

Ас - инерт. газ

$AlCl_3 \cdot Ar.$ Bp - 859 - XV 1972
Companion A.L.

Di, ce
геометр.
мол.
взаимо-
молеку-
л. св. рас-
св.

J. Chem. Phys.,
1972, 57, 1807-8.

HeAl⁺

[ommuu 11506] 1981.

Laurenzi B. J.

Laurenzi
(20)

J. Chem. Phys., 1981, 74 (3)
1840-51.

H₃AlNe [OM-23267]

1985

H₃AB (cnpym.)

Schmidt M.W.,
Gordon M.S.

Can. J. Chem., 1985,
63, N 7, 1609-1615.

2_{AB}, 2_{AH},
LHAB,
2_{AB},
meop.
acrim

H_3AlAr [om 23267] 1985

H_3AB (mpykm) Schmidt M. W.,
Gordon M. S.
 r_{AB} , r_{AH} ,
LHAB,
 r_{AB} ,
neop.
pacem
Can. J. Chem., 1985,
63, N 7, 1609-1615.

AlAs (Om. 26887) 1987

Gardner J. M., Lester M. I.,

crystal,
 BZ^{+}

Chem. Phys. Lett., 1987,
137, N4, 301-305.

ArHe⁺

1987

У 12 Б1023. Неэмпирические расчеты методом конфигурационного взаимодействия пяти состояний ArHe⁺. Ab initio configuration interaction calculations for five states of ArHe⁺. Liao M. Z., Balasubramanian K., Chapman D., Lin S. H. «Chem. Phys.», 1987, 111, № 3, 423—429 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны потенциальные кривые пяти низших электронных состояний $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Sigma^+$ и $D^2\Pi$ иона ArHe⁺. Для Ar использован релятивистский эффективный остовный Pt. Базис слейтеровских ф-ций включал четырехэкспонентные наборы на He и трехэкспонентные наборы на Ar, дополненные поляризац. ф-циями p - и d -типа соотв. Полученные

М.П.

Х. 1987, 19, № 12

равновесные межъядерные расстояния и энергии возбуждения согласуются с известными для состояний X , A и B эксперим. данными; энергии диссоциации несколько завышены. Потенциальные кривые аппроксимированы выражением $C_4/r^4 + C_6/r^6 + C_8/r^8$; полученные на их основе поляризуемости атомов He и Ag близки к эксперим. значениям. А. А. Сафонов

AlAr

1987

20 Б4463. Резонансная фотоионизационная спектроскопия комплексов тугоплавких металлов с инертными газами. Комплекс AlAr. Resonant photoionization spectroscopy of refractory metal—rare gas complexes: AlAr. Gardner John M., Lester Marsha I. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 137, № 4, 301—305 (англ.)

На установке с импульсным сверхзвуковым молек. пучком исследованы комплексы AlAr, полученные при импульсном испарении Al под действием второй гармоники импульсного лазера на ИАГ—Nd³⁺ с модуляцией добротности в поток Ar, истекающий через сверхзвуковое сопло в вакуум. Комплексы AlAr регистрировали квадрупольным масс-спектрометром с лазерной фотоионизацией, либо методом резонансно-усиленной многофотонной ионизации (РУМФИ) типа 1+1. Вращательно-колебат. переходы, приписанные комплексу AlAr, видны в спектре РУМФИ в обл. резонансной линии Al(²S_{1/2} ← ²P_{1/2}). На основе анализа колебат. прогрессий для ²Σ⁺-состояния AlAr определены нижние оценки энергий связи состояний X²Π_{1/2} и B²Σ⁺, равные соотв. 133 и 373 см⁻¹.

В. Е. Скурат

спектр, М. А.

X.1987, 19, N 20

AlAr

1987

107: 67228b Resonant photoionization spectroscopy of refractory metal-rare gas complexes: aluminum. Gardner, John M.; Lester, Marsha I. (Dep. Chem., Univ. Pennsylvania, Philadelphia, PA 19104-6323 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 137(4), 301-5 (Eng). Mass-resolved resonance-enhanced multiphoton ionization was used to probe AlAr complexes in the spectral region near the $\text{Al}^2\text{S}_{1/2}-^2\text{P}_{1/2}$ transition. Anal. of a vibrational progression in the AlAr $^2\Sigma^+$ state provides lower limits for binding energies in the $\text{X}^2\text{H}_{1/2}$ and $\text{B}^2\Sigma^+$ states of 133 and 373 cm^{-1} resp.

$\text{X}^2\Pi_{1/2}, \text{B}^2\Sigma^+,$
 D_0

C.A. 1987, 107, N8

NeAl⁺

ArAl⁺

(Om. 29409)

1988

109: 29175r Theoretical emission spectra of neon-aluminum and argon-aluminum molecular monocations (NeAl⁺ and ArAl⁺) in the vacuum ultraviolet region. Sato, Nobuyuki; Nanbu, Shinkoh; Iwata, Suehiro (Fac. Sci. Technol., Keio Univ., Yokohama, Japan 223). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 146(3-4), 275-9 (Eng). NeAl⁺ and ArAl⁺, were studied via *ab initio* MO CI calcs. The 1st excited singlet state ¹II of both ions form an excimer, and its estd. radiative lifetime is ~1 ns. The simulated emission spectra from *v'* = 0 peaks at 57,900 cm⁻¹ for NeAl⁺ and 53,800 cm⁻¹ for ArAl⁺. The broad emission spectrum obsd. in an Ar glow discharge using an Al cathode is most likely the excimer band from hot ArAl⁺.

meop. pacut,
crekmp & byp

C. A. 1988, 109, N 4

NeAl⁺
ArAl⁺

(м.п.)

ДТ. 29409

1988

10 Л199. Теоретические спектры испускания NeAl⁺ и ArAl⁺ в ВУФ-области. Theoretical emission spectra of NeAl⁺ and ArAl⁺ in the vacuum ultraviolet region. Sato Nobuyuki, Nanbu Shinkoh, Iwata Suehiro. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 146, № 3—4, 275—279 (англ.)

Выполнены неэмпирич. МО КВ расчеты для NeAl⁺ и ArAl⁺. Первое возбужденное синглетное состояние ¹Π обоих ионов является устойчивым, с радиационным временем жизни ~1 нс. Рассчитаны спектры излучения ионов из состояния ¹Π, v=0. Отмечено, что наблюдавшееся в эксперименте в послесвечении аргона из разряда с Al-катодом протяженная структурная полоса обусловлена, по-видимому, излучением ArAl⁺ из состояния ¹Π.

В. С. Иванов

ф. 1988, 18, N 10

AlAr
AlKr
AlXe

Om. 32609

1989

2 Б1059. Межатомные потенциалы для вандерваальсовых комплексов AlAr, AlKr и AlXe. Interatomic potentials for van der Waals complexes of group 13 metal atoms: AlAr, AlKr, and AlXe / Callender C. L., Mitchell S. A., Hackett P. A. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 10.— С. 5252—5261.— Англ.

Из спектров лазерно индуцированной флуоресценции низкот-рных молек. пучков атомарного Al в инертных газах определены спектроскопич. постоянные электронных состояний $X_{1,2}^2\Pi_{1/2, 3/2}$ и $B^2\Sigma_{1/2}^+$ вандерваальсовых комплексов алюминия: AlAr, AlKr и AlXe. Найдено, что основные электронные состояния изученных комплексов достаточно хорошо описываются потенциальными кривыми Морзе. В возбужденных электронных состояниях при больших межъядерных расстояниях отмечены заметные отклонения от кривых Морзе. Проведен сравнит. анализ мультиплетного расщепления и стабильности электронных состояний $X_{1,2}$ комплексов алюминия и индия. В. Б. Павлов-Веревкин

и.и.

X. 1990, №2.

AlAr

AlKr

AlXe

no metal.

sp-ue OCH.

$X^2\Pi_u$ bond $B^2\Sigma$

COCM

C.A. 1989, III,
N/O

OM 32609

1989

- 111: 84436t. Interatomic potentials for van der Waals complexes of group 13 metal atoms: aluminum-argon, aluminum-krypton, and aluminum-xenon (AlAr, AlKr, and AlXe). Callender, C. L.; Mitchell, S. A.; Hackett, P. A. (Div. Chem., Natl. Res. Council Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(10), 5252-61 (Eng). Interat. potential parameters for the ground $X_{1,2}^2\Pi_{1/2,3/2}$ and excited $B^2\Sigma_{1/2}^+$ states of jet-cooled van der Waals complexes of Al atoms with rare gases were detd. from fluorescence excitation and emission spectra. Vibrational numbering in the B states was established from isotopic and rotational broadening of fluorescence excitation line shapes. Bond distances were estd. by comparison with analogous states of alkali rare gas mols., and by modeling obsd. relative emission intensities with calcd. Franck-Condon factors. Morse potentials adequately described the data for the ground states, but for the excited states there were indications of departures from Morse functions at large internuclear distances. Dissocn. energies D_e were estd. from Birge-Sponer extrapolations. Multiplet splittings in Al-rare gas complexes are compared to those in In-rare gas complexes, and are discussed in terms of an empirical treatment of spin-orbit coupling, which assumes that the spin-orbit coupling const. for the mol. is the same as that for the atom. The ground X_1 state of each Al-rare gas mol. is more stable than that of the analogous In complex, whereas the spin-orbit excited X_2 state is less stable. This is explained by the greater mixing between the X_1 state and the dissociative $A^2\Sigma_{1/2}^+$ state for In over Al, caused by the greater spin-orbit coupling const. for the heavier metal.

AlAr

Om 36763

1990

112: 168283z Spectroscopy of the aluminum-argon (AlAr) van der Waals complex: rotationally resolved $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$ electronic transitions. McQuaid, Michael J.; Gole, James L.; Heaven, Michael C. (Sch. Phys., Georgia Inst. Technol., Atlanta, GA 30332 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 92(5), 2733-9 (Eng). Rotationally resolved spectra were recorded for 6 bands of the AlAr $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$ transition. Vibrational and rotational consts. derived from these spectra were used to det. the upper and lower state potential energy curves. The accuracy of these potentials was assessed through calcs. of the spectroscopic consts. and Franck-Condon factors. Dissocn. energies of $D_e' = 440\text{-}8^{+35} \text{ cm}^{-1}$ and $D_e'' = 180\text{-}10^{+40} \text{ cm}^{-1}$ were obtained for the B and X states, resp. The interaction between $X^2\Pi_{1/2}$ and the low-lying $A^2\Sigma^+$ state was characterized by anal. of the ground-state lambda doublet splitting.

 $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$

u.n., do

c.A. 1990, 112, N 18

AlAr

UM 36763

1990

23 Б1203. Спектроскопия вандерваальсова комплекса AlAr: вращательно разрешенный электронный переход $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$. Spectroscopy of the AlAr van der Waals complex: Rotationally resolved $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$ electronic transitions / McQuaid Michael J., Gole James L., Heaven Michael C. // J. Chem. Phys.— 1990.— 92, № 5. — С. 2733—2739.— Англ.

Разрешена вращат. структура шести полос перехода $B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$ вандерваальсова комплекса AlAr. Для верхнего и нижнего электронных состояний получены след. наборы молек. постоянных соотв.: (в см^{-1}) $B_e = 0,0727$ и $0,11242$, $\alpha_e = 0,0036$ и $0,011$, $\gamma_e(B^2\Sigma^+) = -0,00052$, $\omega_e = 31,6$ и $84,5$; $\omega_e x_e = 1,51$ и $4,88$, $\omega_e y_e(B^2\Sigma^+) = 0,51$, $\omega_e z_e(B^2\Sigma^+) = -0,045$; $D_e = 180$ и 440 , $D_0 = 165$ и 399 , $R_e = 3,79$ и $3,05$. Анализ вращат. структуры основного состояния позволил сделать вывод о наличии Λ — удвоения (происходит из-за вз-вия между состояниями $X^2\Pi_{1/2}$ и $A^2\Sigma^+$). В $B^2\Sigma^+$ -состоянии поляризуемость AlAr больше, чем в основном состоянии, что объясняет увеличение глубины потенциальной ямы при уменьшении межъядерного расстояния при переходе $B \leftarrow X$.

M. N.

X. 1990, N 23.

Г. В. Чертихин

AlNe⁺

1990

Wong Ming Wah,
Radom L.

et. n. J. Phys. Chem. 1990. 94,
N2. C. 638-644.

(C. r. ● PN; III)

AlAr₁₂

1992

117: 24650m Is aluminum-argon (AlAr₁₂) icosahedral? Estrin, Dario A.; Liu, Li; Singer, Sherwin J. (Dep. Chem., Ohio State Univ., Columbus, OH 43210-1173 USA). *J. Phys. Chem.* 1992, 96(13), 5325-31 (Eng). The energy of AlAr₁₂ with a central aluminum atom is significantly lowered when the cluster distorts from icosahedral symmetry. A range of scenarios is possible, including loss of all symmetry. The Born-Oppenheimer surface for AlAr₁₂ is estd. using combined Hartree-Fock simulated annealed techniques. The stability of high symmetry configurations and the possibility of nonadiabatic effects are explored in an approx. model based on a linear expansion in just three electronic states that are degenerate in icosahedral symmetry.

смысленно,
неоп. падем

C. A. 1992, 117, N2

AlKr

1992

7 17 Б1096. Спектроскопические характеристики состояний $X^2\Pi_{1/2}$, $B^2\Sigma_{1/2}$ и $H^2\Sigma_{1/2}$ AlKr. Spectroscopic characterization of the $X^2\Pi_{1/2}$, $B^2\Sigma_{1/2}$, and $H^2\Sigma_{1/2}$ states of AlKr /Fu Zhenwen, Massick S., Kaup J. G., d'Azy O. B., Brockenridgo W. H. //J. Chem. Phys. —1992.—97, № 3.—С. 1683—1691.—Англ.

Ван-дер-ваальсовы комплексы AlKr, образующиеся при лазерном испарении металла в импульсную сверхзвуковую струю смеси Ar+Kr, исследованы методом лазерной ФЛ. Для возбуждения ФЛ использовали перестраиваемый импульсный лазер на красителе с удвоением частоты (ширина полосы возбуждения $0,12\text{ см}^{-1}$). Измерена вращат. структура полос $v'=3-9, 11-v''=0$ перехода $B^2\Sigma_{1/2}^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$ и полос $v'=3-9-v''=0$ перехода $H^2\Sigma_{1/2}^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$. Верхние электронные состояния коррелируют с атомами Al ($3s^24s^{12}S$) и Al($3s^25s^{12}S$) соотв. и Kr(1S). Абс. колебат. нумерация полос определена на основании анализа изотопных сдвигов по криптону ($^{84,86}\text{Kr}$). Рассчитанные положения начал переходов (ν_{00})

М.П.

X. 1993, N 17

и молек. постоянных $^{27}\text{Al}^{84}\text{Kr}$ (в см^{-1} , R_e в $\text{\AA}$): состояние $B^2\Sigma^+$ 24581,69, $\omega_e=99,16$, $\omega_e x_e=1,75$, $\omega_e y_e=-0,030$, $B_e=0,09015$, $\alpha_e=0,00124$, $\gamma_e=-9,1 \cdot 10^{-5}$, $R_e=3,03$, $D_0=961$, $D_e=1000$; состояние $H^2\Sigma^+$ 36668,25, $\omega_e=93,44$, $\omega_e x_e=2,01$, $B_e=0,08597$, $\alpha_e=0,00136$, $\gamma_e=-6,5 \cdot 10^{-5}$, $R_e=3,10$, $D_0=1216$, $D_e=1262$; состояние $X^2\Pi_{1/2}$ $B_e=0,0559$, $\alpha_e=0,0023$ (рассчитаны из B_0 , ω_e и $\omega_e x_e$ с использованием лит. данных), $R_e=3,84$, $Q_0=0,0087$ (параметр Λ -удвоения). Для состояний $B(V=0-11)$ и $H(V=0-9)$ построены потенциальные кривые РКР (приведены $G(v)$, B_v и поворотные точки). Большая величина R_e для более сильно связанного состояния H объясняется пересечением потенциальных кривых этого состояния и отталкиват. валентного состояния $^2\Sigma^+$, коррелирующего с $\text{Al}(3s^23d)+\text{Kr}(^1S)$. Положение отталкиват. состояния $A^2\Sigma^+$ (на 1000 см^{-1} выше $v_x=0$), коррелирующего с $\text{Al}(3s^23p^{1/2}P_{3/2})+\text{Kr}$, оценено на основании анализа Λ -расщепления в состоянии X . Библ. 38. В. М. Ковба



AlKr

1992

117: 139911a Spectroscopic characterization of the $X^2\Pi_{1/2}$, $B^2\Sigma_{1/2}$, and $H^2\Sigma_{1/2}$ states of aluminum-krypton (AlKr). Fu, Zhenwen; Massick, Steven; Kaup, John G.; D'Azy, Odile Benoist; Breckenridge, W. H. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(3), 1683-91 (Eng). The AlKr van der Waals complex was characterized by laser-induced fluorescence spectroscopy in a supersonic free jet. Rotationally resolved spectra were recorded for eight bands of the $\text{AlKr}(B^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2})$ transition and for seven bands of the $\text{AlKr}(H^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2})$ transition. Rydberg-Klein-Rees potential-energy curves were detd. for the $B^2\Sigma^+$ and $H^2\Sigma^+$ states, using vibrational and rotational spectroscopic consts. derived from the spectra. The interaction between the $X^2\Pi_{1/2}$ ground state and the low-lying repulsive $a^2\Sigma^+$ state was characterized by anal. of the Λ doubling in the ground state. Equil. bond lengths were obtained for the X, B, and H state, and dissocn. energies for the B and H states. The fact that the more strongly bound $H^2\Sigma^+$ state has a larger r_e value than the $B^2\Sigma^+$ state was rationalized by postulating an avoided potential curve crossing between the $H^2\Sigma^+$ state and a repulsive valence $2\Sigma^+$ state correlating with $\text{al}(3s^23d) + \text{Kr}$.

dasept 98.

AlKr mp paper.

$$H^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi_{1/2}$$

$$B^2\Sigma^+ \leftarrow X$$

© A. 1992, 117, N 14

1992

AlAr, AlAr₂
AlKr, AlAr₃

19 Б1268. Спектроскопия AlAr и AlKr от 31000 см^{-1} до ионизационного предела. Spectroscopy of AlAr and AlKr from $31\,000\text{ см}^{-1}$ to the ionization limit /Heidecke S. A., Fu Z., Colt J. R., Morse M. D. //J. Chem. Phys. — 1992. — 97, № 3. — С. 1692—1710. — Англ.

Измерены спектры резонансной двухфотонной ионизации (РДИ) охлажденных в струе молекул AlAr и AlKr, образующихся при лазерном испарении металла в поток инертного газа (Ar или смесь Ar и 5% Kr). Возбуждение в состояния с энергией выше $31\,000\text{ см}^{-1}$ осуществлялось импульсным перестраиваемым лазером на красителе с удвоением частоты. В кач-ве детектора использовали и время-пролетный масс-спектрометр. Регистрировали зависимость тока определенных ионов как ф-цию частоты возбуждающего излучения. Величины адиабатич. потенциалов ионизации (ПИ), определенные (с точностью $\pm 2\text{ см}^{-1}$) по энергии пороговой однофотонной ионизации с поправкой на сдвиг полем, составили: $\text{ПИ}(\text{AlAr})=47418,5$ и $\text{ПИ}(\text{AlKr})=46944,7\text{ см}^{-1}$ (5,8791 и 5,8204 эВ). Наблюдаемую в спектрах малоинтенсивную

и.п.

X. 1993, N 19

сателлитную компоненту, сдвинутую на $\sim 80 \text{ см}^{-1}$ в длинноволновую сторону от порога, связывают с ионизацией компоненты $X^2\Pi_{3/2}(3p)$ спин-орбитального расщепления основного электронного состояния. Определена величина спин-орбитального расщепления в состоянии $X^2\Pi$ $80,9 \pm \pm 2 \text{ см}^{-1}$ (AlAr) и $78,4 \pm 4 \text{ см}^{-1}$ (AlKr). Оценены адиабатич. ПИ AlAr₂ и AlAr₃ (соотв. 46660,3 и 46295 см^{-1}). В спектрах

РДИ в области 31700—32500 см^{-1} наблюдали переходы $^2\Sigma^+, ^2\Pi, ^2\Delta(3d) \leftarrow X_1^2\Pi_{1/2}(3p)$ (возбуждение $3d \leftarrow 3p$ -типа) с разрешенной колебат. структурой (возб. состояния даны в порядке уменьшения энергии возбуждения). Обнаружены также диполь-запрещенные переходы в состояния $^2\Pi(4p)$ и $^2\Sigma^+(4p)$, проявляющиеся за счет вз-вия соотв. с состояниями $^2\Pi(3d)$ и $^2\Sigma^+(3d)$. В интервале 37 000—37 600 см^{-1} наблюдали систему полос перехода $H^2\Sigma^+(5s) \leftarrow X_1$, несколько выше по энергии (37900—38900 см^{-1}) — системы полос, связанные с переходами $4d \leftarrow 3p$ типа, $^2\Sigma^+, ^2\Pi, ^2\Delta(4d) \leftarrow X_1$; в области 41200—42200 см^{-1} выделены прогрессии полос переходов $^2\Sigma^+, ^2\Pi, ^2\Delta(5d) \leftarrow X_1$ и $^2\Sigma^+(6s) \leftarrow X_1$. При более высокой энергии, наблюдали переходы в состояния $^2\Sigma^+, ^2\Pi, ^2\Delta(nd)(n=6-43100-44100, n=7-44600-45200, n=8-45300-45900, n=9-45900-46400 \text{ см}^{-1})$ и малоинтенсивные диполь-запрещенные переходы в состояния $^2\Delta, ^2\Pi(5f)$ и $^2\Pi(6p)$ (42700—43500 см^{-1}).

Для перечисленных состояний молекул AlAr и AlKr приведены полученные значения $T_0, \omega_e, \omega_e x_e, D_0$. Энергии диссоциации (D_0 в см^{-1}) молекул AlAr и AlKr в состоянии $X_1^2\Pi_{1/2}(3p)$ равны соотв. $122,4 \pm 4$ и $194,7 \pm 0,8$. Оценены $D_0(\text{Al}^+ - \text{Ar})$ и $D_0(\text{Al}^+ - \text{Kr})$ (соотв. $982,3 \pm 5$ и $1528 \pm \pm 2 \text{ см}^{-1}$). Библ. 35.

В. М. Ковба

1992

AlAr₂ } (3, A cross-ops pacu, Dr)

AlKr }

AlAr₂ }
AlAr₃ } (3, over
Kr)

117: 180931v Spectroscopy of aluminum-argon and aluminum-krypton (AlAr and AlKr) from 31,000 cm⁻¹ to the ionization limit. Heidecke, Scott A.; Fu, Zhenwen; Colt, John R.; Morse, Michael D. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(3), 1692-710 (Eng.). Spectra of jet-cooled AlAr and AlKr were collected over the range from 31,000 cm⁻¹ to the ionization limit, using the technique of resonant two-photon ionization spectroscopy with mass spectrometric detection. Adiabatic ionization potentials were accurately measured for both mols., and were estd. for AlAr₂ and AlAr₃. The spin-orbit splittings in the X²Π ground state were detd. for both AlAr and AlKr, and ground-state bond strengths were accurately measured as $D_0[\text{AlAr}, X_1^2\Pi_{1/2}(3p)] = 122.4 \pm 4 \text{ cm}^{-1}$ and $D_0[{}^{27}\text{Al}-{}^{84}\text{Kr}, X_1^2\Pi_{1/2}(3p)] = 194.7 \pm 0.8 \text{ cm}^{-1}$. These values were also combined with the measured ionization potentials to derive $D_0(\text{Al}^+-\text{Ar}) = 982.3 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$ and $D_0(\text{Al}^+-\text{Kr}) = 152.5 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$.

C. A. 1992, 117, N 18

Al·Ar

1993

119: 169701r Mass-analyzed threshold ionization spectroscopy of aluminum-argon. Willey, K. F.; Yeh, C. S.; Duncan, M. A. (Department of Chemistry, University of Georgia, Athens, GA 30602 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 211(1), 156-60 (Eng). Mass-analyzed threshold ionization (MATI) spectroscopy is applied for the first time to a metal van der Waals complex, Al-Ar. The exptl. configuration for MATI uses a time-of-flight mass spectrometer, oriented perpendicular to the mol. beam axis, without modification of any components. The vibrationally resolved spectrum yields a frequency of $\omega_e' = 67 \text{ cm}^{-1}$ for the ground state of $\text{Al}^+\text{-Ar}$, and a value of $\Delta G_{1/2}' = 39 \text{ cm}^{-1}$ for neutral Al-Ar.

$$\omega_e' = 67 \text{ cm}^{-1}$$

$$\Delta G_{1/2}' = 39 \text{ cm}^{-1}$$

C.A. 1993, 119, N 16

Ar AlH

1995

/ 122: 173124j Fluorescence excitation spectroscopy and dynamics of the $\text{ArAlH}(\text{X } ^1\Sigma^+, \text{A } ^1\Pi)$ van der Waals complex. Hwang, Eunsook; Dagdigian, Paul J. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MA 21218-2685 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(6), 2426-39 (Eng). The laser fluorescence excitation spectrum of the ArAlH van der Waals complex, in the vicinity of the $\text{A } ^1\Pi\text{-X } ^1\Sigma^+$ (0,0) band of diat. AlH , is reported. This species was prepd. in a pulsed free jet by 193 nm multiphoton dissocn. of trimethylaluminum seeded in Ar/He . Both rotationally resolved and diffuse bands of the ArAlH complex were obsd. Rotational anal. were carried out for most of the sharp bands; both perpendicular ($P' = 1 \leftarrow P'' = 0$) and parallel ($P' = 0 \leftarrow P'' = 0$) transitions were found. The bending and van der Waals stretch vibrational quantum nos. were assigned with the help of the calcd. $\text{ArAlH}(\text{X,A})$ vibrational energies reported in the accompanying paper [M. Yang, S. Gregurick, M. H. Alexander, and P. J. Dagdigian, *J. Chem. Phys.* 102, 2413 (1995)]. Unambiguous assignments for all the obsd. sharp bands (except one very weak band), including four hot bands originating from the first excited bend-stretch level of the $\text{ArAlH}(\text{X})$ complex, have been made.

($\text{X } ^1\Sigma^+, \text{A } ^1\Pi$)

C.A. 1995, 122, N14

ALH₂

1995

Partridge H., Baerckli-
cher Ch. W. Jr.; et al.

No.

Chem. Phys. Lett. 1995,
246(1, 2), 33-9.



(cell, ALH₂; 11)

Ar AlH

1995

122: 197506m Theoretical study of the interaction of $\text{AlH}(X^1\Sigma^+, A^1\Pi)$ with Ar: potential energy surfaces and bend-stretch levels of the $\text{ArAlH}(X,A)$ van der Waals complex. Yang, Moonbong; Alexander, Milliard H.; Gregurick, Susan; Dagdigian, Paul J. (Dep. Chem. and Biochem., Univ. Maryland, College Park, MA 20742-2021 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(6), 2413-25 (Eng). MR-CI potential energy surfaces (PES's) are reported for the interaction of Ar with the AlH radical in its ground ($X^1\Sigma^+$) and first singlet excited ($A^1\Pi$) electronic states. To assist in the assignment of the van der Waals bend-stretch vibrational quantum nos. in the accompanying exptl. spectroscopic study of the ArAlH complex [E. Wang and P. J. Dagdigian, *J. Chem. Phys.* 102, 2426, (1995)], slightly modified versions of these PES's have been employed to calc. the vibrational energy levels of the $\text{ArAlH}(X,A)$ van der Waals complex, both within the adiabatic bender model and in full variational calcns. Addnl., the band strengths for electronic transitions out of the ground and first vibrationally excited level of $\text{ArAlH}(X)$ have been calcd. for comparison with the relative band intensities measured by Hwang and Dagdigian.

модем.
радем
структур,
смадеах.

C.A. 1995, 122, N 16

ArAlH

1995

№ 20 Б1243. Спектроскопия возбуждения флуоресценции и динамика вандерваальсова комплекса $\text{ArAlH}(X^1\Sigma^+, A^1\Pi)$. Fluorescence excitation spectroscopy and dynamics of the $\text{ArAlH}(X^1\Sigma^+, A^1\Pi)$ van der Waals complex / Hwang E., Dagdigan P. J. // J. Chem. Phys. — 1995. — 102, № 6. — С. 2426—2439. — Англ. *и.и.*

Методом индуцированной лазером флуоресценции в области частот $23350\text{—}23700\text{ см}^{-1}$ измерена колебательно-вращательная структура электронного спектра вандерваальсова комплекса $\text{ArAlH}(X^1\Sigma^+, A^1\Pi)$ в свободно расширяющейся молекулярной струе. Определены спектроскопич. постоянные полос, времена жизни возбуждения, относит. интенсивности и энергии связи. Библ. 58.

С. Н. Мурзин

М.А.

№ 1995, N 20

Ar AlH

1995

18 Б1210. Теоретическое исследование взаимодействия $\text{AlH}(\text{X}'\Sigma^+, \text{A}'\Pi)$ с Ar. Поверхности потенциальной энергии и уровни деформационно-валентных колебаний ван-дер-ваальсова комплекса $\text{ArAlH}(\text{X}, \text{A})$. Theoretical study of the interaction of $\text{AlH}(\text{X}'\Sigma^+, \text{A}'\Pi)$ with Ar: Potential energy surfaces and bend—stretch levels of the $\text{ArAlH}(\text{X}, \text{A})$ van der Waals complex / Yang Moonbong, Alexander Millard H., Gregurick Susan, Dagdigian Paul J. // J. Chem. Phys. — 1995. — 102, № 6. — С. 2413—2425. — Англ.

М. А.

Методом configuraц. взаимодействия с учетом возбуждений от множества исходных конфигураций рассчитаны потенциальные поверхности комплекса ArAlH в основном и возбужденном электронном состояниях. С полученными потенциалами в рамках различных моделей колебаний найдены уровни колебательной энергии комплекса, сопоставленные с эксперим. результатами. Вычислены также силы полос электронных переходов для основного и первого возбужденного колебательных состояний комплекса. Библ. 58.

А. В. Немухин

X. 1996, N 18

AlNe

1998

128: 223234s Experimental and theoretical study of the AlNe complex. Yang, Xin; Dagdigan, Paul J.; Alexander, Millard H. (Department of Chemistry, The Johns Hopkins University, Baltimore, MD 21218-2685 USA). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(9), 3522-3530 (Eng), American Institute of Physics. The laser fluorescence excitation spectrum of the AlNe complex, in the vicinity of the Al at. 3d-3p and 5s-3p at. transitions, is reported. Transitions out of the $v = 0$ vibrational levels of both lower-state spin-orbit levels, $X_1 \ ^2\Pi_{1/2}$ and $X_2 \ ^2\Pi_{3/2}$, to vibrational levels of the C $^2\Delta$, D $^2\Pi$, and H $^2\Sigma^+$ AlNe electronic states were obsd. From observations of the onset of excitation to the Al(3d)+Ne dissocn. continuum, dissocn. energies for the various AlNe electronic states were detd. Ab initio calcns. of AlNe electronic states correlating with the ground Al(3p)+Ne at. asymptote were also carried out. The $X_1 \ ^2\Pi_{1/2}$ and $X_2 \ ^2\Pi_{3/2}$ binding energies computed using the calcd. AlNe($X \ ^2\Pi$, A $^2\Sigma^+$) potential energy curves were in reasonable agreement with the exptl. detns. The exptl. detd. dissocn. energy for the $X_2 \ ^2\Pi_{3/2}$ level is significantly larger than that of the ground $X_1 \ ^2\Pi_{1/2}$ level ($D_0 = 32.3 \pm 0.3$ and $14.1 \pm 0.3 \text{ cm}^{-1}$, resp.).

лазерная
флуоресценция

X²¹⁷, A²⁵⁺

номер 9-4

до 1 X^{2173/2}

и 1 X^{2171/2}

CA-1998, 128, N18

He II n^+

1999

Hughes J.M. et al.,

comp-na,
do, di,
meopem-
pacem

Eur. Phys. J. 1999,
6 (2), 185-192

(am.



He II n^+ ; III)

$Al^+ - Ar$

1999

(u.n.)
C.H. M.V.

131: 37216z Electronic spectroscopy of the $Al^+ - Ar$ complex. Lei, Jie; Dagdigian, Paul J. (Department of Chemistry, The Johns Hopkins University, Baltimore, MD 21218-2685 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1999, 304(5,6), 317-322 (Eng), Elsevier Science B.V.. The laser fluorescence excitation spectrum of the $Al^+ - Ar$ complex near the Al^+ ion $3s3p\ ^1P\ 3s^2\ ^1S$ resonance transition is reported. An excited-state ($v', 0$) progression and the (0, 1) hot band were obsd. Rotational anal. revealed that these bands involve an electronic transition from the $Al^+ - Ar\ X^1\Sigma^+$ ground state to the $^1\Sigma^+$ state correlating with the $Al^+(^1P) + Ar$ asymptote. Rotational consts. and upper-state vibrational consts. and the dissociation energy were detd. The spectroscopic consts. of the 2 obsd. $Al^+ - Ar$ electronic states are compared with those for neutral $AlAr$ states.



C.H., 1999, 131, N3