-32 (англ)

(см H_2O; III)

60916.87/3
Ch, Ph, IC

40892

HCl

1976
4692

Collins John B., Schleyer Paul von R. Binkley J. Stephen, Pople John A.
Self-consistent molecular orbital methods. XVII. Geometries and binding energies of second-row molecules. A comparison of three basis sets.
"J.Chem.Phys.",1976,64,N 12, 5142-5151 (англ.)

(см. NaH, III)

0704 пик

662 668 696

ВИНИТИ

HCl

1976

4 Д214. Квантовомеханические расчеты сечений вращательного возбуждения HCl, DCl, DF и HF при медленных столкновениях с He. Collins L. A., Lane N. F. Quantum-mechanical calculations of rotational-excitation cross sections for HCl, DCl, DF, and HF in slow collisions with He. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1976, 14, № 4, 1358—1367 (англ.)

Рассчитаны сечения вращательных переходов при столкновении атома гелия в основном состоянии с молекулами HCl, DCl, DF, HF. Обсуждается выбор потенц. поверхностей, причем для молекул, отличающихся только изотопич. составом, различие возникает из-за изменения положения центра инерции. Изотопич. эффект связан также с изменением расстояний между вращательными уровнями. Расчеты проведены методом сильной связи и в приближении связанных состояний с сохраняющейся проекцией полного момента во вращающейся с молекулой системе координат (учитывалось необходимое для сходимости число закрытых каналов). Последнее приближение приводит к ошибкам в сечени-

кв. мех. расчет

(43)

Ф. 1977 № 4

ях не более 20% для рассматриваемых систем, которые отличаются слабоанизотропным дальнодействующим взаимодействием, но сильной анизотропией потенциала на средних и малых расстояниях. Подробно обсуждается качеств. зависимость сечений от поведения потенц. поверхности и расстояния между вращательными уровнями, в особенности в применении к изотопич. эффекту. Основные тенденции здесь удается понять в приближении искаженных волн, когда связь между каналами учитывается по теории возмущений.

В. Н. Островский

1976

HCl^+ Čermák V.

J. Electrosc. and Relat. Phenom., 1976, 8, N4, 325-329.

засекл. калиб. уровн.

(см HBr^+) III

HCl

1976

Сетмак V.

Молекул. молекул. Спектр.

J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom., 1976, 9 N6, 419-39.

(см. CO; ICr)

HCl

1976

Durand Ph., et al

Localiz. and Deloc al

Quant. Chem. Vol. 2. D.-B.

1976, 91-124.

(нанер. см. нет.)

(см. M_2O; III)

HCl

1976

Findlay R.H.

J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1976 Part 2, 72, N 2, 388-97.

(paper M.M.T.)

(CH Co H4) III

HCl

1976

11 Д451. Нелинейная зависимость уширения вращательных линий HCl в сжатом аргоне от плотности газа. Frenkel D., Gravesteyn D. J., Elsken J. van der. Non-linear density dependence of rotational line-

И.К. спектры поглощения

см. на обороте

Ф. 1976 N 11

broadening of HCl in dense argon. «Chem. Phys. Lett.» 1976, 40, № 1, 9—13 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразного HCl в смеси с аргоном при 162,5° К, плотностях от 100 до 480 амага, конц-ии не более 10^{-3} с разрешением 0,3—1,2 $см^{-1}$ в области 15—250 $см^{-1}$. При низких плотностях спектр состоит из изолированных линий, связанных с вращательными переходами молекулы HCl. При повышении плотности происходит деформация спектра и при 480 амага первые 3 линии практически полностью размыты, остальные вполне различимы, а линии с высокими номерами m сравнительно хорошо разделяются. Предположив, что спектр представляет собой сумму вкладов отдельных линий, и варьируя их положение и полуширину до совмещения рассчитанного спектра с экспериментальным, авторы определили полуширины линий при различных плотностях газа. Изменения полуширины с плотностью нелинейны и различны для разных m. Нелинейность не устраняется при введении поправок на изменение числа столкновений с плотностью по модели Энскога. Качественно наблюденные эффекты объяснены коллективными взаимодействиями в газе высокой плотности. Библ. 21. М. В. Тонков

НСЕ

1976

Голгер А.П.

„Нелинейное резонансное преобразование инфракрасного лазерного излучения на молекулах"

Автореферат на соискание ученой [redacted] степени К. Ф.М.Н

HCl (газы)

Guenoche Henri, Sodes Chantal, Mlle.
Calcul de l'inversion de population entre les niveaux de vibration de HCl en aval d'une onde de choc droite et d'une onde de souffle cylindrique.
"C. r. Acad. sci.", 1976, 282, N 20, B487-B490 (франц., рез. англ.)

Сел. хос. 01

70407.7740
TC, Ph

34469
HCl

1976
У-17785

Ghosh Pradip [redacted]N.

Internal vibrations of HCl, DCl, HBr & DBr in the crystalline phase.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1976, 14, N 4, 321-322 (ЭНГЛ.)

0848 пик

810 810

ВИНИТИ

HCl

1976

Кв. мех. расчет

13 Б18. Радиальный анализ градиента электрического поля на ядре Cl в HCl. Grabenstetter J. E., Whitehead M. A. Radial analysis of the electric field gradient at the Cl nucleus in HCl. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 37, № 3, 547—550 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в одноцентровом приближении рассчитана молекула HCl (I). Базис состоял из 29 функций слейтеровского типа, центрированных на атоме Cl. Градиент электрич. поля q рассчитан как сумма вкладов от сферич. слоев толщиной 0,1 ат. ед. Рассчитанное значение $q=3{,}494$ ат. ед. хорошо согласуется с эксперим. значением 3,491 ат. ед. Найдено, что около 93% q получается при учете сферы $r<0{,}3$ ат. ед., однако вклад остовных электронов незначителен в силу почти сферич. симметрии их оболочек и основной вклад связан с небольшой частью электронной плотности валентной оболочки, сосредоточенной в этой сфере. Аналогичная картина наблюдается в HD^+, где основной вклад в q дает область, радиус к-рой составляет около 20% от межатомного расстояния, в отличие от HD, где эта область имеет радиус, изменением знака разности $\chi_M-\chi_Y$ в пределах этих сфер. Рассмотрен ряд факторов, учет к-рых, позволит, по мнению авторов, улучшить точность соотношения (1).

В. Флустов

X1976 N13

HCl

1976

8 Б21. Расчеты HCl методом самосогласованного поля с использованием одноцентрового разложения. Часть I. Grabenstetter J. E., Whitehead M. A. One-centre-expansion self-consistent-field calculations on HCl. Part I. «Croat. chem. acta», 1976, 48, № 3, 245—269 (англ.; рез сербскохорв.)

Электр. строение

На примере молекулы HCl проанализирована возможность неэмпирич. расчетов электронного строения молекул с использованием одноцентрового базиса. Сопоставлены результаты для 2 базисов функций, центрированных на атоме Cl: 1) всего 71 орбиталь, использован ранее в аналогичном расчете (Theor. chim. Acta, 1967, 8, 8); 2) 20 функций — AOCl из базиса обычного двухцентрового расчета Cl_2 (J. Chem. Phys., 1971, 55, 5247) и 9 доп. функций с $n=9$ для воспроизведения электронной плотности вблизи протона. Расчет во 2-м базисе при эксперим. равновесном расстоя-

Х. 1977. № 8

нии приводит к меньшей полной энергии по сравнению с расчетом в 1 базисе (на 0,0163 ат. ед.). Этот результат показывает, что правильный выбор одноцентрового базиса позволяет обойтись без чрезмерного расширения этого базиса. Вириальное отношение при $R_{\text{эксп}}=$ $=2{,}4087$ ат. ед. составляет соотв. 2,00013 и 2,00053. Оптимизация межатомного расстояния дает лучшие результаты для 1 базиса (2,4181 ат. ед.), чем для второго (2,5098). С помощью полученных волновых функций при $R_{\text{эксп}}$ вычислены значения дипольного момента HCl: 1,3320 D, 1,3616, эксперимент — 1,1085, и квадрупольного момента: $3{,}95\cdot10^{-26}$ эл.-стат. ед·см^2, $3{,}80\cdot10^{-26}$, эксперимент — $3{,}8\cdot10^{-26}$. Вычислены также средние значения $\langle r^{-1}\rangle$ и $\langle r^{-2}\rangle$. Проведено сравнение с близкими к хартри-фоковскому расчетами HCl в двухцентровом базисе.

М. Гофман

HCl

HF

1976

86: 10318z **Absolute wavenumber measurements 1-0, 2-0, hydrogen fluoride and 2-0, hydrogen chloride (chlorine-35, -37) absorption bands.** Guelachvili, G. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris XI, Orsay, Fr.). *Opt. Commun.* 1976, 19(1), 150-4 (Eng). Fourier absorption spectra of HCl and HF at room temp. permitted one to measure 87 abs. wavenos. The abs. obsd. position of the *P*(6) line of the 1-0 band of HF is not in agreement with a recent heterodyne detn. It is 110,725,739 ± 7.5 MHz.

спектр

(+1) ☒

C.A. 1977 86 N2

Gordy W. Spektroskopie v daleké infračervené oblasti s použitím mikrovlnné techniky. "Chem. listy", 1976, 70, N12, 1244-1260 (чеш.,рез.англ.)

60503.7216
Ch, Ph, TC

40892

$H + Cl_2 \rightarrow HCl + Cl$

1976
4213

Halavee U., Shapiro M.

A collinear analytic model for atom-diatom chemical reactions.

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 7, 2826-2839 (англ.)

0005 ВИК

591 592 597

ВИНИТИ

60729.8745
Ch, Ph, TC

40392
HCl (расчет)

1976
4386

Huffaker J.N.

Diatomic molecules as perturbed Morse oscillators. II. Extension to higher-order parameters.
"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 11, 4564-4570
(англ.)

(см. CO; III)

0673 ~~ГПК~~

646 652

ВИНИТИ

HCl
HBr
HF
HJ
J_2
JCl
JBr
JJ
Cl_2, ClBr, ClJ, J_2
X. 1977. N 11

*ЖЗ-16667 (кривые потенц. энергии) 1976

11 Б16. Неэмпирические эффективные потенциалы остова: сведение расчетов строения молекул с учетом всех электронов к расчетам, в которых учитываются только валентные электроны. Kahn Luis R., Baybutt Paul, Truhlar Donald G. Ab initio effective core potentials: reduction of all-electron molecular structure calculations to calculations involving only valence electrons. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 10, 3826—3853 (англ.)

Проанализирована теория псевдопотенциала для валентных электронов атомов, содержащих 1 или более валентных электронов. Сформулированы условия для псевдоорбиталей, позволяющие получить псевдоорбитали, содержащие наименьшее число пространственных компонент и наиболее близких к хартри-фоковским валентным орбиталям. Рассмотрено локальное пред-

(+11)

ставление валентного псевдопотенциала и исследованы его св-ва. Отмечено, что локальный псевдопотенциал должен зависеть от углового квантового числа. Построена аналитич. апроксимация псевдопотенциала в виде разл. по гауссовским ф-циям, параметры к-рого определены для атомов C, N, O, F, Cl, Br и J. Получены выражения для матричных элементов псевдопотенциала с орбиталями гауссовского типа. Обсуждено вычисление полной энергии молекул в приближении псевдопотенциала. В кач-ве примера проведены расчеты с найденными псевдопотенциалами кривых потенциальной энергии ряда галогенводородов HX и двухатомных молекул галогенов X_2, X=F, Cl, Br, J. Согласие с эквивалентными неэмпирич. расчетами с учетом всех электронов хорошее. Развитая теория подробно сопоставлена с аналогичными подходами др. авторов. А. Багатурьянц

HF
HCl
HBr
HJ
FCl
FBr
FJ
ClBr
ClJ
BrJ

F_2
Cl_2
J_2
Br_2

Ф4-16667 1976

6 Д129. Неэмпирические эффективные потенциалы остова: сведение расчетов молекулярной структуры с учетом всех электронов к расчетам, включающим только валентные электроны. Kahn Luis R., Baybutt Paul, Truhlar Donald G. Ab initio effective core potentials: reduction of all-electron molecular structure calculations to calculations involving only valence electrons. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 10, 3826—3853 (англ.)

Развит формализм расчетов электронной структуры молекул в валентном приближении с использованием неэмпирических атомных эффективных потенциалов остовов (ЭПО). Последние получены на основе хартри-фоковских расчетов для нейтральных атомов и связаны с таким преобразованием валентных АО к псевдоорбитальной форме, которое позволяет обеспечить достаточную точность и одновременно максимальную экономичность расчета. Табулированы параметры разложения ЭПО для валентных *s*- и *p*-электронов C, N, O

Ф. 1977 N 6 (+13) (расчет, потенц. кривв.)

и F и s-, p- и d-электронов Cl, Fe, Br и J по гауссовым ф-циям и приведены ф-лы, необходимые для расчета соответствующих матричных элементов. С целью исследования качества используемого приближения выполнен ряд расчетов для молекул типа HX и X_2, где X=F, Cl, Br, J. Рассчитаны потенц. кривые, которые отличаются от полученных с учетом всех электронов не более чем на 0,2—0,3 эв; ошибка в расчете для равновесных расстояний составляет 0—6%. Расчет позволяет передать от 50 до 85% энергии диссоциации. Удовлетворительными оказываются и результаты для одноэлектронных молекулярных характеристик. Показана возможность дальнейшего уточнения расчета путем включения конфигурац. взаимодействия. Проведено подробное сравнение с приемами построения эффективных и модельных потенциалов, предложенных другими авторами.

В. И. Барановский

кол-

HCl (mb)

1976

13 Б603. Температурная зависимость спектра частот для твердого ромбического HCl. Kanney L. B., Gillis N. S., Raich J. C. Temperature dependent frequency spectrum of solid orthorhombic HCl. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 44, № 3, 495—498 (англ.)

Вычислен спектр фононов в точке $k=0$ зоны Бриллюэна и его зависимость от т-ры для тв. ромбич. HCl. Расчеты проведены при т-рах 0—98,4° K, где 98,4° K соответствует переходу HCl из сегнетоэлектрич. в параэлектрич. фазу. В кач-ве Пт взаимодействия использована комбинация диполь-дипольного взаимодействия и взаимодействия типа «exp-6» с ранее предложенными (РЖХим, 1975, 8Б610) параметрами. Расчет проведен в простейшем варианте метода самосогласованных фононов. «Смягчения» фононной ротац. частоты в точке $k=0$ не обнаружено, что находится в согласии с данными КР, хотя эксперименты по нейтронному рассеянию с определенностью указывают на «смягчение» ротац. фононной моды в окрестности 1-го фазового перехода. Сделан вывод, что «смягчение», по-видимому, происходит в точке зоны Бриллюэна $ck \neq 0$. В. А. Онищук

спектр частот

Х. 1977. № 13

HCl

1976

Makushkin Yu, et al.

Tezisy Dokl. Simp. Mol. Spektrosk. Vys. Soerkhvys. Razreshcheniya, 3rd 1976, 78-82 (Russ)

nomenus-
ф-цыя
м.п.

см. CO - I

Cl-H

1976

Маетрюков В.С., и др.

Ж. структ. хим. 1976,

17, N1, 172-4.

(алф. кол.
г. ед)

(см Be-H) III

61221.1921
MGU, Ch, Ph, TC

HCl

41125

1976

* Ч-15756

Ogilvie J.F., Koo D. Dunham potential energy coefficients of the hydrogen halides and carbon monoxide.
"J. Mol. Spectrosc.", 1976, 61, N 3, 332-336 (англ.)

(см. HF, III)

0773 пик

733 734 7 65

ВИНИТИ

61203.3703
Ch, Ph, TC, MGU

40392

HCl

1976

4-15598

Pritt A. T., Jr, Coombe Robert D.

I ($5^2P_{1/2}$) quenching by hydrogen halides.

"J. Chem. Phys.", 1976, 65, N 6, 2096-2103
(англ.)

0757 пик

ВИНИТИ

714 724

70120.8803
B,Ch,Ph,TC

HCl 40604

1976

Ж4-16289

K p.N 70120.8799

Popkie Herbert E., Kaufman Joyce J.

Molecular calculations with the MODPOT, VRDDO, and MODPOT/VRDDO procedures. I. HF, F_2, HCl, Cl_2, formamide, pyrrole, pyridine, and nitrobenzene. (см. HF; III)

"Int. J. Quantum Chem. Symp.", 1976, N 10, 47-57 (англ.)

750 760

0795 ПОК

ВИНИТИ

70121.8751
Ch,Ph,TC,MGU

30063
HCl

1976
отт. 4875

Rohr K., Linder F.

Vibrational excitation of polar molecules by electron impact I. Threshold resonances in HF and HCl.
"J.Phys.B: Atom.and Mol.Phys.",1976,9, N 14, 2521-2537 (англ.)

0795 ВИНИТИ

741 755 787 ! ВИНИТИ

HCl^+

DCl^+

(м,н)

XS-15031 1976

85: 38855a A reexamination of the spin-rotation constant for $^2\Pi$ states: the A-X band system of hydrogen chloride(+). Saenger, Katherine L.; Zare, Richard N.; Mathews, C. Weldon (Dep. Chem., Columbia Univ., New York, N. Y.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 61(2), 216-30 . (Eng). The line positions measured by W. D. Sheasley and C. W. Mathews (1973) were used to reanalyze the $A\ ^2\Sigma^+-X^2\Pi$ emission spectrum of $H^{35}Cl^+$, $H^{37}Cl^+$, $D^{35}Cl^+$, and $D^{37}Cl^+$ employing the Hamiltonians and direct approach described by R. M. Zare et al. (1973). The new values for the mol. consts. now show the expected isotope relations. Attention is concd. on the centrifugal distortion correction to the spin-orbit splitting, A_D, and the spin-rotation const., γ, of the $^2\Pi$ state. Fixing A_D to values calcd. using an algorithm by J. A. Coxon (1975), a value for γ is derived. This compares poorly to the value of γ expected from an approxn. suggested by J. H. Van Vleck (1951). The source for this discrepancy is suggested to be the inadequency of the Van Vleck approxn. for the spin-rotation const. and/or the fact that the exptl. derived value is, in general, only an effective parameter contg. both the true spin-rotation interaction and pseudo-spin-rotation interactions caused by electronic perturbations, such as simultaneous interaction with $^2\Sigma^+$ and $^2\Sigma^-$ states or interactions with $^2\Delta$ or other $\Lambda \neq 0$ states with different multiplicity.

(+1) ☒

C.A. 1976 85 N6 cypbury.

HCl

1976

3 Д317. Пересмотр постоянной спин-вращательного взаимодействия в состояниях $^2\Pi$: Система полос A—X иона HCl^+. Saenger Katherine L., Zare Richard N., Mathews C. Weldon. A reexamination of the spin-rotation constant for $^2\Pi$ states: the A—X band system of HCl^+. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 2, 216—230 (англ.)

Пересмотрен анализ системы $A^2\Sigma^+$—$X^2\Pi$ в спектрах испускания ионов $H^{35}Cl^+$, $H^{37}Cl^+$, $D^{35}Cl^+$ и $D^{37}Cl^+$. Новые значения молекулярных постоянных показывают ожидаемые изотопич. отношения. Особо проанализированы поправки на центробежное растяжение к константе спин-орбитального расщепления (A_D) и спин-вращательного взаимодействия (γ) в состоянии $^2\Pi$. С использованием фиксированного значения A_D, рассчитанного по алгоритму Коксона, определено значение константы γ. Это значение плохо согласуется с полученным в приближении Ван-Флека. Расхождение отнесено за счет неадекватности приближения Ван-Флека для константы спин-вращательного взаимодействия и (или) за счет того, что экспериментально полученное значение является в действительности лишь эффективным параметром, включающим вклады «истинного»

М.Н.

Ф. 1977 N 3

Ф5-15031

спин-вращательного взаимодействия и псевдоспин-вращательного взаимодействия, обусловленного электронными возмущениями, такими, как одновременное взаимодействие с состояниями $^2\Sigma^+{}_u + {}^2\Sigma^-$ или взаимодействие с состоянием $^2\Delta$ или другими состояниями $\Lambda \neq 0$ с различной мультиплетностью. Библ. 26. В. С. Иванов

HCl
DCl

1976

6 Б131. Повторное рассмотрение постоянной спин-вращательного взаимодействия в $^2\Pi$ состояниях: A—X система полос HCl^+. Saenger Katherine L., Zare Richard N., Mathews C. Weldon. A reexamination of the spin-rotation constant for $^2\Pi$ states: the A—X band system of HCl^+. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 2, 216—230 (англ.)

Проведен анализ системы полос $A^2\Sigma^+$—$X^2\Pi$ в спектрах испускания $H^{35}Cl^+$, $H^{37}Cl^+$, $D^{35}Cl^+$, $D^{37}Cl^+$. Определены и табулированы молек. постоянные ν_0, B, D, H, γ и γ_D HCl^+ ($^2\Sigma^+$-состояние, $v=0$—9); A, A_D, B, D, H, постоянные Λ-удвоения p, p_D, q и q_D HCl^+ ($^2\Pi$ состояние, $v=0$—2). Молек. постоянные $^2\Sigma^+$ состояния хорошо согласуются с полученными ранее результатами, в то время как значения A_D и параметров Λ-удвоения $^2\Pi$ состояния заметно отличаются. Найденные из эксперим. данных изотопные отношения по водороду и дейтерию для A_D, q, p, p_D и q_D согласуются с расчетными

Ис

Ж-15031

(+1)

Х. 1977. 6.

значениями. Обсуждены обусловленные центробежным искажением поправки к постоянной спин-орбитального взаимодействия (A_D) и постоянной спин-вращательного взаимодействия (γ) $^2\Pi$ состояния. Показано, что полученное из анализа оптич. спектров значение $\gamma(^2\Pi)$ является эффективной постоянной, обусловленной как вкладом «чистого» спин-вращательного взаимодействия, так и электронными возмущениями (псевдоспин-вращательные взаимодействия), связанными с взаимодействием с $^2\Sigma^+$, $^2\Sigma^-$, $^2\Delta$ и др. состояниями различной мультиплетности с $\Lambda \neq 0$. В. М. Ковба

расчет сил. пост. (HF, H_2O, NH_3, CH_4, HCl, H_2S, PH_3, SiH_4) XI-4634 1976

Schlegel H.B., Wolfe S., Bernardi F.,

J. Chem. Phys., 1975, 63, N8, 3632-3638 (англ.)

Ab initio computation of force constants. I The second and third period hydrides

(

Ru Физ, 1976, 32157

(Ф)

HCl + DCl (смеш. кристаллы) 1976

15 Б252. Исследование инфракрасных спектров смешанных кристаллов HCl/DCl в области первых обертонов. Shala F., Cahill J. E. Infrared studies of HCl/DCl mixed crystals in the first overtone region. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 12, 5250—5255 (англ.)

И.К. спектр

Получены ИК-спектры смешанных кристаллов HCl/DCl в области частот первых обертонов и сопоставлены со спектрами кристаллов HCl и DCl. Наиболее существенное отличие спектра смешанного кристалла заключается в проявлении перехода $\nu_{01}(HCl)+\nu_{01}(DCl)$. Сдвиги величин ω_e и $\omega_e X_e$ при переходе от газовой фазы к кристаллу использованы для определения потенциальной ф-ции на основе приближений Липпинкотта — Шредера и Морзе. Хотя оба потенциала хорошо описывают изменения величин ω_e, $\omega_e X_e$ и r_e, они являются физически неудовлетворительными, поскольку дают для Н-связи

Х. 1977 N 15

глубину потенциальной ямы больше, чем для связи HCl. Необходимо учитывать, однако, что измеряемые экспериментально величины чувствительны только к виду потенциала вблизи положения равновесия атомов водорода. Расчеты указывают на сильное влияние H-связей на трансл. кол. решетки. Сдвиг частот также в существенной мере определяется изменениями при переходе газ — тв. тело длины связи HCl и величины $\omega_e X_e$. С. Б.

60414.1965
Ph, TC, MGU, Ch

$A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$.
HCl^+ 92073

1976
№5-12444

Toyoda Minoru, Ogawa Teiichiro, Ishibashi Nobuhiko. Formation of excited molecules and atoms by controlled electron impact on hydrogen chloride and chlorinated methanes.

"Bull. Chem. Soc. Jap.", 1976, 49, N 2, 384-389 (англ.)

0601 ВИНИТИ

59

580 580

60414.1965
Ph,TC,MGU,Ch

HCl (Химический спектр)
92073

1976
№ 49-12444

Toyoda Minoru, Ogawa Teiichiro, Ishibashi Nobuhiko. Formation of excited molecules and atoms by controlled electron impact on hydrogen chloride and chlorinated methanes.
"Bull. Chem. Soc. Jap.", 1976, 49, N 2, 384-389 (англ.)

580 580

HCl

1976

10 Б30. Влияние потенциальной функции на колебательно-вращательные волновые функции и матричные элементы двухатомных молекул. Tipping R. H., Ogilvie J. F. The influence of the potential function on vibration-rotation wavefunctions and matrix elements of diatomic molecules. «J. Mol. Struct.», 1976, 35, № 1, 1—55 (англ.)

колебат. вращат. волнов. ф-ции

Исследовано влияние формы межъядерного потенциала на колебательные спектры состояний $^1\Sigma$ двухатомных молекул. В кач-ве примера детально рассмотрены результаты использования потенциалов Морзе, Леннард-Джонса и Данхэма для молекулы HCl. В случае потенциала Данхэма предложен расширенный вариант аналитич. итерац. метода вычисления матричных элементов осциллятора. Этим методом рассчитаны колебательные матричные элементы HCl и их значения срав-

Х, 1977, №10

нены с соотв-щими численными результатами, полученными с потенциалами Морзе, РКР и Данхэма. Для нескольких первых колебательных уровней найдены вращательные поправки к различным колебательным матричным элементам с потенциалом Данхэма. Эти поправки использованы для анализа эксперим. данных по интенсивностям спектров молекул галогеноводородов. Получены и проанализированы также соотв-щие функции дипольных моментов молекул галогеноводородов.

А. Дементьев

HCl

1976

Venkateswarlu P.

Indian J. Phys.

(Di)

1976, 50 N2, 100-114

(см. CO_2; III)

HCl
H_2S
PH_3
SiH_4
гидриды
(энерги связи, расчет.)

Ф-16531 1977

1) 5 Д146. Энергии связей для гидридов элементов третьего периода, рассчитанные методом одноцентрового разложения. Alti G. de, Decleva P. Binding energies of third row hydrides computed by a one-center expansion method. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 45, № 1, 103—106 (англ.)

Рассчитаны энергии связи электронов для гидридов элементов 3-го периода, которые определены как разности энергий основного состояния нейтральной молекулы и возбужденного состояния иона, полученного удалением одного из внутренних электронов. Расчет проведен в рамках метода одноцентрового разложения, использующего представление волн. ф-ции в виде одного детерминанта, построенного на миним. базисе слэтеровских ф-ций, центрированных на более тяжелом атоме. Получено достаточно хорошее согласие рассчитанных энергий связи для внутренних электронов в HCl, H_2S, PH_3, SiH_4 и в Ar с эксперим. значениями.

Б. И. Жилинский

(+4)

Ф. 1977 N5

HCl

1977

18 Б29. Неэмпирическое изучение сдвигов остовных оже-энергий и энергий связи остовных электронов в некоторых хлор-содержащих системах. Adams D. B. An ab initio study of core Auger and core electron binding energy shifts in some chlorine-containing systems. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1977, 10, № 3, 247—258 (англ.)

кв. мех. расчет

Неограниченным методом Хартри — Фока рассчитаны основные, а также дырочные одно- и дважды-ионизированных состояния хлор-содержащих систем: HCl, CH_3Cl, NH_2Cl, HOCl, ClF при равновесных эксперим. геометриях, а также Cl^+, Cl и Cl^-. При расчетах использованы базисы из сгруппированных гауссовых функций. На основании расчетов проведены оценки сдвигов остовных энергий Оже и энергий связи остовных электронов, учитывающие процессы релаксации электронной оболочки. Сопоставлением результатов расчета для двух механизмов процесса — с одной и с двумя дырками во внутренней оболочке установлено, что второй из них дает более точные результаты. Б. И. Жилинский

+ 18

Х. 1977. № 18

ВР-IX-5610; И-18925/977

Расчеты E, J, mn (NaH, MgH, AlH, SiH, PH, SH, ClH, NaH+, MgH+, AlH+, SiH+, PH+, SH+, ClH+)

Blustin P.H.,

J. Chem. Phys., 1977, 66, N12, 5548-55

10

.HCl

1977

11 Д153. **Спин-орбитальная и спин-вращательная связь в дублетных состояниях двухатомных молекул.** Brown John M., Watson James K. G. Spin-orbit and spin-rotation coupling in doublet states of diatomic molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 1, 65—74 (англ.)

М. п.

Отмечается, что предложенный Джеймсом (РЖФиз, 1965, 4Д68) метод определения постоянной спин-вращательного взаимодействия электрона γ_e и центробежной поправки к постоянной спин-орбитального взаимодействия A_{D_e} в двухатомных молекулах (при $S \neq 0$ и $\Lambda \neq 0$) является ненадежным, т. к. «кажущаяся» зависимость энергии спин-вращательного взаимодействия от колебательного состояния фактически содержит в себе линейную комбинацию параметров γ_e и A_{D_e} Предложен новый метод определения этих параметров, основанный на исследовании изотопич. зависимости спин-

Ф. 1977 № 11

вращательного взаимодействия и центробежной поправки к спин-орбитальному взаимодействию. Т. к. изотопич. замещение по-разному влияет на оба взаимодействия, то удается определить параметры γ_e и A_{De} (а также их зависимость от межъядерного расстояния) по отдельности. Теория применена к обработке имеющего эксперим. материала для $X^2\Pi$-состояния молекулы хлористого водорода, для которой изучены 4 изотопич. модификации (содержащие ^{35}Cl или ^{37}Cl и атом H или D). Найдены следующие значения γ_e и A_{De} (в $см^{-1}$): $H^{35}Cl$ 0,3206 и —648,342; $H^{37}Cl$ 0,3202 и —648,336; $D^{35}Cl$ 0,1186 и —648,333; $D^{37}Cl$ 0,1183 и —648,331. Для зависимости A от межъядерного расстояния получена ф-ла $A(\xi) = (-648{,}34 + 26{,}6\xi - 40\xi^2 \ldots)$ $см^{-1}$, где $\xi = (R - R_e)/R_e$.

Т. К. Ребане

HCl+

№5-18892

1977

22 Б31. Спин-орбитальное и спин-вращательное взаимодействия в дублетных состояниях двухатомных молекул. Brown John M., Watson James K. G. Spin-orbit and spin-rotation coupling in doublet states of diatomic molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 1, 65—74 (англ.)

Проведено изучение вкладов спин-вращательных и центробежных поправок к спин-орбитальному взаимодействию для двухатомных молекул в состояниях с $\Lambda \neq 0$. Показано, что предложенный ранее метод определения спин-вращательной постоянной γ и центробежной поправки A_D к постоянной спин-орбитального взаимодействия A основан на неоправданных предположениях. Предложен новый метод определения констант γ и A_D, использующий изотопич. зависимость энергетич. уровней: хотя обе константы обратно пропорциональны приведенной массе молекулы, их вклады в энергию колебательных уровней имеют разные зависимости от массы. Развитый метод проиллюстрирован на примере молекулы HCl+ в состоянии $X_2\Pi$. Получено выражение для константы спин-орбитального взаимодействия вблизи положения равновесия. Б. И. Ж.

спин-орбит, спин-вращат. взаимод

(+1) общий х-ка мол.

Х. 1977 №22

HCl^+ Ku-18892 1977

86:179905z Spin-orbit and spin-rotation coupling in doublet states of diatomic molecules. Brown, John M.; Watson, James K. G. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1977, 65(1), 65-74 (Eng). The spin-rotation interaction and the centrifugal correction to the spin-orbit coupling make indistinguishable contributions to the energy levels of a diat. mol. in a multiplet state with $\Lambda \neq 0$. A previous method of sepg. these 2 contributions, based on the use of the vibrational dependence of the spin-orbit coupling const., is unreliable. A better procedure is one based on the isotope dependences of the spin rotation coupling const. γ and the centrifugal correction to the spin orbit coupling const. A_D. Both γ_e and A_{De} are inversely proportional to μ, the reduced mass of the mol., but their contributions to the energy have different isotope effects. The method is used to det. values of γ_e and A_{De} for the $X^2\Pi$ state of HCl^+, and the form of the spin-orbit coupling function $A(r)$ in the vicinity of the equil. bond length is derived. The implications for RKP calcns. are considered briefly.

Ч.Н.

C.A. 1977. 86 N24

1977

HCl
HF
HBr
HJ
электр. спектр
Ж. 1977
№24

24 Б126. Электронная спектроскопия с использованием возбужденных атомов и фотонов. VIII ионизация Пеннинга галоидоводородов. Brion C. E., Crowley P. Electron spectroscopy using excited atoms and photons; VIII Penning ionization of the hydrogen halides. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1977, 11, № 4, 399—416 (англ.)

Измерены электронные спектры, возбуждаемые столкновениями быстрых метастабильных атомов гелия (гл. обр., в состоянии 2^3s с энергией 19,818 эв) с молекулами HF, HCl, HBr и HJ. Полученные данные сравниваются с результатами, полученными из фотоэлектронных спектров при 584 А (21,217 эв) с использованием одного и того же калиброванного электронного спектрометра. Определены нормированные относит. вероятности колебательных переходов и относит. засе-

(+3)

ленности электронных состояний для обоих типов ионизации. Кроме ожидаемых полос в электронном спектре, связанном с ионизацией Пеннинга, молекулы HF обнаружены также полосы, к-рые отнесены к автоионизированным состояниям атома фтора. Предположено, что автоионизация возбужденных HCl и HBr, как конкурирующий процесс в ионизации Пеннинга, является причиной отличия относит. колебательных интенсивностей для двух форм ионизации. Показано, что основная структура полос в спектре Пеннинга молекулы HJ связана с оптически ненаблюдаемыми квартетными состояниями ($^4\Pi$, $^4\Sigma$) молекулы HJ.

С. Б. Осин

HCl

1977

Bray Robert C., et al

Electron Transition Lasers2,

energy [Proc. Summer Collog], 3rd, 1976

(Pub 1977) 313-16 Eng

Coll. O_2 - (1)

CLH+ BP-5610-IX 1977

(E, J, Sen) Bhestin P.H.

J. Chem. Phys., 1977, 66, no 12
5648-5655

CCH BØ-5610-1X 1977

(E, J, Sun) Bleistein P.H

J. Chem. Phys., 1977, 66, W12
5648-5655

HCl Caresen N.R., et al 1977

„Chem. Phys. Lett.",
1977, 47(2), 203-8.

кв. мех.
расчет.

(см. III НСР)

HCl

1Д420. Зависимость от плотности индуцированных давлением сдвигов вращательных линий HCl, возмущенных аргоном. Frenkel D., van der Elsken J. 1977

Density dependence of the pressure induced shift of HCl rotational lines perturbed by argon. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 1, 116—119 (англ.)

И.К. спектр, поглощ.

С помощью фурье-спектрометра FS-720 получены спектры ИК-поглощения газообразного HCl в присутствии аргона с плотностью от 39 до 480 амага при конц-ии не более 10^{-3} и т-ре 162,5° К в области вращательных переходов с уровней J от 1 до 9. Определены сдвиги линий с точностью ~0,12 $см^{-1}$. Для извлечения информации о положениях вращательных линий эксперим. спектр сравнивался с рассчитанным как сумма лоренцовских контуров первых 10 вращательных линий с учетом изотопного эффекта по $^{35,37}Cl$. В отличие от ширины сдвиги всех линий кроме $R(3)$ практически линейно зависят от плотности. Для первых двух линий сдвиги положительны, для остальных — отрицательны. Приведены вычисленные эффективные сечения

Ф. 1978 № 1

сдвигов, их величины больше предсказанных теоретически. Обсуждается связь наблюденных сдвигов с параметрами анизотропного потенциала взаимодействия. Дано качеств. объяснение разной зависимости сдвига и уширения от плотности.

М. Тонков

HCl

Градиенты электрич. полей

1977

23 Б177. Расчеты HCl методом самосогласованного поля в приближении одноцентрового разложения. Часть 2. Анализ градиента электрического поля (ГЭП) на ядре Cl с помощью волновой функции метода самосогласованного поля в приближении одноцентрового разложения. Grabenstetter J. E., Whitehead M. A. One-centre-expansion self-consistent-field calculations on HCl. Part 2. Analysis of the electric field gradient, EFG, at the Cl nucleus from OCE—SCF wavefunction. «Croat. chem. acta», 1977, 49, № 4, 665—675 (англ.)

Методом самосогласованного поля в приближении одноцентрового разложения рассчитаны градиенты электрич. поля (ГЭП) на ядре атома Cl в молекуле HCl и ионе Cl^-. При расчете использован полученный в предработе авторов («Croat. chem. acta», 1976, 48, 245) базис, содержащий 29 орбиталей. Для электронной составляющей ГЭП молекулы HCl получено значение 3,4942 ат. ед., что хорошо согласуется с эксперим. значением 3,4908 ат. ед. Полученные результаты подробно сравниваются с результатами расчетов методом Хартри—Фока с использованием различных (одно- и двухцентровых) базисных наборов. Обсуждены преимущества использованного базиса для расчета энергии и ГЭП.

В. Б. Павлов-Веревкин

Х-1978, N23

70512.4538
Ph.Ch.TC.MGU

кв. мех. расчет
41125
HCl^+, DCl^+

1977
*Ч-12396

Green Sheldon, Zare Richard N.
Ab initio calculation of the spin-rotation constant for $^2\Pi$ diatomics. Test of the Van Vleck approximation. "J. Mol. Spectrosc.", 1977, 64, N 2, 217-222
(англ.)

(см. ОИ, III)

8875

8271 832

866

ВИНИТИ

HCl

Lowm 5380 | 1977

Gibson H.W.

Can. J. Chem., 1977,

55, 2037-41.

(7)

1947

НСС
НВч
НУ

Гаврилов А. П. и др.

В сб. „Горение и взрыв." М., „Наука", 1947, 554–559.

(Дс)

см НС – I

HCl

1977

уширение и сдвиг колебат.-вращат. полос

ф. 1978 N 3

3 Д318. Исследование уширений и сдвигов колебательно-вращательных линий основной полосы $H^{35}Cl$ при низких температурах в сжатых H_2 и D_2. Houdeau Jean-Pierre, Larvor Maurice, Haeusler Claude. Étude à basse température des largeurs et des déplacements des raies rovibrationnelles de la bande fondamentale de $H^{35}Cl$ comprimé par D_2 et H_2. «C. r. Acad. sci.», 1977, **B 285**, № 8, B199—B202 (франц.; рез. англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразного HCl при давл. несколько мм рт. ст. в присутствии 3—5 атм H_2 или D_2 при 298 и 163° K с разрешением 0,024 $см^{-1}$. Измерены коэф. уширения и сдвига с точностью 5 и 10% соответственно. В зависимости коэф. уширения D_2 от номера линии в R-ветви наблюден максимум, положение которого смещается к началу полосы при понижении т-ры. Величина смещения согласуется с перераспределением возмущающих молекул по вращательным состояниям. Значения уширений симметричны относительно начала полосы, значения сдвигов — сильно несимметричны. Для H_2 отмечено изменение знака сдвига при понижении т-ры у линии $R(0)$. М. Тонков

HCl 1977

19 Б281. Изучение при низких температурах уширения и сдвигов колебательно-вращательных линий фундаментальной полосы $H^{35}Cl$ вызванных давлением азота. Houdeau Jean-Pierre, Larvor Maurice, Haeusler Claude. Etude à basse température des largeurs et des déplacements des raies rovibrationnelles de la bande fondamentale de $H^{35}Cl$ comprimé par N_2. «C. r. Acad. sci.», 1977, C 284, № 7, 307—310 (франц.; рез. англ.)

колебат. — вращат. спектр

Исследовано уширение и сдвиг линий вращательной структуры [от $P(5)$, до $R(7)$] фундаментальной полосы в колебательно-вращательном спектре $H^{35}Cl$ при давл. азота от 2 до 5 бар и т-рах 298 и 163° К. Экспериментальные значения полуширины и смещений линий в основном согласуются с результатами расчетов, выполненных в рамках теории Андерсона — Тсао — Карнатта. Заметное расхождение наблюдается лишь для больших m ($m \geqslant 5$). Полученные результаты сопоставляются с аналогичными данными данными для систем хлористый водород — инертный газ. В. М. Ковба

Ж. 1977 N 19

HCl^+ отмечен 5771 1977

Huntress W.T., Jr.
Astrophys. J. Suppl. Ser.,
1977, 33, (4), 495-514.

(AH^+, I)

(см. H^+; III)

HCl+ 1977

86: 197172n Emission cross sections of hydrogen chloride(+) ($A^2\Sigma^+$,v' → $X^2\Pi_i$,v'') for electrons on hydrogen chloride and lifetimes of the hydrogen chloride(+) ($A^2\Sigma^+$,v') states. Mohlmann, G. R.; Bhutani, K. K.; De Heer, F. J. (Inst. Atoom- Molecuulfys., Organ. Fundam. Res. Matter, Amsterdam, Neth.). *Chem. Phys.* 1977, 21(1), 127-34 (Eng). Emission cross sections have been measured for the HCl^+ ($A^2\Sigma^+$, v' = 0-6 → $X^2\Pi_i$,v'' = 0, -5, ...) transitions in the case of electrons (0-2000 eV) incident on HCl. At 100-eV impact energy the exptl. total emission cross section for the $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_i$ system equals (7.2 ± 1.4) × 10^{-17} cm^2. An anal. of the intensity ratios of the v'-v'' transitions showed that the electronic transition moment for $A^2\Sigma^+$-$X^2\Pi_i$ decreases strongly for increasing internuclear sepn. (r-centroid). The electronic scattering matrix elements for the reaction ($HCl^+(A^2\Sigma^+)$ + $HCl(X^1\Sigma^+)$ vary rather slightly as a function of the r centroid. Applying the delayed coincidence technique, the radiative lifetimes were obtained of the HCl^+ ($A^2\Sigma^+$,v' = 0-6) states, using the $A^2\Sigma^+$,v' → $X^2\Pi_i$,v'' intensity decay curves produced by 100 eV electrons on HCl. The lifetimes vary from (2.58 ± 0.2) × 10^{-6} s for v' = 0, to (1.85 ± 0.2) × 10^{-6} s for v' = 6; their relative values agree reasonably with calcd. relative lifetimes using the exptl. electronic transition moments.

no refer. cercene

τ

26 N26

C.A. 1977.

ClH

отнесено 4999 1977

Marsh F.J; etal.

Chem. Phys. Lett

1977, 45, n2, 255-260

геометр.
д.л. связи
N

HCl

1977

уширен. полос

21 Б151. Температурная зависимость уширения посторонними газами фундаментальных линий HCl. Miziolek Andrzej W. Temperature dependence of foreign gas broadening of HCl fundamental lines. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 1, 134—141 (англ.)

Изучена зависимость от т-ры (193—298 К) уширения линий $P(7)$, $P(8)$ и $P(9)$ фундаментальной полосы поглощения газ. хлористого водорода посторонними газами (гелий, аргон, азот, кислород, окись углерода). Исследования выполнены с помощью низкот-рной ячейки с оптич. длиной пути 300—620 м (p_{HCl}=2—7 мм, $p_{газ}$=400—760 мм). Полученные данные по т-рной зависимости ширины линий и оптич. сечений в системе HCl—Ar согласуются с результатами измерений для др. линий P-ветви с более низкими I (I=1—6). Эксперим. данные сопоставляются с результатами расчетов, выполненных в рамках полуклассич. теории Нильсена и Гордона (см. РЖХим, 1973, 21Б78). Сделан вывод, что теория недооценивает вклада части потенциала с симметрией $P_1(\cos\theta)$. В. М. Ковба

Х. 1977 № 21

HCl

HCl⁻

1977

12 Б100. Интерпретация данных по рассеянию низкоэнергетических электронов на HCl. Nesbet R. K. Interpretation of low-energy electron-HCl scattering phenomena. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1977, 10, № 18, 739—743 (англ.)

потенц. кривые

Проанализированы данные по рассеянию электронов при энергиях ниже 2 эв на молекулах HCl. Для интерпретации наблюдаемых пиков в сечениях привлечены результаты квантовохим. расчетов потенциальных кривых систем HCl и HCl^-. Отмечено аномальное поведение рассчитанных Тейлором при помощи процедуры стабилизации потенциальных кривых двух низших $^2\Sigma^+$-состояний HCl^-, рассматриваемых как резонансные состояния (см. «J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.», 1977, 10, 2253). А именно, кривая состояния $1^2\Sigma^+$ после пересечения с кривой $V(R)$ основного состояния $X^1\Sigma^+$ молекулы HCl в точке R_c=11,6 А перегибается и следует к диссоциац. пределу H+Cl^-. Кривая состояния $2\,^2\Sigma^+$ при $R>R_c$ расположена достаточно близко к $V(R)$. Приведены аргументы в пользу того, что подобное поведение

(+) ☒

Х, 1978, №12

кривых легко объяснимо, если стабилизованные корни относятся к виртуальным состояниям $e+HCl$ в непрерывном спектре. В отличие от проведенной Тейлором интерпретации на основе диабатич. представления рассчитанных резонансных состояний показано, что к тем же заключениям приводит предположение о существовании виртуальных состояний для каждого порога колебательного возбуждения.

А. В. Немухин

CH_4, CO_2, CO, H_2, $\underline{HCl}$, } (cu.m.) 1974
Li_2, N_2, NO, O_2 }

Peyron M. BX-1398

"Meth. Spectrochim. anal. et dosage, Fase., 2", Lyon, 1974, XII/1-XII/14 (ppiaus.)

Les états d'énergie de vibration et de rotation de la molécule diatomique.

PNEPU, 1978, 108 248 10 (ꝏ)

IX-5640

1977

(Re)

MX	M = Li, Na, K, Pb, Cs, X = F, Cl, Br, J
MO	M = Be, Mg, Ca, Sr, Ba.
AX	A = H, Cl; X = F, Cl, Br, J
MJ	M = Cu, Ag, Au
F_2X	X = F, Cl, Br, J;

RaO (Re)

Peixoto E.M.A.,

Ciênc. Cult. (São Paulo) 1977, 29(5), 593-5

70422.7520
MGU,TC, Ph, Ch

HCl 30526GR

1977
4-18026

Piollet-Mariel E., Boulet C., Levy A.

Broadening and shifting of HCl vibration-rotation lines by silicon tetrafluoride.

"Mol. Phys.", 1977, 33, N 1, 255-258

(англ.)

0859 ПИК

813 816 ,850

ВИНИТИ

A-3366 1977

газ. стр. (NaH, MgH^+, SiH_4, PH_3, H_2S, HCl).

Ray N. K., Mehandru S. P., Switalski J. D.,

Chem. Phys. Lett., 1977, 47, № 3, 562-563

Дп. 5714

РЖХим, 1977, 19Б37 10

BX-441 1977

LiH^+, HCl^+, BH^+, NH^+, AlH^+, PH^+
(Do; м.л.)

Rosmus P., Meyer W.,

J. Chem. Phys. 1977, 66(1), 13-19 10

Ionization energies of the first and second row diatomic hydrides and...

C.A. 1977, 86, N16, 111415j

10

HCl

10 Д427. **Предсказание положения низкоэнергетических молекулярных ридберговских состояний по спектрам фешбаховских резонансов.** Spence David. Prediction of low energy molecular Rydberg states from Feshbach resonance spectra. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 2, 669—674 (англ.)

1977

Путем регистрации производной тока электронов с энергией 5—10 эв, прошедших через пары CH_3X ($X = Cl$, Br, J), исследовались резонансы Фешбаха в CH_3X. Анализ полученных данных показал, что существует линейная зависимость между энергиями резонансов Фешбаха $E_{nll'}(m)$ и соответствующими потенциалами ионизации $I(m)$: $E_{nll'}(m) = A_{nll'} I(m) + B_{nll'}$, где $A_{nll'}$ и $B_{nll'}$ — константы, не зависящие от типа молекулы m; l и l' — орбитальные квантовые числа двух возбужденных электронов. Это соотношение используется (помимо предсказания фешбаховских резонансов) для расчетов энергий низкоэнергетических ридберговских состояний в некоторых галогенсодержащих молекулах. На примерах HX, CH_3X, XCN, C_2H_5X ($X = Cl$, Br, J) показано хорошее согласие экспериментальных и предсказанных значений энергий ридберговских состояний. Библ. 23.

Ю. В. Чижов

(Ei)

⊠ (711)

Ф. 1977 № 10

43-18338

HCl

1977

2 Б22. **Расчет геометрии молекул методом ППДП/2 с учетом *d*-орбиталей. Соединения Cl, Br, J и серы.** Scharfenberg P. CNDO/2-Molekülgeometrieberechnungen unter Einbeziehung von d-Orbitalen. (Cl-, Br-, I- und Schwefelverbindungen als Beispiele). «Z. Chem.», 1977, 17, № 10, 388—389 (нем.)

расчет равнов геометрии

В приближении ППДП/2 с учетом и без учета *d*-орбиталей проведены расчеты равновесных расстояний в молекулах типа XY (X=H, галоген; Y=Cl, Br, J), Br_3^-, J_3^-, Cl_2J^-, а также в соединениях CS, CS_2, OCS, NCS^-, HBS, H_2S. Сопоставление с эксперим. данными показало, что лучшие результаты для соединений галогенов получаются в *sp*-базисе, а для соединений серы — в *spd*-базисе. Во всех случаях расчет в *spd*-базис приводит к меньшему значению межатомных расстояний по сравнению с расчетом в *sp*-базисе.

М. Гофман

+12

Х. 1979 N 2

HCl⁻

1977

2 Б143. Резонансные состояния HCl^- и процессы рассеяния электрон—HCl^-. Taylor H. S., Goldstein E., Sega G. A. Resonance states of HCl^- and electron—HCl scattering processes. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1977, 10, № 11, 2253—2259 (англ.)

Методом ССП ВК с использованием гауссовских орбиталей рассчитаны резонансные состояния HCl^-. Для отбора соотв-щих состояний использовался метод стабилизации. Приведены потенциальные кривые шести состояний: $1^2\Sigma$, $2^2\Sigma$, $3^2\Sigma$, $4^2\Sigma$, $5^2\Sigma$ и $^2\Pi$. Три из этих состояний диссоциируют на $H^- + Cl$ или $H + Cl^-$. Рассчитаны также состояния, диссоциирующие на $H + Cl + e$. Последние играют существенную роль в процессах рассеяния электронов молекулами HCl. Рассмотрены имеющиеся эксперим. данные по столкновениям электронов с HCl. Показано, что эти данные (колебательное возбуждение) диссоциативное притяжение и ассоциативное отталкивание) могут быть качественно и количественно объяснены на базе учета всех рассчитанных состояний HCl^- без проведения трудоемких расчетов процессов рассеяния электрон-полярная молекула.

С. Б. Осин

М, П.

Х. 1978, N2

IX-5506, OM 2742, 1977

CH_4, NH_3, OH^-, MgH^+, NeH^+, FH^+, SH^+, HCl

CaH^+, Ca^+, CH_3, CO^+, N_2, NO^+, SiO^+, FeH

(Приняла по сообщению)

Tarafdar S.P.

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.

1977, 17 (4), 537-42

Partition functions and equilibrium constants of some positive molecular ions.

C.A. 1977, 86, 24, 179691y

NO

LiH, BH, HF, Y (racem cu.n.) 1.11 1974
NaH, AlH, HCl

Wilson S., Silver D.M. BX-1137

J. Chem. Phys., 1977, 66, N12, 5400-5411
(angl.)

Diagrammatic perturbation theory: many-body effects in the $X^1\Sigma^+$ states of first-row and second-row diatomic hydrides.

РЖФиз., 1977, 11Д158 10 (9)

XS-18220

1977

Нее Wermhoudt J.,
Steinfeld J. I., Oppenheim I.

конгр. J. Chem. Phys., 1977, 66,
сиекір. № 7, 3121-3127.
сиеиий

Ф. 1977 № 9 См MF; III

НСС Ломонос 8415 / 1978.

Asundi R.K., etal.

отзр.
брош. пос.
спектр высокого
разрешения

Indian J. Pure
and Appl. Phys.
1978, 16, 135-141.

HC omnibus 6041 1978

Jørgensen W. R.

(E, concept, Art. 7, 11, 110) J. Amer. Chem. Soc. 1978, 100 (4) 1057-64

1978

HCl

DCl

Raman spectra matrix

88: 179678u Raman spectra of matrix isolated hydrogen and deuterium chloride: monomers and dimers. Brunel, Louis Claude; Bureau, Jean Claude; Peyron, Maurice (Lab. Chim.-Phys., Inst. Natl. Sci. Appl. Lyon, Villeurbanne, Fr.). *Chem. Phys.* 1978, 28(3), 387-97 (Eng). Matrix isolated HCl and DCl Raman spectra were obtained and analyzed for monomers and dimers. The monomer spectrum contains only the *Q* pure vibration branch and a *S*o vibration-rotation line which positions are compatible with the ir absorption results. Two lines were assigned to the dimers on the basis of their intensity behavior, i.e., a comparison between calcd. and measured intensities relative to the monomer *Q* branch for various concns., exptl. observations being made under the proper conditions to obtain randomly distributed solute mols. A calcn. based on intermol. forces taking into account dipole-dipole, dipole-quadrupole and quadrupole-quadrupole interactions shows that the obsd. frequencies are best reproduced with the 2 mols. of the dimers at a nearly orthogonal position. This indicates that the quadrupole-quadrupole forces are leading interaction in such a system.

(+1) ⊠

C.A. 1978, 28, 1124

HCl

1978

89: 68035h Emission spectrum of hydrogen chloride. Clayton, Christopher Michael (Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). 1977. 86 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. 7808337. From *Diss. Abstr. Int. B* 1978, 38(12, Pt. 1), 6009.

спектр испускания

С.А. 1978, 89, N8

HCl omnilecc 6121 1978

Jørgensen W. L.

(A.P.7) Chem. Phys. Lett.
1978, 53 (3), 525-29

HCl

HBr

1978

89: 137950s Vibration-rotation absorption spectra of hydrogen chloride and hydrogen bromide at very high foreign gas densities. Clermontel, D.; Michel, J. P.; Khatibi, P.; Vu, H. (Lab. Interactions Mol. Hautes Pression, CNRS, Villetaneuse, Fr.). *Infrared Phys.* 1978, 18(3), 229-32 (Eng). An optical cell designed for pressures up to 8-10 kbar, in the temp. range from 77 to 400 K, has been built to study pressure and temp. effects on the vibration-rotation spectra of gaseous HCl and HBr perturbed by foreign gases at very high ds.

Колебат. бращат спектр

(+1) ⊠

С.А. 1978. 89 N 16

HCl

Оттиск 6106 1078

расчет молекулы

7 Д184. Расчеты HCl методом ССП в базисе ф-ций, центрированных ~~на одном центре~~. Ч. 3. Градиент электрического поля (ГЭП) 1σ-молекулярной орбитали и эффект Штернхаймера. Grabenstetter James E., Whitehead Michael A. One-centre-expansion self-consistent-field (OCE—SCF) calculations on HCl. Part 3. Electric field gradient (EFG) of the 1σ molecular orbital and the Sternheimer effect. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1978, Part 2, 74, № 1, 1—10 (англ.)

Методом ССП в базисе ф-ций, центрированных на одном центре (атоме хлора), проведен расчет молекулы HCl. Впервые в гамильтониан включен член, учитывающий взаимодействие квадрупольного момента ядра с электронами. Поправка к энергии основного состояния HCl составила $\sim 10^{-9}$ ат. ед. Рассмотрена поляризация электронов первой электронной оболочки Cl^-, обусловленная наличием внешних электронов и квадрупольного момента у ядра Cl (эффект Штернхаймера). Показано, что включение в гамильтониан взаимодействия квадру-

Ф. 1978 N 7

польного момента ядра с электронами не дает существенных изменений величины ГЭП, в то время как использование базисных ф-ций p- и d-типов с большими экспоненц. параметрами приводит к поправке, составляющей ~1% от экспериментально найденной величины ГЭП. Ч. II см. Grabenstetter J. E., Whitehead M. A., «Canad. J. Chem.», 1976, 54, 1948. Ю. Г. Абашкин

.1

HCl⁻

1978

расчет резонансн. состоян.

7Д185. Расчет резонансных состояний HCl^- методом конфигурационного взаимодействия. Goldstein E., Segal G. A., Wetmore R. W. Configuration interaction calculation on the resonance states of HCl^-. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 1, 271—279 (англ.)

Методом конфигурационного взаимодействия (КВ) рассчитаны потенц. кривые для основного состояния молекулы HCl и шести низших состояний HCl^-. Расчеты производились в гауссовом базисе с включением диффузных *s*- и *p*-ф-ций на атоме Cl и поляризационных ф-ций на атоме H. Для каждого состояния выбирался набор из нескольких (1—9) исходных конфигураций (ИК) и учитывались все однократно и двукратно возбужденные по отношению к ИК конфигурации. Диагонализация матриц КВ больших (до 16 699) порядков производилась методом деления всех конфигураций на основные и второстепенные с приближенным учетом вклада

Ф. 1978 N 7

последних. При расчетах HCl^- использовались МО, полученные в ССП-расчете HCl, что допустимо вследствие слабого возмущения молекулы рассеиваемым электроном. Рассмотрено распределение электронной плотности для ряда термов HCl^- и изучено влияние расширения базиса на это распределение; этот анализ подтверждает резонансный характер исследованных состояний. Результаты расчетов сравниваются с эксперим. данными. Диссоциативный захват электрона с образованием Cl^- связан с возбуждением в состояния $1^2\Sigma^+$, а также $2^2\Sigma^+$, HCl^-; образование H^- связано с возбуждением в состояния $4^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$.

О. В. Сизова

HCl⁻

1978

88: 96757t **Configuration interaction calculation on the resonance states of HCl⁻.** Goldstein, E.; Segal, G. A.; Wetmore, R. W. (Dep. Chem., Univ. Southern California, Los Angeles, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(1), 271-9 (Eng). Configuration interaction and the stabilization method is used to compute potential energy curves for the resonant states of HCl⁻, an important example of electron-polar mol. scattering. Resonant states that dissoc. to H⁻ + Cl and Cl⁻ + H are found as well as those that dissoc. to H + Cl + e^-. These curves provide an interpretation of the known exptl. observations on this system.

кв.мех. расчет

C.A. 1978, 88, N14

HCl⁻

расчет резонансн. состояний

х, 1978, N 12

12 Б20. Расчет резонансных состояний HCl^- методом конфигурационного взаимодействия. Goldstein E., Segal G. A., Wetmore R. W. Configuration interaction calculation on the resonance states of HCl^-. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 1, 217—279 (англ.) 1978

Процедурой стабилизации в рамках метода конфигурац. взаимодействия, рассчитаны энергии резонансных состояний HCl^- симметрии $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$. Использован расширенный базисный набор сгруппированных гауссовых функцией *s*- и *p*-типа, дополненный диффузными *s*- и *p*-орбиталями на Cl и поляризац. *p*-орбиталями на H. На 1-м этапе расчета методом ССП определены собственные векторы для основного состояния $^1\Sigma^+$ нейтр. молекулы HCl, к-рые затем использованы для построения многоконфигурац. волновых ф-ций HCl^-. Для понижения порядков вековых ур-ний при расчете состояний HCl^- применена техника разделения, согласно к-рой в энергетич. матрице выделяется блок (размерности $\leqslant 50$), построенный на наиболее важных конфигурациях, а при учете вкладов от остальных конфигураций (численностью до нескольких тысяч) с помощью техники разделения ограничиваются вычислением только диагональных матричных элементов гамильтониана. Показано, что в большинстве случаев практиче-

ние, что использованный при расчете потенциа

ски можно проводить расчеты с вековыми ур-ниями размерности <20. Результаты вычислений приведены в области межъядерных расстояний R от 0,9 до 3 А для основного состояния HCl, 5 резонансных состояний симметрии $^2\Sigma^+$ и одного состояния симметрии $^2\Pi$ иона HCl^-, соотв-щих диссоциац. пределам $H+Cl^-$ и H^-+Cl. Низшее резонансное состояние $1^2\Sigma^+$ имеет барьер высотой 0,28 эв над энергией изолированных атомов H и Cl^- при $R=1,7$ А. Поскольку этот факт не согласуется с эксперим. данными по электрон-молек. рассеянию, сделан вывод о том, что погрешности вычислительной процедуры для энергии изолированных атомов, обязанные в основном неадекватному базису гауссовых орбиталей, составляют величину порядка 0,3 эв. Погрешности при расчетах молек. состояний оцениваются величинами в несколько сотых электронвольт. Приведены аргументы в пользу того, что рассчитанные энергии действительно относятся к резонансным состояниям. Отмечено, что наличие больших весов определенных конфигураций не является достаточным признаком стабильности корней векового ур-ния в случае полярных молекул типа HCl. В кач-ве критерия того, что найденные при помощи процедуры стабилизации энергии описывают резонансные состояния, предлагается использовать принцип устойчивости энергии по отношению к варьированию базисного набора. (А. В. Немухин

HCl

15 Б78. Вращательные возбуждения молекул HF и HCl при столкновении с электронами. Giantur-co F. A., Rahman N. K. Rotational excitations of HF and HCl molecules by collision with electrons. «J. Phys.», 1978, B11, № 4, 727—740 (англ.) 1978

Изучены процессы столкновения молекул HF и HCl с электронами при энергиях ниже порогов колебательного возбуждения. Для описания вращательных энергетич. состояний молекул HF и HCl принято приближение жесткого ротатора. При взаимодействии мишени с электроном учтены два станд. локальных вклада: взаимодействие электрона с ядрами молекулы и с усредненным полем электронов молекулы, причем это поле рассчитано при помощи электронных волновых ф-ций мишени методом ССП ЛКАО МО. Асимптотич. поведение эффективного потенциала описано членами, ответственными за дипольное и квадрупольное взаимодействие, а также за молек. поляризуемость. Обсуждена энергетич. зависимость упругого и неупругого поперечных сечений рассеяния при учете 5 низших вращательных уровней и полученные результаты сопоставлены с данными расчетов др. авторов для молекулы HCl. Отмечен ряд особенностей процессов рассеяния в системе, в к-рой в кач-ве мишени используется молекула HF. А. С. Махнев

вращат. возбужд. при столкнов.

Х, 1978, N15

HCl

расчет мол. постоянных

22 Б10. **Неэмпирические эффективные потенциалы остовов для расчетов молекул. II. Сравнение с расчетами с учетом всех электронов и модификации процедуры.** Hay Jeffrey P., Wadt Willard R., Kahn Luis R. Ab initio effecti - core potentials for molecular calculations. II. All-electron comparisons and modifications of the procedure. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 7, 3059—3066 (англ.)

Рассчитаны потенциальные кривые (ПК) основных состояний молекул HF, HCl, LiCl, F_2, Cl_2. Взаимодействие атомных остовов с валентными электронами описано эффективными потенциалами (ЭП), введенными ранее (см. пред. сообщ. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, 3826). Независимо проведены расчеты тех же ПК с учетом всех электронов каждой молекулы. В обоих случаях использованы идентичные базисные наборы сгруппированных гауссовых функций. При построении молек. волновых функций рассматривались два варианта: двухконфигурац. функции метода обобщенных валентных схем и многоконфигурац. функции поляризац. приближения метода конфигурац. взаимодействия. Сравнение результатов вычислений в валентном приближении (с

(+3) LiCl F_2 Cl_2

Х.1978, N22

введением ЭП) и в рамках полного неэмпирич. расчета (с учетом всех электронов) показало, что оба расчета хорошо согласуются между собой для HF, HCl и LiCl, но ПК молекул F_2 и Cl_2 в приближении ЭП получаются с большими ошибками (энергия связи завышена на 50%). Проанализированы возможные источники ошибок и показано, что основную погрешность вносит переоценка энергии притяжения *p*- и *d*-компонентами ЭП в области больших расстояний. Предложены процедуры, позволяющие исправить этот недостаток ЭП. Показано, что с новыми потенциалами результаты расчетов в валентном приближении согласуются с точными расчетами с погрешностью в несколько ккал/моль в области вблизи равновесных межъядерных расстояний для всех рассмотренных молекул.

А. В. Немухин

HCl
CH_3Cl
C_2H_5Cl

A_H^+

(+2) ☒

Ф-1978,№9

9Д120. Корреляции для сродства к протону хлористых алкилов. Jorgensen William L. Proton affinity correlations for alkyl chlorides. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 53, № 3, 525—529 (англ.)

1978

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах гуассовских ф-ций ОСТ-3ГФ и ОСТ-44-31ГФ рассчитаны величины сродства к протону (СП) для HCl 141,1 ккал/моль (опыт 141), CH_3Cl 167,7 (160), C_2H_5Cl 177,1 (172), $(CH_3)_2CHCl$ 184,5, $(CH_3)_3CCl$ 194,0 (приведены значения по ОСТ-3ГФ, лучше согласующиеся с опытом), а также их потенциалы ионизации. Геометрия указанных молекул и их протонированных форм оптимизировалась. Для указанных систем, а также ряда циклич. и бициклич. хлоридов (всего 13 молекул) проведены расчеты по МЧПДП/3. Получены хорошие линейные корреляции величин СП с суммами зарядов на Cl и H^+ в $RClH^+$ как для неэмпирич. расчетов, так и для расчетов по МЧПДП/3. Для ациклич. хлоридов также обнаруживается удовлетворительная корреляция СП с потенциалами ионизации и полярными константами σ^* заместителей. Рассчитанные энергии взаимодействия R^+ с HCl хорошо согласуются с эксперим. данными. Отмечено, что стабильность протонированных третичных алкилхлоридов мала (4,3 ккал/моль для $(CH_3)_3CClH^+$).

В. Л. Лебедев.

Б85-1

XI-5835 1978

HCl

CH_3Cl

C_2H_5Cl

(d.p.)

88: 126630r **Proton affinity correlations for alkyl chlorides.** Jorgensen, William L. (Dep. Chem., Purdue Univ., West Lafayette, Indiana). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 53(3), 525-9 (Eng). Ab-initio SCF calcns. with min. STO-3G and extended 44-31G basis sets were done on HCl, MeCl, EtCl, Me_2CHCl, and Me_3CCl, and their protonated analogs. MINDO/3 calcns. are also reported for these species and a variety of cyclic and bicyclic chlorides. The much closer agreement with expt. for the STO-3G proton affinities than for the 44-31G values is in sharp contrast to the results for 1st-row bases (J. E. Del Bene, 1976). An excellent correlation was found between both the STO-3G and MINDO/3 proton affinities (PA's) and the charge on the ClH fragment in $RClH^+$. For the acyclic chlorides, correlations of PA's with the polar substituent const. σ^*, and the ionization potentials are also reasonable. The calcd. carbonium ion-HCl interaction energy for Me_3CClH^+ indicates that protonated tertiary chlorides are no more than marginally stable in the gas phase.

(+2)

C.A., 1978, 88, 118

HCl
$(HCl)_2$

оптика 7511 1978

14 Б274. Исследование HCl и $(HCl)_2$, изолированных в матрице, с использованием импульсного ЯМР. Kohl James E., Semack Myron G., White David. Pulsed NMR studies of matrix isolated HCl and $(HCl)_2$. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 12, 5378—5385 (англ.)

С использованием импульсного ЯМР исследованы протонные спектры HCl в матрице ^{40}Ar (мольная доля HCl составляла от 0,003 до 0,02) при т-рах 5—25° K. Спектр состоит из дублета Пейка от димера $(HCl)_2$, наложенного на центральную лоренцеву линию от мо-

спектр в матрице.

(+1)

Ж:1979,N14

номера HCl. Форма лин[illegible] мономера в пределах погреш[illegible] эксперимента не зависит от конц-ии HCl и т[illegible] указывает на достижен[illegible] высокой степени [illegible]анности и преимущественную заселенность ос[illegible] состояния изолированных молекул. Второй мо[illegible]нт л[illegible] мономера, обусловленный в основном внутрим[illegible] дипольным взаимодействием протон—хлор, на порядок больше теор. модельной оценки, что указывает на большую анизотропию окружения, чем это предполагалось ранее. Из анализа дублета следует, что потенциал вращения димера вокруг межъядерной оси имеет о[illegible], по крайней мере, 3-го порядка. Наблюдаемое расщ[illegible]ление дублета согласуется со структурой димера, при к[illegible]ой один из атомов H лежит на линии, соединяющей атомы Cl, (линейная H-связь), а угол H—Cl—H составляет ~122°. Из измеренного уширения дублета получена оценка времени спин-решеточной релаксации хлора (150 μсек.)

М. М. Гофман

HCl

19 Ж

Kollman Peter A

метод описания распред. зарядов.

J. Amer. Chem. Soc. 1978, 100, N10, 2974-84

см. H_2O-III

1978

HCl

расчёт геометрии, Si

Li W.K., et al.,

„Chem. Phys. Lett.", 1978, 57, N2, 211-13.

● (см. CCl_2; III)

HCl

параметры линий

13 Б229. Параметры линий HCl, полученные из одновременного анализа нескольких спектров. Lin C. L., Niple E., Shaw J. H., Uselman W. M., Calvert J. G. Line parameters of HCl obtained by simultaneous analysis of spectra. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1978, 20, № 6, 581—591 (англ.)

Предложен метод восстановления положений, ширин и интенсивностей линий из спектров, записанных с конечным разрешением (около 0,1 см$^{-1}$) при помощи фурье-спектрометра. Метод является модификацией ранее предложенного метода восстановления (Y. S. Chang, J. H. Sham, JQSRT, 1977, 18, 491) и основан на одновременном анализе нескольких спектров, записанных при различных конц-иях, либо при различных давл. газообразного образца. Возможности метода продемонстрированы на примере восстановления положений, ширин и интенсивностей линий 1—0 полосы HCl в смеси с N_2 по двум спектрам, записанным при общих давл. 50 и 700 мм. Положения линий определены с точностью около 0,005 см$^{-1}$. Ширины и интенсивности линий восстановлены с точностью ~5%. Полученные данные хорошо согласуются с ранее сообщенными значениями. Установлен сдвиг линий HCl из-за изменения давл. примесного газа N_2. С. Н. Мурзин

2.1979, №13

19/8

HCl 1978

Mo Otilia Y. M.,

кв. мех. расчет

Theor. chim. acta

1978, 47 (4), 263-73

(см. H_2O; Ц)

HCl

CO

(+)

1978

88: 110903w Potential function of a diatomic molecule. Makushkin, Yu. S.; Ulenikov, O. N. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1978, 44(1), 73-80 (Russ). A potential function for diat. mol. near equil. internuclear distance is proposed. The potential was used to calc. mol. parameters (spectroscopic consts.) of HCl and CO. The results agree well with exptl. data, they are also compared with theor. data obtained by other model potentials (e.g., Morse, Lippincott).

Ш. Н.

потенц. ф-ция

(+1)

С.А., 1978, 88, N16

НСе 1978

Надейкина П.А., Жиганский С.Л.

теор. и эксперим. химия, 1978, 14(6), 828-31.

потенц. кривые

(см. НF°; III)

HCl

HBr

HJ

1978

A_{H^+}

88: 79448a The proton affinities of the halogen acids Polley, Charles W.; Munson, Burnaby (Dep. Chem., Univ Delaware, Newark, Del.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys* 1978, 26(1), 49-60 (Eng). The exptl. redetd. proton affinities 135 ± 2, 140 ± 1, and 147 ± 2 kcal/mol for HCl, HBr, and HI resp., show the same trend as for the halogen atoms and alkyl halides. For the gas-phase reactions of the systems $HCl^+ + HCl$, $HCl^+ + HBr$, $HBr^+ + HCl$, $HBr^+ + HBr$, $H_2Cl^+ + HBr$, $CH_4^+ + CH_4$, $CH_4^+ + HCl$, $HCl^+ + CH_4$, and $CH_5^+ + HCl$, the rate consts. (in units of 10^{-10} cm^3/mol. s) detd. are k = 7.0 ± 0.2, 11.0 ± 0.2, 4.0 ± 0.2, 1.4 ± 0.1, 7.1 ± 0.2, 13 ± 1, 7.0 ± 0.5, 8.0 ± 0.8, and 7.7 ± 0.6, resp.

(+2) ⊠

C.A. 1978, 88 n 12

HCl

1979

10 Б813. Сродство к протону галоидоводородных кислот. Polley Charles W., Munson Burnaby. The proton affinities of the halogen acids. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1978, 26, № 1, 49—60 (англ.)

Ранее описанный импульсный масс-спектральный метод изучения ион-молек. р-ций («J. Amer. Chem. Soc.», 1972, 94, 4726) использован для определения сродства к протону (СКП) молекул HCl, HBr и HJ, путем сравнения констант скоростей (k) р-ций переноса протона для изучавшихся молекул и молекул с известными значениями СКП. Обсуждаются механизмы ион-молек. р-ций в изучавшихся системах, получены значения СКП для HCl, HBr и HJ, равные соотв. 135±2; 140±1 и 147±±2 ккал/моль. Как и в случаях атомов галогенов и молекул алкилгалогенов значения СКП линейно уменьшаются с ростом потенциала ионизации. Определены значения k (10^{10}) р-ций $HCl^+ + HCl \rightarrow H_2Cl^+ + Cl$; $HCl^+ + HBr$; $HBr^+ + HCl \rightarrow H_2Cl^+ + Br$; $HBr^+ + HBr \rightarrow H_2Br^+ + Br$; $H_2Cl^+ + HBr \rightarrow H_2Br^+ + HCl$; $CH_4^+ + CH_4 \rightarrow CH_5^+ + CH_3$; $CH_4^+ + HCl$; $HCl^+ + CH_4$; $CH_5 + HCl \rightarrow H_2Cl^+ + CH_4$.

A_H^+

Ж: 1978, 11Б

равные при т-рах 50—75° соотв. 7±0,2; 11±0,2; 4±0,2; 1,4±0,1; 7,1±0,2; 13±1; 7,0±0,5; 8,0±0,8; (7,7±0,6) см³/сек. Полученные значения сравниваются с лит. расчетными и эксперим. значениями. Обсуждаются причины расхождения расчетных и эксперим. значений k.

И. О. Лейпунский

HCl

1978

(A$_H^+$)

6 Д395. Сродство к протону галогеноводородных кислот. Polley Charles W., Munson Burnaby. The proton affinities of the halogen acids. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1978, 26, № 1, 49—60 (англ.)

С помощью быстродействующего время-пролетного масс-спектрометра исследованы в газовой фазе реакции с участием галогеноводородных кислот (HX). На основе наблюдений за образованием продуктов взаимодействия HX с молекулами, обладающими известными величинами сродства к протону (PA), заново определены (в ккал/моль): PA(HCl) = 135±2, PA(HBr) = 140±1 и PA(HI) = 147±2. Наблюдаемое соотношение PA(HCl) < PA(HBr) < PA(HI) соответствует известным соотношениям: PA(Cl) < PA(Br) < PA(I), а также PA(CH_3X) < PA(C_2H_5X). Для газовых реакций при давлениях 0,002—0,02 мм рт. ст. типа $HX^+ + HY \rightarrow H_2X^+ + Y$ (I) или $X + H_2Y$ (II) или $HX + HY^+$ (III), где H, Y = Cl, Br, J определены константы скорости (в ед. 10^{-10} см^3/мо-

Ф; 1978, N6

лекул·сек): $HCl^+ + HCl \rightarrow$ I, II (7,0±0,2); $HCl^+ + HBr \rightarrow$ $\rightarrow$ I, II, III (11,0±0,2); $HBr^+ + HBr \rightarrow$ I, II (1,4±0,1); $HBr^+ + HCl \rightarrow$ II (4,0±0,2); $H_2Cl^+ + HBr \rightarrow$ I, II (7,1± ±0,2); $CH_4^+ + CH_4 \rightarrow$ I, II (13±1); $CH_4^+ + HCl \rightarrow$ I, II (7,0±0,5); $CH_5^+ + HCl \rightarrow$ I, II (7,7±0,6); $HCl^+ + CH_4 \rightarrow$ II, I (8,0±0,8). Большинство констант скоростей этих реакций оказалось ниже значений, которые могут быть получены на основании теории взаимодействия иона с полярной молекулой, откуда следует, что для перечисленных реакций частота обмена атомом водорода или протоном ниже частоты столкновений. Г. А. Вомпе

HCl

1978

Park, Jae H.

From Sci.Tech.Aerosp.Rep.

I978, I6(3), Abstr.No.N78-I2608.

атлас
и.к. спектр

см. H_2O-III

HCC Chemical 6791 1978

Ramakrishna M. et al.

M. M (неназ).
Грецов.

Chem. Phys. Lett.
1978, 57 (4), 557-60

HCl

Оттиск 6773 1978

расчет равнов. геометрии

Schaerfenberg P.
Theor. chim. acta,
1978, 49, 115-22.

HCl

отпуск 6583 1978

спектр к. р.

1 Д370. Экспериментальное и рассчитанное сечения для уширения давлением вращательных линий спектра комбинационного рассеяния HCl. Van der Peijl G. J. Q., Frenkel D., Van der Elsken J. Experimental and calculated cross sections for pressure broadening of pure rotational Raman lines of HCl. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 56, № 3, 602—607 (англ.)

Получен вращательный спектр (комб. рас.) газообразного HCl в смеси с Ar при 295° K и давл. 10—20 атм, возбужденный линией 514 нм лазера Ar^+ мощностью 8 вт, с разрешением 0,26 $см^{-1}$. Для определения истинной ширины линий измеряемый контур сравнивался с результатом свертки аппаратной ф-ции с двумя лоренцевыми кривыми, соответствующими вращательным линиям молекул $H^{35}Cl$ и $H^{37}Cl$. В исследованном интервале давлений ширина линий линейно зависит от плотности Ar. Вычисленные из эксперим. данных сечения уширения шести первых линий сравнены с рассчитанными в предположении различных потенциалов взаимодействия, ранее предложенных другими авторами для пары HCl—Ar. Библ. 16. М. Тонков

ф. 1979, N 1

отнести 7859 1979

HCl+

9 Д147. **Эффективный гамильтониан для двухатомных молекул. Неэмпирические расчеты параметров HCl+.** Brown J. M., Colbourn E. A., Watson J. K. G., Wayne F. D. An effective Hamiltonian for diatomic molecules. Ab initio calculations of parameters of HCl. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 74, № 2, 294—318 (англ.)

Рассмотрена структура эффективного гамильтониана (ЭГ) для двухатомной молекулы, находящейся в электронном состоянии, промежуточном между случаями *a* и *b* по Гунду. Неэмпирич. расчеты параметров ЭГ для HCl+ выполнялись с помощью программы ALCHEMY в различных слэтеровских базисах; для каждого электронного состояния производился отдельный вариац. расчет в однодетерминантном приближении. Значения параметров, рассчитанных теоретически, и определенных эмпирически на основе данных Шислея и др. (Sheasley W. D. et al., «J. Mol. Spectr.», 1973, 47, 420), отличаются друг от друга не более чем на 5%. Расчеты позволили оценить вклады различных порядков от отдельных электронных состояний: основной вклад дает терм $A^2\Sigma^+$, но вклады от четырех состояний конфигурации ... $\sigma^2\pi^2\sigma^*$ в ряде случаев превосходят компоненту, связанную с указанным термом. О. В. Сизова

Квант. хим.

Ф. 1979, N9

HCl+

кв. мех-расчет

Оптика 7859

16 Б25. Эффективный гамильтониан для двухатомных молекул. Неэмпирические расчеты параметров для HCl+. Brown J. M., Colbourn E. A., Watson J. K. G., Wayne F. D. An effective Hamiltonian for diatomic molecules. Ab initio calculations of parameters of HCl+. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 74, № 2, 294—318 (англ.)

Получен эффективный гамильтониан для двухатомной молекулы, относящейся к промежут. между *a* и *b* случаю связи по Гунду. Вывод гамильтониана проведен в три этапа. Первоначально с помощью контактного преобразования по электронным переменным осуществлен переход к оператору для одного электронного состояния, затем выполнено контактное преобразование по колебательным переменным, и, наконец, спин-вращательное контактное преобразование, приводящее к эффективному вращательному оператору. Получены выражения для параметров эффективного оператора, удобные для неэмпирич. расчетов, а также ряд

Оптика 7859

Х.1979,№16

соотношений между параметрами, возникающих при различных предположениях о характере взаимодействия электронных состояний. Введенный эффективный оператор пригоден для нахождения значений параметров по спектроскопич. данным. В кач-ве примера изучено состояние $X^2\Pi$ молекулы HCl^+. Неэмпирич. расчет проведен в одноконфигурац. приближении с использованием двухэкспонентного базиса слейтеровских функций. Рассчитаны вклады 1- и 2-го порядков в параметры спин-орбитального и спин-вращательного взаимодействия. Различие в неэмпирич. и эксперим. параметрах составляет ~5%. Отмечено, что хотя основным возмущающим состоянием для состояния $X^2\Pi$ является $A^2\Sigma^+$, вклады от др. состояний сравнимы по величине.

Б. И. Жилинский

HCl+ Оптика 7859 1979

(90) 127925u An effective Ha nian for diatomic molecules. Ab initio calculations of para rs of hydrogen chloride(1+) ion. Brown, J. M.; Colbourn, E. A.; Watson, J. K. G.; Wayne, F. D. (Chem. Dep., Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 74(2), 294-318 (Eng). The form of the effective Hamiltoniam was examd. for a diat. mol. in an electronic state intermediate between the Hund cases (*a*) and (*b*). The derivation was done in three stages: (*i*) an electronic contact transformation removes the effects of matrix elements that couple different electronic states; (*ii*) a vibrational contact transformation removes matrix elements coupling different vibrational states; and (*iii*) a spin-rotational-contact transformation removes indeterminacies in the final Hamiltonian. Expressions are given for the effective parameters resulting from these

Кв. мех. расчет

C.A. 1979, 90, N16

transformations. The Hamiltonian is in a convenient form for fitting to exptl. data; the formulas for the parameters assist in comparison with ab-initio calcns. The relations are given between the present parameters and those employed in the computer program of R. N. Zare, et al., (1973); this makes it possible to correct a previous misunderstanding (B. and J. K. G. W., 1977) regarding the value of the spin-rotation parameter γ_e in the $X^2\Pi$ state of HCl^+. The parameters obtained for this state are compared with ab-initio calcns. that take account of first-order perturbations within the state and second order perturbations from the $A^2\Sigma^+$ state and from the four states of the configuration...$\sigma^2\pi^2\sigma^*$. The $A^2\Sigma^+$ state is the dominant perturber, but the contributions from the other states are not negligible; their contribution to γ_e is larger than the first-order contribution.

HCl

1979

Caccioatore M., et al.

ceramic
gaseous.

ISPC-4. 4th Int. Symp. Plasma Chem.: Top. Mat. Interact Low Press. Plasmas. Solid Surfaces, Round Table Therm. Plasma Process. Zurich, 1979. Conf. Proc. Vol. 2. "Zurich, s.a., 556-61.

Call. H2-NT

HCl (ж)

1979

2 Б246. О колебательных спектрах жидкого HCl.
Chesnoy J., Ricard D., Flytzanis C. On the vibrational spectra of liquid HCl. «Chem. Phys.», 1979, 42, № 3, 337—344 (англ.)

Колебат. спектр

Измерены интенсивности в ИК-спектре и сечения КР для жидкого HCl (85 K). Изучены контуры фундаментальной полосы поглощения и первого обертона. Найден сдвиг частоты HCl по сравнению с газовой фазой в сторону низких частот на 101 $см^{-1}$ и увеличение интенсивности основной полосы в 5,5 раза. На основании идентичности контуров после ИК-поглощения и КР заключено, что вращение в жидком HCl не является свободным. Показано, что сдвиг частоты HCl не может быть объяснен только эффектом локального поля и дипольным вкладом в энергию межмолек. взаимодействия. Отмечено, что, с другой стороны, увеличение интенсивности основной полосы хорошо объясняет-

Х. 1980. №2

ся на базе эффекта локального поля и учета индуцированного дипольного момента. Показано, что ангармоничность сохраняется при переходе от газовой фазы к жидкости. Сделан вывод, что первый обертон связан не с переходом с уровня $v=0$ на $v=2$, а с одновременным переходом двух молекул с уровня $v=0$ на уровень $v=1$. Вывод подтвержден правильным порядком величины интенсивности, рассчитанной для обертона. Контур линии первого обертона, на к-ром наблюден провал, интерпретирован на базе диссипативного взаимодействия в рамках теории релаксации Редфилда.

С. Б. Осин

HCl
DCl
HBr
DBr

1979

12 Д384. Свойства водородных кислот, помещенных в азотную матрицу. Исследование путем эксперимента и с помощью приближения статического поля. Girardet C., Maillard D., Schriver A., Perchard J. P. Properties of the hydracids trapped in a nitrogen matrix. Experimental and static field approximation study. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 3, 1511—1529 (англ.)

Методом матричной изоляции в матрице N_2 получены спектры поглощения HCl, DCl, HBr и DBr в далекой и ближней ИК-областях. Спектральная ширина щели составляла в далекой области 2 $см^{-1}$, в ближней 0,6 $см^{-1}$. Приведены спектры и таблицы частот наблюдавшихся полос, проведена идентификация полос. Проанализированы спектральные проявления мономеров кислот и димеров типа $(HX)_2$, (HX—DX) и (HCl—

спектр
поглощ.

(+) ☒

ф 1949 ж

HBr). Вычислены частоты полос с использованием приближения статич. поля и учетом углового распределения молекул матрицы вокруг HX-включения. Кроме того проведен, расчет частот с учетом динамики кристалла матрицы. Установлено, что учет динамики кристалла N_2 значительно улучшает согласие между рассчитанными и измеренными значениями частот. Библ. 37.

Н. Филиппов

HCl

HF

Спектр поглощ.

Оптика 8635

1979

91: 219786y The electronic spectra of hydrogen chloride and hydrogen fluoride. Douglas, A. E.; Greening, F. R. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Can. J. Phys.* 1979, 57(10), 1060-61 (Eng). The absorption spectra of HCl and HF were photographed at high dispersion in the vacuum UV region. In the HCl spectrum, many new band systems were identified and 18 vibrational levels of the ionic $B^1\Sigma$ state were obsd. The $B^1\Sigma$ state interacts strongly with the Rydberg states. Although many bands were analyzed, much of the HCl spectrum remains unassigned. Analyses of bands assocd. with the lowest discrete $^1\Pi$–$X\Sigma$ band systems of HF are presented together with the anal. of 2 $^1\Pi$–$X^1\Sigma$ band systems which lie between the 1st and 2nd ionization limit. The spectrum of HF is very complex and little of it was analyzed even though the spectral lines are sharp and well resolved. The theor. problems in understanding the spectra of HCl and HF are discussed.

ВР-XI-6247

(+1) ☒

С.А. 1979, 91, 126

HCl
HF
М. М.
(+1)
ВФ-XI-6247
Отписи 8635
Ф. 1980. №3

1979

3 Д354. **Электронные спектры молекулы HCl и HF.** The electronic spectra of HCl and HF. Douglas A. E., Greening F. R. «Can. J. Phys.», 1979, 57, № 10, 1650—1661 (англ.; рез. франц.)

Спектры поглощения молекул HCl (DCl) и HF в ВУФ-области сфотографированы с дисперсией 0,18—0,72 Å/мм. В спектре HCl обнаружено и идентифицировано много новых систем полос. Для состояния HCl ($B^1\Sigma$) определено положение 18 колебательных уровней. Показано, что состояние $B^1\Sigma$ сильно взаимодействует с ридберговскими состояниями. Отмечено, что большинство линий в спектре HCl остались неидентифицированными. Спектр поглощения HF чрезвычайно сложен. В спектре проанализированы полосы, обусловленные переходами в низшие дискретные состояния $^1\Pi$ и $^3\Pi$ и две полосы $^1\Pi—X^1\Sigma$, расположенные между первым и вторым потенциалами ионизации HF. Несмотря на то, что линии в спектре HF резкие и хорошо разрешены, большинство из них, как и в спектре HCl, осталось неидентифицированными. Рассмотрены трудности теоретич. описания спектров HCl и HF. Библ. 17.

В. С. Иванов

HCl omnicon 7781 1979

Ford T.A.

u.m. J. Chem. Education, 1979, 56 (1), 57-58

HCl

1979

Fantucci P., et al.

(4.11) Mol. Phys., 1979, 37 (3)
831 – 41

(сет. CH4; III)

HCl

1979

Hovis Floyd E., etal.

Применение лазеров в атом. молекулярн. и ядер. физ. Тр. 1-й Всес. школы, Вильнюс, 1978. М., 1979, 374-91.

перенос энергии и лазерная фотохимия

см. СНу — III

1979

HCl

Lorenz W., et al.

расчет по-
тенц. поверхн.
и зарядов.

Z. phys. Chem. (DDR)
1979, 260, N 5, 881-9.

см. H_2 - III

HCl

1979

Macdonald J. N., etal

обзор по ик. спектр.

Mol. Spectrosc. Vol. 6. London, 1979, 1-45.

● (см HNO) III

HCl

HBr

оттиск 7907 1979

9 Д427. Низколежащие резонансные состояния в HCl и HBr. Mathur D., Hasted J. B. Low-lying resonant states in HCl and HBr. «Chem. Phys. Lett.», 1979, **62**, № 1, 86—88 (англ.)

спектры пропускания электронов

Измерены спектры пропускания электронов молекул HCl и HBr в диапазоне энергий от 0,25 до 1,15 эв. Соответствующие ф-ции пропускания имеют резонансную структуру вблизи порога возбуждения трех колебательных уровней нейтральных молекул в их основном электронном состоянии. Полученные данные сопоставлены с результатами исследований других авторов по рассеянию электронов на HCl и HBr, а также с теоретическими потенц. кривыми HCl. О. В. Сизова

(+1) ☒

Ф. 1979, N9

HCl

21 Б28. Низкоэнергетические резонансные состояния HCl и HBr. Mathur D., Hasted J. B. Low-lying resonant states in HCl and HBr. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 62, № 1, 86—88 (англ.)

В области энергий относит. движения электронов и молекул от 0,25 до 1,15 эв измерены спектры пропускания электронов газообразными HCl и HBr. Подробное описание аппаратуры и методики эксперимента приведено в пред. сообщ. («Chem. Phys.», 1978, 34, 29). Отмечено наличие изломов на графиках функций пропускания при энергиях ниже 1 эв, что соответствует максимумам на графиках полных сечений в области 0,73 эв. Предположено, что наблюдаемая структура спектров связана с образованием резонансных Σ-состояний отриц. молек. ионов, потенциальные кривые к-рых имеют минимумы при межъядерных расстояниях, бо́льших результатов расчетов резонансных состояний системы чем равновесные расстояния нейтр. молекул. Анализ HCl^-, выполненных Тейлором, Голдстейном и Сегалом («J. Phys.», 1977, B10, 2253), подтверждает интерпретацию структуры на графике функции пропускания как обусловленной колебательными уровнями Σ-резонансов.

А. В. Немухин

Отчет 7907

Расчет Е

Х 1979, №21

HCl

HBr

2 Б244. **Изучение галоидоводородов, изолированных в одноатомных матрицах. I. Спектры в ближней инфракрасной области и агрегатные структуры.** Maillard D., Schriver A., Perchard J. P., Girardet C. Study of hydracids trapped in monatomic matrices. I. Near infrared spectra and aggregate structures. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 1, 505—516 (англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения $H^{35}Cl$, $D^{35}Cl$, HBr, DBr и их смесей различного состава в матрицах из аргона и криптона при т-рах 10—30 К. Измерения проводили в широком интервале конц-ий при разбавлениях от 1000 до 20. Исследование структуры полимеров осуществляли путем измерения изотопных сдвигов и анелирования матриц. В области мономеров идентифицированы *Q*-линии молекул при низких разбавлениях. Появление в спектрах запрещенных переходов объяснено влиянием искажения решетки на изолированные молекулы. Как для HCl, так и для HBr наблюдены полосы димеров. Для них принято несимметричное

(+1)

x 1080.112

строение, в к-ром фрагменты HX (X=Cl, Br) связаны слабой H-связью и расположены приблизительно ортогонально. Более высокочастотная полоса (2855,5 $см^{-1}$ для HCl и 2550,3 $см^{-1}$ для HBr) соответствует менее возмущенной молекуле, обладающей электронодонорными свойствами, более низкочастотная полоса димера (2817,8 $см^{-1}$ для HCl и 2486,4 $см^{-1}$ для HBr) — молекуле-акцептору. Неэквивалентность молекул HX в димерах охарактеризована различными значениями силовых постоянных и производных дипольного момента. Для тримера $(HX)_3$ предложено циклич. строение симметрии C_{3h} с тремя эквивалентными фрагментами HX, ориентированными вдоль сторон равностороннего треугольника. Полосы тетрамеров появляются только после аннелирования матриц. Для них принято циклич. плоское строение симметрии C_{4h}. Отмечено, что никаких др. полимеров при используемых разбавлениях в спектрах не наблюдается, даже после аннелирования. На основании прецизионного измерения частот заключено, что дейтерозамещение слегка изменяет диагональные силовые постоянные HX в полимерах (DX сильнее возмущает соседнюю молекулу, чем HX). Из анализа спектров смесей HCl—HBr и HCl—HJ определена относит. электронодонорная способность, уменьшающаяся в ряду HJ, HBr, HCl.

С. Б. Осин

18 393 Изучение агрегации изолир. молекул. матрицей 1979

HCl

HBr

и.к. спектр

сил. пост.

(+1)

Р.1980.N1

trapped in monatomic matrices. I. Near infrared spectra and aggregate structures. Maillard D., Schriver A., Perchard J. P., Girardet C. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 1, 505—516 (англ.)

Получены ИК-спектры (2900—1730 см$^{-1}$) молекул $H^{35}Cl$, $D^{35}Cl$, HBr и DBr, а также их смесей, изолированных в аргоновой и криптоновой матрицах при т-рах 10—30° К и отношении конц-ий в матрице от 1000 до 20. Проведен анализ структуры Q-полос перечисленных молекул. Наблюдаемая структура Q-полос изолированных молекул согласуется с искажением их первоначальной конфигурации при матричной изоляции. Идентифицированы полосы несимметричных димеров, в которых молекулы обладают свойствами донора и акцептора электрона. Предположено, что тримеры имеют циклич. структуру и принадлежат к типу симметрии C_{3h}. В результате отжига матрицы происходит стабилизация циклических плоских тетрамеров с симметрией C_{4h}. Показано, что дейтерирование практически не меняет силовые постоянные связей агрегированных форм изученных молекул. Библ. 17.

1979

HCl (ж)
DCl (ж)
HBr (ж)

4 Д476. Рассеяние света галогенидами водорода и дейтерия. Light scattering from hydrogen and deuterium halides. Morales P., Andreani C. «Phys. Lett.», 1979, A74, № 5, 335—336 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения жидких HCl, DCl, и HBr в области основных колебаний при т-рах от —115 до 40° С. В предположении малости колебательно-вращательных взаимодействий по эксперим. спектру вычислены вращательные корреляционные ф-ции. Из анализа их формы при разных т-рах и из температурного поведения времени вращательной релаксации сделан вывод, что при низких т-рах переориентации молекул связаны со структурной релаксацией исследованных жидкостей. При высоких т-рах (начиная с ~0 °) основным механизмом возбуждения вращательного движения являются столкновения молекул. Активационный барьер для вращения составляет ~2 ккал/моль для хлоридов и 0,9 ккал/моль для HBr, что объясняется причинами стерич. характера и различиями в прочности водородной связи. Библ. 11.

М. Тонков

И.к. спектр. поглощ.

(+2)

Ф. 1980 № 4

CeH

Аннотация 8901

1979

Onwada K.

Спектрохим. асты.

Spectrochim. acta,
1979, A35, 1953-57.

HCl

1979

9 Д496. Анизотропные флуктуации плотности вокруг пробной молекулы, растворенной в аргоне и криптоне. Spiekerman R. J. N., Van der Elsken J. Anisotropic density fluctuations around a probe molecule dissolved in fluid argon and krypton. «Chem. Phys. Lett.», 1979, **62**, № 3, 579—583 (англ.)

и. к. спектр

Исследовался вращательный ИК-спектр HCl, растворенного в криптоне при т-ре 226° К. Определены полуширины и сдвиги первых 10 линий при 5 значениях плотности криптона. Плотность криптона изменялась вдоль критич. изотермы от плотности газа до плотности, лежащей выше критич. точки (0,304—1,47 г/см^3). На основании эксперим. данных рассчитан энергетич. спектр флуктуаций плотности криптона, который оказался близок к ранее полученному энергетич. спектру флуктуаций аргона. Отмечено количеств. расхождение между энергетич. спектрами аргона и криптона, полученными с помощью данных по уширению и сдвигу вращательных линий, и спектрами, рассчитанными методом молекулярной динамики. Н. Филиппов

Об. 1979, N9

НСЕ | Опись 8098 | 1979.

Инженева. Времр. линий спектр хемилюминесценции

Tamagake K., Setsert D.

J. Phys. Chem., 1979, 83 (8), 1000-1007

HCl

1979

Tiedemann P. W., et al.

(A_{H^+})

J. Chem. Phys., 1979, 71 (2), 605-609.

(см. HF; III)

HCl

1979

Вадам П.И. и др.

Ж. структур. химии,
1979, 20, №2, 31-37.

расчет
электр
стр-ра

(см. H_2O; III)

HCl
DCl

79.99

17 Б202. Колебательная релаксация изолированных в матрице HCl и DCl. Wiesenfeld Jay M., Moore C. Bradley. Vibrational relaxation of matrix-isolated HCl and DCl. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 2, 930—946 (англ.)

Проведены измерения времен жизни возбужденной лазером колебательной ИК-флуоресценции HCl и DCl в тв. Ar-матрицах. Изучена зависимость скорости релакса-

и.к. спектр. флуоресц.

(+1) ☒

Ж. 1979, №17

ции состояний $V=1,2$ HCl от конц-ии и т-ры и $V=2$ DCl при малых конц-иях от т-ры. Сделан вывод, что скорость безызлучательной релаксации определяется внутримолек. $V \rightarrow R$ передачей энергии с последующей быстрой конверсией в фононы решетки. Показано, что увеличение скорости релаксации HCl ($y=1$) в матрицах с $M/A < 1000$ обусловлено $V \rightarrow V$ передачей энергии на низколежащие уровни димеров в режиме быстрой миграции. Отсутствие флуоресценции HCl в N_2 и O_2 матрицах объясняют слишком быстрой релаксацией на колебательные уровни матрицы. Из измерений интегральных интенсивностей установлено, что момент перехода мономера HCl в Ar-матрице почти не искажается по сравнению с газом.

О. Г Гаркуша