

By - F - H

FHCl, FHBr, FHJ (Cm. nos., ν_i) 1966

Evans J.C., Lo G.V-S. XI 1667

J. Phys. Chem., 1966, 70(2), 543-5.

Vibrational spectra of the
hydrogen dihalide ions III. FHCl,
FHBr and FHJ.

10



CA, 1966, 64, w7, 9084e

paper m.n. (HCO, FCO, HBrF) [1972]

Thomson E., Broatch D. A., XI-5315

Int. J. Quant. Chem., Symp., 1974, 48,
274-284 (auri).

An ab initio study of the electronic
structure and isotopic hyperfine
coupling constants of HCO, FCO, HBrF,
using different gaussian basis
sets.

Pre Gray, 1975, 6D165-

to

(91)

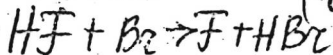
8

60412.3633

Ch, Ph, TC, MGU

2-10-76, 11.00 AM

86200



1976

4206

Douglas D.J., Polanyi J.C., Sloan J.J. Effect of changing reagent energy on reaction dynamics. VI. Dependence of reaction rate on vibrational excitation in ~~the~~ substantially endothermic reactions, $XH(v') + Y \rightarrow X + HY$. "Chem. Phys.", 1976, 13, N 1, 15-31 (англ.)

576 577

591 0599 ВИННИТИ

BzHF⁻

Ommeu 8387

1979

Ault Bruce I:

I.
(всего
исл. исс.)

J. Phys. Chem., 1979,
83 (7), 837-44.

●
(сч. HF₂⁻; III)

FHBz⁻

1982

Ault B.S.

Vi, zeoacetipus,
Структура

Accounts Chem. Res.,
1982, 15, N4, 103 -
-109.

( cur. HF₂⁻; III)

BzHF⁻

1982

Helt B.S.

Di, геометрия,
структура

Accounts Chem. Res.,
1982, 15, N4, 103 -
-109.

●
(cис. HF₂⁻; III)

HFBr,
HBrF

1982

Last I.

Pacrem
ser. 12,
40

Chem. Phys., 1982,
69, N 1-2, 193-203.

(see. ● HFCl, HClF; III)

FHBr⁻

1984

Larson J.W., McLendon
T.B.

Первая Inorg. Chem. 1984, 23
гуссоуная. (14), 2029-33.

(с. XHY; III)

FMBr⁻

IM 20776

1984

2 Б1086. Газофазные бигалогенидные и псевдобигалогенидные ионы. Определение энергий водородных связей в частицах XHY^- ($\text{X}, \text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{CN}$) методов ионного циклотронного резонанса. Gas-phase bihalide and pseudobihalide ions. An ion cyclotron resonance determination of hydrogen bond energies in XHY^- species ($\text{X}, \text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{CN}$). Larson J. W., McMahon T. B. «Inorg. Chem.», 1984, 23, № 14, 2029—2033 (англ.)

Методом спектроскопии ионного циклотронного резонанса исследованы газофазные р-ции переноса галоген-аниона между FHF^- , FHCi^- , ClHCi^- , ClHCN^- и ClHF^- и нейтр. молекулами различных в-в. Исходя из измеренных констант равновесия рассчитаны энергии связывания галогена (ЭГС), величины к-рых находятся в прямой зависимости со сдвигами частот колебаний связей (по сравнению с нейтр. галогенводородными к-тами). На основании полученных корреляций предсказаны величины ЭСГ для четырех неописанных ранее частиц (FHBg^- , FHI^- , ClHBg^- и ClHI^-). Использование эмпирич. корреляций прочности Н-связей позволило провести оценку этих величин для BrHBg^- , BrHCN^- и CNHCN^- , к-рые

X. 1985, 19, N2

FHY⁻, ClMBg⁻, ClMY⁻

составляют 20 ± 2 , 16 ± 2 и 20 ккал/моль соотв. Приведенный подход позволяет охарактеризовать и др. частицы типа XHY^- и дает направления для их синтеза путем матричной изоляции (Аг) в системах соль—нейтр. молекула. С целью исследования природы потенциальной поверхности ионов типа XHY^- проведены расчеты геометрии и энергий FHCi^- и FHCN^- с использованием программы Гауссиан 80 в базисе 4—31 ГФ. Оптимизация геометрии проводилась: для FHCi^- — варьированием расстояния H—Cl при фиксированных длинах связи F—H , а для FHCN^- — для фиксированных значений длин связей F—C и C—N . Для FHCi^- наблюдается один минимум в потенциальной энергии при расстоянии F—H близкому к расстоянию во фтористоводородной к-те и увеличенному по сравнению с HCl расстоянию H—Cl . Для FHCN^- найден один реальный минимум (для $\text{FH} \dots \text{CN}^-$) и плечо (для $\text{F}^- \dots \text{HCN}$). Этот результат свидетельствует о близости основностей анионов F^- и CN^- и низком барьере взаимного перехода между двумя указанными структурами ионов FHCN^- .

Д. В. Загоревский



FHBr⁻

Ом 32991

1989.

— 6 Д131. Неэмпирическое исследование иона FHBr⁻ методом КВ-НИК. Ab initio MRD CI study of the FHBr⁻ ion / Sannigrahi A. B., Peyerimhoff S. D. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 164, № 4.— С. 348—352.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом вкладов двухкратных возбуждений по отношению к набору исходных конфигураций (КВ-НИК) рассчитаны электронное строение, равновесные геометрич. параметры и энергии связей иона FHBr⁻. Применен базис АО гауссова типа, состоящий из 88 сгруппированных орбиталей, включающий диффузные и поляризационные ф-ции на всех атомах. Приведены данные, рассчитанные методом КВ-НИК в сочетании с процедурой отбора конфигураций; сделаны оценки полного учета корреляц. энергии с помощью ф-л Ландхофа—Давидсона. Проведено сравнение результатов расчетов с эксперим. данными; отмечено, что оценки энергии водородной связи с учетом поправки Ландхофа—Давидсона отличаются от эксперим. величины всего на 2,5 кДж/моль.

А. Ю. Ермилов

М.Н.

ср. 1990, № 6

FHBr⁻

М 32991

1989

10 Б1025. Расчет иона FHBr⁻ неэмпирическим методом КВ с несколькими исходными конфигурациями. Ab initio MRD Ci study of the FHBr⁻ ion / Sannigrahi A. B., Peyerimhoff S. D. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 164, № 4.— С. 348—352.— Англ.

Неэмпирическими методами ССП и КВ с несколькими исходными конфигурациями (НИК) с экстраполяцией к полному КВ по Лангхоффу—Дэвидсону проведены расчеты Пв потенциальной энергии для линейного иона FHBr⁻ вдоль координаты r (F—H) при фиксированных расстояниях R (F...Br). Базис АО включал 88 сгруппированных ГФ. Оптимизированные в расчетах ССП, КВ НИК и полном КВ расстояния r/R равны соотв. 1,739/3,44; 1,777/3,073 и 1,786/3,064 ат. ед. Энергия H—связи в полном КВ равна 73,6 кДж/моль (эксперимент 71,1 кДж/моль). Э. Д. Герман

М.П.

Х. 1990, N10.

FHBr⁻

(On 32 991)

1989

Хлорид
ион, рас-
чет

/112: 84625z Ab initio MRD-CI study of the hydrogen bromide fluoride ion(1-) (FHBr⁻). Sannigrahi, A. B.; Peyerimhoff, S. D. (Dep. Chem., Indian Inst. Technol., Kharagpur, 721 302 India). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 164(4), 348-52 (Eng). Ab-initio MRD-CI calcs. using an extended basis set were performed on the FHBr⁻ ion to det. its electronic structure and hydrogen bond energy. The equil. F-H/H...Br distances are predicted to be 1.739/3.344, 1.777/3.073 and 1.786/3.064 bohrs by the SCF, MRD-CI, and estd. full-CI calcs., resp. The calcd. (full-CI est.) hydrogen bond energy (73.6 kJ mol⁻¹) of FHBr⁻ is in good agreement with the corresponding exptl. value (71.1 kJ mol⁻¹).

C.A. 1990, 112, N10

В. К. Р. Ф.

(ИМ. 32477) 1989

Шевардина Л. Б., Тим-
чук В. М.,

Энергия
связи,
расчет

ж. Структур. Химии,
1989, 30, № 4, 17-22.