

FO

✓

FO

1948

Ylockler Y.

Температура диссоциации смеси азота
 J. Chem. Phys., 1948, 16, 604

Смешанное иониз., энергии диссоц. и ионизации
 для N_2, CO, NO, O_2, OF даны

FO: $W_0 OF_2$ $K = 0,56$ при $у_{F_2}$
 $Z = 1,41$ $\delta(F_2) = 2,6 eV$
 $\delta(eV) = 2,45$

CA, 1948. 6224a

I-3048

1949

FO (Do)

Glockler G.

J.Chim.Phys., 1949, 46, 103-105

Force constants and heats of
dissociation of diatomic molecules

C.A., 1950, 44, 9200a

HO, M, B.

ϕ v

OF₂ D(FO-F), D (O-F)

1957

OF (I)

A.P. (OF₂⁺, OF⁺, O⁺, F⁺, F⁻)

Dibeler V.H., Reese R.M., Franklin J.L.

J.Chem.Phys., 1957, 27, N 6, 1296-1257

()

Ionization and dissociation of oxygen difluoride by electron impact.

PX, 1958, 63443

FO

1958

Brown H-G

do

1-5555-1
B92-5555-1

p 9-13

Иркутск, св. 1.
и Иркутск, св. 2.
2х 45.

1959

F0

Berkowitz, J.

J. Chem. Phys., 30, 858.

D0

Корреляционная связь
двухатомных веществ?

III Lio

I-1769

I957

OF_2 D (FO-F), D(O-F)

OF (I)

A.P. (OF_2^+ , OF^+ , O^+ , F^+ , F^-)

Dibeler V.H., Reese R.M, Franklin J.L.

J.Chem.Phys., I957, 27, N 6, I296-I297

()

Ionization and dissociation of oxygen difluoride by electron impact.

PX, I958, 63443

M, H

RV

WF
OF

M. Green, J. W. Linnett [1960

J. Chem. Soc., 1960, 4955.

Показаны и молекулы, содержащие
некоторые другие группы.

Показаны, что такие молекулы
как WF и OF г.б. совершенно
не годятся.

OF

1965

Matrix infrared studies of OF compounds. I. The OF radical. Alfred Arkell, Russell R. Reinhard, and Lewis P. Larson (Texaco Res. Center, Beacon, N.Y.). *J. Am. Chem. Soc.* 87(5), 1016-20(1965)(Eng). The photolysis of OF₂ in a N or Ar matrix at 4°K. has produced the OF radical. The radical has fundamental ir absorption frequencies of 1028.5 cm.⁻¹ in Ar and 1025.5 and 1030.5 cm.⁻¹ in N. These frequency assignments were confirmed in parallel runs by using isotopic substitution. Some evidence is presented which explains the double absorption for OF in N in terms of 2 types of matrix sites.

RCJC

X12085

C.A. 1965: 62.9

9945 ab

1965

OF

спектр

X 2085

✓18 Б151. Инфракрасные спектры соединений OF в матрицах. 1. Радикал OF. Arkell Alfred, Reinhard Russell R., Larson Lewis P. Matrix infrared studies of OF compounds. I. The OF radical. «J. Amer. Chem. Soc.», 1965, 87, № 5, 1016—1020 (англ.)

Изучен ИК-спектр радикала OF, образующегося при фотолизе OF₂ в матрицах Ar и N₂ при 4° K. В аргоне основная частота колебаний радикала равна 1028,5 см⁻¹, а в азоте 1025,5 и 1030,5 см⁻¹. Приведены доводы в пользу того, что расщепление полосы в матрице азота вызвано наличием двух неэквивалентных положений, которые занимают радикалы. Отнесение полос подтверждено анализом спектра радикала из изотопозамещенной молекулы O¹⁸F₂, для которой в аргоне наблюдается полоса 997,4 см⁻¹, а в азоте 999,5 и 994,5 см⁻¹. Смещение составляет 31 см⁻¹, тогда как по теории ожидается 31,5 см⁻¹. Б. Локшин

Ж. 1965. 18

OF

(D₀)8.5
20.2
XV

✓ 11 Д483. ИК-спектроскопия соединений, содержащих группу OF, в твердых матрицах. I. Радикал ~~OF~~ Arkell Alfred, Reinhard Russell R., Larson Lewis P. Matrix infrared studies of OF compounds. I. The OF radical. «J. Amer. Chem. Soc.», 1965, 87, № 5, 1016-1020 (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения продуктов фотолиза OF₂ в матрице твердого азота или аргона при t-ре 4° К. Детально описана методика измерений и примененная аппаратура. Фотолиз вызывался облучением светом ртутной дуги высокого давления. Приведены спектральные кривые. Возникновение полос поглощения при 1028,5 см⁻¹ (в аргоне) или 1025,5 и 1030,5 см⁻¹ (в азоте) приписано образованию радикала OF, что подтверждается также исследованием фотолиза O¹⁸F₂. Подробно обсуждена природа дублета поглощения OF в азотной матрице, вызванного существованием двух ячеек кристаллич. решетки: чистый азот и азот с примесью N₂O. Дано сравнение зарегистрированных спектров с полученными ранее; определена энергия связи в радикале. Библ. 25 назв.

В. Синцов

1965

ф. 1965. 118

$O_2 F^+$; $OF^+(A)$; $O_2 F_2(A)$ - XI 2017 - 1965

Malone T.J., McGee H.A.,
J. Phys. Chem., 1965, 69 (12), 4338-44

to m

(9p)

ca66

F₂O, FO (D₀)

XI 1353

1967

Troe J., Wagner H. Gg., Weden G.

Z. phys. Chem., (B.R.D.), 1967, 56, N3-4, 238-241 (man)

Zum unimolekularen Zerfall von F₂O

ЕСТ: ф. к.

РЛХ Хим., 1968

116800

HO (ф)

$D_0(FO-F)$

"XI-3950

1967

$D_0(F_2O)$

Wagner H. G., Widen G.

Z. phys. Chem (BRD), 1967, 56, 23-4,
238-241 (Russ).

Zum bimolekularen Zerfall von F_2O .

Proc Xmas, 1968, 115300



W.

50

OF

Зиневус Н. Г.

1968

Алгеб. и практ. Счет.
19, n 1-2, 1-4.

Умножение чисел в
области дифференциал-
ных преобразований
ради-калов.

(см. ВФ) III

OF

N-663

1969

4 Д871. Изучение изолированного в матрице радикала OF с помощью ИК-спектроскопии. Arhell Alfred. Matrix infrared studies of OF radical systems. «J. Phys. Chem.», 1969, 73, № 11, 3877—3880 (англ.)

Исследован фотоллиз OF₂ в азотной матрице без примесей (I), I при добавлении N₂O (II) и I+CO₂ (III) при 4° K. Обнаружено увеличение интенсивности ИК-поглощения OF (IV) при переходе от I системы к III. Приведены графики зависимости концентрации IV от продолжительности фотоллиза I, II и III систем. Исследован также фотоллиз F₂+N₂O+N₂ (1:3:40) (V), F₂+N₂O+Ar (1:1:40) и F₂+CO₂+N₂ (1:1:40) при 4° K. Приведены ИК-спектры V системы от 1100 до 400 см⁻¹ при различных



Ф. 1970. 4А

продолжительностях ее засветки. Обсуждены возможные механизмы распада IV и влияния N_2O и CO_2 на его выход. Сделан вывод о том, что увеличение выхода IV не связано со стабилизацией IV. Предложена схема влияния N_2O на выход IV, отличающаяся от схемы влияния CO_2 . Произведена оценка энергии связи IV (40 ккал/моль). Библ. 5.

Т. С.

FO

1969

Leo Brewer, Gerd Rosenblatt.

"Adv. in High Temp. Chem.

1969, 2, 1-83.

Old to new 1862

D^o₂₉₈

D^o

FO

Lin M.C.,
Bauer S.H.

1969

D.

J. Amer. Chem. Soc.,
91, N27, 7737

(Cell. FO) I

III

1870

OF

2Д14Г. Монофторид кислорода ($OF, ^2\Pi$). Волновая функция Хартри—Фока, энергия связи, ионизационный потенциал, электронное сродство, дипольный и квадрупольный моменты, спектроскопические постоянные. Сравнение теоретических и экспериментальных данных. O'Hare P. A. G., Wahl Arnold C. Oxygen monofluoride ($OF, ^2\Pi$): Hartree—Fock wavefunction, binding energy, ionization potential, electron affinity, dipole and quadrupole moments, and spectroscopic constants. A comparison of theoretical and experimental results. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 6, 2469—2478 (англ.)

Самосогласованные волн. ф-ции, близкие к хартри-фовскому пределу, рассчитаны по методике Рутана для состояния $^2\Pi$ молекулы OF при различных межъядерных расстояниях R , а также для молекулярных ионов $OF^+ (^3\Sigma)$ и $OF^- (^1\Sigma)$ при равновесном R , соответству-

спектр. пост.

ф. 1871. 20

ющем OF. При расчетах использовалась квантовохимич. система BISON. Полная энергия при хартри-фокковском минимуме (1,321 Å) равна $-174,19502$ хартри. В предположении, что энергия корреляции примерно такая же, что в случае O_2^- , и путем интерполяции энергии корреляции OF в пределах последовательности CF, NF, OF и F_2 энергия связи $D(OF)$ оценена в $3,0$ эв (с ошибкой от $+0,3$ до $-0,8$ эв). Проведен анализ кривой потенц. энергии и осуществлена оценка спектроскопич. постоянных: $\omega_e = 1211$ $см^{-1}$; $\omega_e x_e = 5,15$ $см^{-1}$; $B_e = 1,104$ $см^{-1}$; $\alpha_e = 0,0097$ $см^{-1}$. Рассчитаны потенциалы ионизации и электронное сродство для вертикальных процессов, дипольный и квадрупольный моменты молекулы OF и молекулярных ионов. Проведено сопоставление с эксперим. данными.

А. Медвинский

OF

OF⁺;

OF

м.н.

A
y

X. 1971. y

XI-733

1970

4 Б18. Монофторид кислорода (OF, ²Π). Волновые функции Хартри — Фока, энергия связи, потенциал ионизации, сродство к электрону, дипольный и квадрупольный моменты и спектроскопические постоянные. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов. O'Hare P. A. G., Wahl Arnold C. Oxygen monofluoride (OF, ²Π): Hartree-Fock wavefunction, binding energy, ionization potential, electron affinity, dipole and quadrupole moments, and spectroscopic constants. A comparison of theoretical and experimental results. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 6, 2469—2478 (англ.)

Сел. М/об

Методом Хартри — Фока — Рутаана вычислены волновые функции и энергии состояния $^2\Pi$ радикала OF при различных значениях межъядерного расстояния. Для полной энергии основного состояния $^2\Pi$ получено значение $-174,19502$ ат. ед. при равновесном межъядерном расстоянии $1,321$ А. При этом расстоянии выполнен также расчет для ионов $OF^+(^3\Sigma)$ и $OF^-(^1\Sigma)$. Вычислены также энергия связи $D(^2\Pi) = 3,0 (+0,8; -0,3)$ эв, спектроскопич. постоянные ω_e , $\omega_e x_e$, B_e и α_e состояния $^2\Pi$ радикала OF, дипольный и квадрупольный моменты, потенциалы ионизации, сродство к электрону для $OF(^2\Pi)$, $OF^+(^3\Sigma)$ и $OF^-(^1\Sigma)$ и ср. значения нек-рых операторов, значение к-рых необходимо для расчета других электрич. и магнитных св-в OF. Результаты расчета сопоставлены с эксперим. данными и с результатами расчетов др. авторов.

М. Р. Алиев

OF

XI-733

1970

J. A. P.

U. R.

Do

(91482e) Oxygen monofluoride ($\text{OF}, {}^2\Pi$): Hartree-Fock wavefunction, binding energy, ionization potential, electron affinity, dipole and quadrupole moments, and spectroscopic constants. Comparison of theoretical and experimental results. O'Hare, Patrick A. G.; Wahl, Arnold C. (Chem. Eng. Div., Argonne Nat. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1970, 53(6), 2469-78 (Eng). Self-consistent-field wavefunctions near the Hartree-Fock limit have been calcd. by the Roothaan expansion method for $\text{OF}({}^2\Pi)$ at several internuclear seps.; the total energy at the Hartree-Fock min. (1.321 Å) was -174.19502 hartree. Based on the assumption that the correlation energy was approx. the same as for O_2^- , and also by interpolating the correlation energy of OF across the CF, NF, OF, and F_2 sequence, the binding energy $D(\text{OF})$

was deduced to be $3.0 \pm_{0.8}^{0.3}$ eV. A Dunham anal. of the potential-energy curve gave values for the various spectroscopic consts. In addn., the ionization potential and electron affinity for the vertical processes, and the dipole and quadrupole moments of $\text{OF}^+({}^3\Sigma)$, $\text{OF}({}^2\Pi)$, and $\text{OF}^-({}^1\Sigma)$ were also calcd. RCJQ

C.A. 1970.73.18, 91482e

OF

Thyne J. C. J. 1930
Macneil K. A. G.

(A)

Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Phys., 5 (1-
2), 95.

~~(C_2F_2^+) III~~
 CF_4O

20208.3762

Ch, Ex-Ch, Ph

FO (Do)

96201

XI 2814
1971

Clyne M.A.A., Watson R.T. Detection of
the ground state FO radical in the gas
phase. "Chem. Phys. Lett.", 1971, 12,
N 2, 344-346.

(англ.)

af

0553 пик

542 544 546 Р44 X, 1972, 135100 ВИННИТИ

OF

XI 2702

1941

(124692) Matrix infrared spectrum of OF and detection of LiOF. Andrews, Lester; Raymond, James I. (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(7), 3078-86 (Eng). Simultaneous deposition of OF₂ or ¹⁸OF₂ dild. in Ar with a beam of Li, Na, K, or Mg atoms on a salt window at 15°K produces new ir absorptions which are due to the appropriate metal fluorides. An intense absorption at 1028.6 cm⁻¹ is independent of the metal used to generate the reaction, and this feature shows the appropriate ¹⁸O shift for assignment to the OF free radical. Addnl. bands show a metal dependence and are attributed to weakly bonded MF...OF dimers. Use of isotopic mixts. shows that bands at 714.0 and 417.5 cm⁻¹ using ⁶Li are due to a new species contg. single Li and O atoms which concn. studies suggest to be the mol. LiOF.

сектор
в
составе
Di

(H) LiOF

C. A. 1941. 45. 20,

124708

OF

XI 2702

1971

2 Д559. ИК-спектр OF в матрицах и обнаружение LiOF. Andrews Lester, Raymond James I. Matrix infrared spectrum of OF and detection of LiOF. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 7, 3078—3086 (англ.)

Исследован ИК-спектр F_2O и $F_2^{18}O$ в матрице Ag в присутствии атомов Li, Na, K или Mg. Интенсивная полоса $\sim 1028 \text{ см}^{-1}$, положение которой не зависит от природы металла, отнесена к колебанию свободного радикала FO. Идентифицированы полосы слабо связанных димеров MF...OF. Найденные значения силовой посто-

И
см. п.

Ze

Ф. 1972. 22

янной и энергии связи радикала FO составляют 5,416 мдин/А и 55 ккал/моль. Графически определенное значение длины связи в FO равно 1,36 А. В присутствии Li в матрице образуются молекулы LiOF , которым принадлежат полосы 714 (Li) и 417 (^6Li) см^{-1} . Сделан вывод, что связь в молекуле имеет ионный характер $\text{Li}^+(\text{OF})^-$. Приведены спектры и таблицы частот. Подробно обсуждается отнесение полос в спектрах к различным молекулярным образованиям. Библ. 24. Э. В. Б.

OF

X1 2702

1971

5 Б290. Спектр инфракрасного поглощения матрично-изолированной OF и обнаружение LiOF. Andrews Lester, Raymond James I. Matrix infrared spectrum of OF and detection of LiOF. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 7, 3078—1086 (англ.)

Измерены спектры ИК-поглощения матрично-изолированной OF₂ (или ¹⁸OF₂) в смеси с Li, Na, K или Mg. Обнаружено появление ряда полос поглощения, связанных с образованием соотв. фторидов металлов, а также полосы 1028,6 см⁻¹, появление к-рой не зависит от природы металла. Данные по изотопному сдвигу этой полосы (¹⁸O) позволяют отнести ее к колебаниям радикала OF. Обнаружены полосы поглощения, свидетельствующие

об образовании димеров MF...OF. Обнаружено образование LiOF. Г. Кузьмин

X. 1972.5

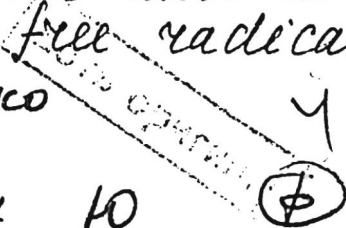
(+1) I



OF_2 , $OF(v_i)$, O_2 , $F_2(v_1)$ $\bar{x}13031$ 1972
Andrews L.,

J. Chem. Phys., 1972, 57, N1, 51-55
(anal.)

Argon matrix Raman spectra
of oxygen difluoride and the
oxygen fluoride free radical.

ppp в. в ак  

Вх Хмш, 1972, 235217 10 

1972

FO

м.и.

Счет по научно-иссл. работе
ИТАН СССР, 1972 г.

Средств на изобрет. и торгово-
патентные расходы.

OF

1851

Wahl A.C.

1972

Dimmick

"Theor. Chem." London,
e.a. 1972, 41-70

(7)

OF

Czarnowski J.; et al.

1972

"Chem. Phys. Lett."

(70°)

1972, 17, N 2, 235-240.

Кинетика термич. разложения
 F_2O .

● (см. F_2O ; I) ■

X1-2845

1972

FO

(D₀)

мемор

13 Б897. Образование гидроксила в реакции $H + F_2O$ и энергия связывания FO. Levy Donald H. Production of hydroxyl in the reaction of $H + F_2O$ and the binding energy of FO. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 3, 1415—1416 (англ.)

Исследование спектров ЭПР, возникающих при взаимодействии H_2 с F_2O показывает наличие интенсивного спектра OH в основном колебательном состоянии и менее интенсивных спектров OH ($v=1-4$). Наблюдается также интенсивный спектр, принадлежащий атомам O. Полученные данные позволяют оценить энергию связывания FO, которая составляет $D_0 = 2,52 \pm 0,18$ эв в предположении, что при взаимодействии H с F_2O образуются молекулы FO в основном состоянии. Л. Ю. Русин

X. 1972

135897

210

+1 14

X

1972

FO

J
A
20

146880c Oxygen monofluoride ($OF_2^2\pi$). Hartree-Fock wave function, binding energy, ionization potential, electron affinity, dipole and quadrupole moments, and spectroscopic constants. Comparison of theoretical and experimental results. Comments. Liebman, Joel F. (Inorg. Chem. Sect., Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(8), 4242-3 (Eng). A polemic is given concerning the report by P. A. G. O'Hare and A. C. Wahl (*J. Chem. Phys.* 1970, 53, 2469). The importance of considering conservation of spin in studies involving OF , OF^+ , and OF^- is discussed.

C.A. 1972. 76. 24

XI-1489

1982

18 Б15. Замечание к статье O'Hare P. A., Wahl A. C. «Монофторид кислорода (OF , 2Π). Волновые функции Хартри — Фока, энергия связи, потенциал ионизации, сродство к электрону, дипольный и квадрупольный моменты и спектроскопические постоянные. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов. Liebman Joel F. Comment on the paper. «Oxygen monofluoride (OF , 2π): Hartree—Fock wavefunction, binding energy, ionization potential, electron affinity, dipole and quadrupole moments, and spectroscopy constants. A comparison of theoretical and experimental results» by P. A. G. O'Hare and A. C. Wahl. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 8, 4242—4243 (англ.)

К РЖХим, 1971, 4Б18

Сов. О. пр. 1?

X. 1982. 18

OF

1972

(Y, A.)

9 Д149. Замечание к статье «Монофторид кислорода (OF, $^2\Pi$). Хартри-фоковская волновая функция, энергия связи, потенциал ионизации, электронное сродство, дипольные и квадрупольные моменты и спектроскопические постоянные. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов». П. А. Г. О'Хэра и А. С. Валя. Liebman Joel F. Comment on the paper. «Oxygen monofluoride (OF, $^2\Pi$): Hartree-Fock wavefunction, binding energy, ionization potential, electron affinity, dipole and quadrupole moments, and spectroscopic constants. A comparison of theoretical and experimental results» by P. A. G. O'Hare and A. C. Wahl. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 8, 4242—4243 (англ.)

К.РЖФиз, 1971, 2Д141.

Ф. 1972. 92.

$\text{HOF}(\text{I}, \Delta H_f) \text{OH}^+; \text{OF}(\text{A}_{\text{H}^+})$ 1973
Bezkwitz J., Appelman E.H.,
Chupka W.A. XI 3408
J. Chem. Phys., 1973, 58, 15, 1950-1954 (ann)
Photoionization of HOF with mass-
analysis.

PH/Kusn., 1973
1751065

M, 10 (cp)

3

DF (I, ΔH_f , A.P.)

XI 3515

1973

Fe_2O Berkowitz J., Dekmer P.M.,

Chupka W.A.,

J. Chem. Phys., 1973, 59, 112, 925-928
(corr.)

Photoionization mass spectro-
metry of Fe_2O .

3

Pte Xum, 1974, 15112

10, 11 (⊕)

FO

BF

XI 3985

1973

30884k Bicentric rescaling of CNDO 2 [complete neglect of differential overlap] theory. Applications to inorganic fluorides. Companion, A. L. (Dep. Chem., Illinois Inst. Technol., Chicago, Ill.). *J. Phys. Chem.* 1973, 77(26), 3085 (Eng). Relative bicentric contributions to the total CNDO 2 mol. energy are examined for 41 mols. using energy partitioning concepts. External rescaling of bicentric contributions permits estn. of reliable bond and atomization energies but brings about no improvement in the potential of CNDO theory in predicting geometries. Specific results are discussed for the fluorides of O and B.

кб. мех.
парем.

(+1) [X]

C.A. 1974. 80. N6, 30884k

FO-F; O-F; FSO₂O-F; (D₀) $\bar{x}$ 3404 1973
CF₃-O; SF₅O-F

Schumacher H. J.,

7th Int. Symp. Fluorine Chem.

Santa Cruz, Calif., 1973, S. I. S. A.,

NP - 1 (ann.)

The kinetics and the mechanism
of some reactions of fluorine
atoms and fluorine containing
radicals.

Bre Chem, 1974, 75 943 10, 4 (p) 6

FO

F₂Oобразов
при
фотолизе

X1875N11

11 Б1158. Реакция атомарного фтора с атомами кислорода в криогенных матрицах. Новый источник гипохлоритного радикала. Smardzewski Richard R., Fox W. B. Reaction of atomic fluorine with oxygen atoms in cryogenic matrices. A new source of the hypofluorite radical «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 11, 4933—4934 (англ.)

Методом ИК-спектрофотометрии поглощения показано, что при фотолизе смесей F₂ с NO₂ состава от 1,92:1 до 0,61:1, сильно разбавленных N₂ (в 200—500 раз) и замороженных при 8°K, образуется свободный радикал FO. Компоненты смесей одновременно конденсировали на CsJ-окошке. Конденсат облучали фильтрованным (230—400 нм) светом Hg-лампы высокого давл. мощностью 125 Вт в течение 20 час. Наряду с FO образуется также F₂O, выход к-рого повышается с ростом доли F₂ в исходной смеси. Предположено, что FO возникает путем рекомбинации O + F → FO атомов, образующихся при фотолизе F₂ и NO₂. Последующая р-ция FO с F дает F₂O. Другой возможный механизм — р-ция атомов O с F₂ с последующей фотодиссоциацией F₂O на FO и O менее вероятен.

В. Е. Скурат

1974

X-4-7933



F₂

1975

5 Д428. Изменение спектра поглощения молекулярного фтора в диапазоне температур 300—1000° К. Батовский О. М., Гурьев В. И. «Ж. прикл. спектроскопии», 1975, 23, № 6, 1092—1094

измен.
спектра
поглощ.

С помощью импульсного нагрева молекулярного фтора быстрой фотохимич. реакцией его с водородом и метода кинетич. спектроскопии определена температурная зависимость изменения спектрального коэф. поглощения молекулярного фтора, которая была получена. Показано, что наименьшее измерение спектрального коэф. поглощения фтора в диапазоне т-р 300—1000° К наблюдается при $\lambda = 326$ нм. Сильная температурная зависимость коэф. поглощения позволяет непосредственно определять т-ру реагирующей смеси фтора с водородом.

Автореферат

Ф. 1976, N 5

O-F

ORNL. 4824.

1975

Kerr J. A., et al.

Handbook Chem. Phys.
55th Ed., 1974-75.

(Do)

OF

Литтиса 4913

1976

У) 6 Б176. Лазерная спектроскопия молекул, изолированных в матрицах. Andrews Lester. Laser excitation matrix—isolation spectroscopy. «Appl. Spectrosc. Revs», 1976, 11, № 1, 125—161 (англ.)

спектры
образов.
молекул

Обзор. Кратко рассмотрена техника лазерного возбуждения КР-спектров и спектров резонансной флуоресценции в матрицах инертных газов при низких т-рах. Подробно обсуждаются р-ции атомов щел. металлов с O_2 , O_3 , F_2 , Cl_2 , Br_2 и I_2 , лазерный фотолиз OF_2 , Cl_2O с образованием OF , OCl , $ClClO$. При лазерном фотолизе смесей F_2 , Cl_2 или FCI с Kr или Xe образуются соединения XeF_2 , KrF_2 , $XeCl_2$, $XeClF$. Рассмотрены резонансные КР-спектры и спектры флуоресценции галогенов, NO_2 , ClO_2 , CCl_2 , $CFCl$, $CClBr$, C_2^- , PbS . Библ. 73.

В. М. Ковба

X. 1977 №6.

(413)



OF Commen 8378 / 1979

Andrews L.

Раман
спектр
в матрице

Appl. Spectrosc.
1979, 33 (3), 199-205

FO
оттиск 9231

М.И.

Vi, 2e

13 B224. Обнаружение радикала FO методом лазерного магнитного резонанса на основе CO₂-лазера McKellar A. R. W. Detection of the FO radical by CO₂ laser magnetic resonance. «Can. J. Phys.», 1979, 57, № 12, 2106—2113 (англ.) 1979

Спектроскопически зарегистрирован радикал FO в газовой фазе методом лазерного магнитного резонанса (ЛМР) на основе CO₂-лазера. Зафиксировано поглощение на основной колебательной полосе FO в диапазоне 1025—1043 см⁻¹. Кювета, в которой изучали поглощение, помещалась внутрь резонатора лазера. Частота магнитной модуляции составляли ~17 кГц, амплитуда 3—30 Гс. Радикалы FO получали СВЧ-разрядом в потоке CF₄, протекающего через кварцевую трубку при давл. 0,2 мм, по-видимому, за счет р-ции атомов F с кварцем. При добавлении в систему небольшого кол-ва кислорода интенсивность спектров возрастала. Спектры ЛМР обнаружены на 7 линиях генерации CO₂-лазера. Всего идентифицировано 6 колебательно-вращательных переходов соотв. компоненте $\Omega=3/2$ основного электронного состояния ²π. Достаточная интенсивность спектров позволила наблюдать хорошо разрешенную

оттиск 9231

№ 1980 № 13

СТС на ядре ^{19}F . Определены след. молек. параметры
 ФО: $\nu_0 = 1033,4812(2) \text{ см}^{-1}$, вращательная постоянная
 $B_0 = 1,05282(19) \text{ см}^{-1}$, центробежная вращательная по-
 стоянная $D = 0,39(33) \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, постоянная ТС $A =$
 $= -177,3(57) \text{ см}^{-1}$, аксиальная константа СТС $h =$
 $= 0,02322(59) \text{ см}^{-1}$. Определена разница в значениях B
 и h для основного и 1-го возбужденного колебательно-
 го состояний ФО. Для A и D такого различия обнару-
 жено не было. Рассчитано значение равновесной длины
 связи $r_e = 1,35789 \pm 0,00025 \text{ \AA}$, к-рое на 1,5—2,7% выше,
 чем полученное расчетом с помощью неэмпирич. мето-
 да. Обсуждаются причины неудач обнаружения элек-
 тронных или ЭПР спектров радикала ФО.

Л. Е. Ястребова

FO

FO⁺

(γ)

1980

список 10.90

3 Д708. УФ фотоэлектронная спектроскопия неста-
бильных соединений. Ч. 12. Радикал FO ($X^2\Pi_i$). Va-
cuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient
species. Part 12. The FO ($X^2\Pi_i$) radical. Dyke J. M.,
Jonathan N., Mills J. D., Morris A. «Mol.
Phys.», 1980, 40, № 5, 1177—1183 (англ.)

Исследован He—I-фотоэлектронный спектр продук-
тов реакции $F + O_3 \rightarrow FO + O_2$. Атомы F получали при
пропускании СВ4-разряда в смеси F₂ и He. Устано-
влены три вертикальных потенциала ионизации FO (в

ф. 1981 W3

эв): 13,08, 14,48, 15,16. Эти потенциалы ионизации соответствуют образованию иона FO^+ в состояниях $\text{X}^3\Sigma^-$, $^1\Delta$, $^1\Sigma^+$. Во всех полосах разрешена колебательная структура. Приведены измеренные частоты колебаний (см^{-1}), оценочные значения равновесных межъядерных расстояний (А) и энергий диссоциации (эв) для 3 состояний FO^+ : $\text{X}^3\Sigma^-$ — 1300, 1,23, 6,96; $^1\Delta$ — 1280, 1,23, 5,57; $^1\Sigma^+$ — 1230, 1,24, 4,72. Проведено сравнение полученных величин для FO^+ и ClO , O_2 , FO .
Библи. 26. Ю. В. Чижов.

FO⁺

1980

ommuca 10190

94: 22566g Vacuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient species. Part 12. The fluorine monoxide ($X^2\Pi_i$) radical. Dyke, J. M.; Jonathan, N.; Mills, J. D.; Morris, A. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl. SO9 5NH). *Mol. Phys.* 1980, 40(5), 1177-83 (Eng). The He I photoelectron spectrum of the FO($X^2\Pi_i$) radical, produced in the rapid reaction $F + O_3 \rightarrow FO + O_2$, was recorded. Three bands were obsd. corresponding to ionization of FO($X^2\Pi$) to the $X^3\Sigma^-$, 1Δ , and $1\Sigma^+$ states of FO⁺. Anal. of the vibrational structure in each band yielded ests. for the vibrational waveno., equil. bond length, and dissoen. energy of FO⁺ in each state.

4.17; Do

P.A. 1981. 94 NY

FO

FO+

фотоэл.
спектр

Q. 1981. N 6

6 B133. Фотоэлектронная спектроскопия нестабильных соединений. Часть 12. Радикал FO ($X^2\pi_i$). Dyke J. M., Jonathan N., Mills J. D., Morris A. Vacuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient species. Part 12. The FO($X^2\pi_i$) radical. «Mol. Phys.», 1980, 40, № 5, 1177—1183 (англ.)

С использованием источника возбуждения He-I измерен фотоэлектронный спектр (ФЭС) для продуктов реакции $F+O_3 \rightarrow FO+O_2$. Методом Δ ССП в базисе Хузинаги—Даннинга, расширенном добавлением поляризац. ф-цией, рассчитаны энергии переходов между основным состоянием радикала FO $X^2\pi$ и 11 состояниями иона FO⁺ симметрий Σ , Δ и π . На основе полученных теор. результатов и с использованием лит. данных фотоионизац. масс-спектроскопии для FO, в измеренном ФЭС найдены линии, соотв-щие конечным состояниям фотоионизации FO $^3\Sigma^-$ (I), $^1\Delta$ (II) и $^1\Sigma^+$ (III). Отношение интенсивностей этих пиков хорошо согласуется с отношением (3:2:1) статистич. весов состояний I—III. Из анализа колебательной структуры пиков в ФЭС, отнесенных к состояниям иона FO⁺ I—III, определены спектроскопич. константы r_e , ω_e , x_e и D_e . Найденные величины сопоставлены с лит. данными для соотв-щих

1980
10 190
отмечены

состояний иона O_2^+ . Отмечено, что в обоих случаях наблюдается возрастание r_e и уменьшение ω_e при переходе от I к III.

О. А. Басченко

FO

Common 10356

1980.

Glidewell ch.

Megus,
wre.
Cryso-

J. M. L. Street, 1980,

67, 35-44

F-0

1980

Hinde Alan L. et al.

J. Comput. Chem, 1980, 1(2),
118-28

кв. м.м.
раб.



cell. Li-NH₂-II

OF

Lammica 10625 1980

Jug R, et al.

(7)

rel. max.
prater

Theor. chim. acta,

1980, 57, 131-144

● (see FH) III

OF

1981

Бауев А. В. и др.

12-й Менделеевск. съезд по
общ. и прикл. химии,
Рер. докл. и сообщ. №3.
М., 1981, 198.

Аб

(см. ClO_3F ; III)

FO

Ommuck 13031

1981

(u.n.)

Dawles P. B.,

J. Phys. Chem., 1981, 85,
2599-2607

OF

1981

Yengsfield B. H., et al.

спектр
в матрице

J. Chem. Phys., 1981,
74, N 12, 6849-6856.

●
(see. O_2^+ ; III)

OF

1 Ommeck 12915

1981

Ramant K., Ghodgaonkar
A.M.,

Do;

J. Chem. Educ., 1981, 58(8),
609-610

OF

1983

Алексеев В.И., Федорова
Л.И. и др.

Ае; Изв. АН СССР. Сер. хим.,
1983, № 5, 1084-1090.

●
(см. CeO_3F ; III)

OF

1983

Donovan R. J. Fotakis
C., et al.

I, Ae

Can. J. Chem., 1983, 61,
N5, 1023-1026.

●
(cell. CS; III)

FO⁻

1983

Karelson M. M.

ab initio
pariem

Org. React. (Tartu)
1983, 20(1), 132-145.

(c.m. H_3O^+ ; III)

OF

Om. 18259

1983

8 Б1063. Теоретическое исследование дипольного момента монофторида кислорода (OF). Theoretical study of the dipole moment of oxygen monofluoride (OF). Langhoff Stephen R., Bauschlicher Charles W., Partidge Harry. «Chem. Phys. Lett.», 1983, № 4, 292—298 (англ.)

Многоконфигурационным методом ССП в полном пространстве активных орбиталей и методом конфигурац. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями рассчитаны потенциальная кривая и функция дипольного момента для $X^2\Pi$ -состояния молекулы OF. Вычисл. значения дипольных моментов, $\mu_v=0 = -0,0089$ и $\mu_v=1 = -0,0318 D$, находятся в достаточно хорошем согласии с эксперим. данными (знак «—» соответствует распределению зарядов O^+F^-). Отмечено, что небольшими сдвигами потенциальной кривой и функции дипольного момента можно воспроизвести эксперим. величины для низших колебательных уровней и получить точные оценки дипольных моментов высших колебательных состояний.

Л. А. Корытко

И-П

X. 1984, 19, № 8

OF

Д.м. 18259

1983

4 Д205. Теоретическое изучение дипольного момента монофторида кислорода (OF). Theoretical study of the dipole moment of oxygen monofluoride (OF). Langhoff Stephen R., Bauschlicher Charles W., Jr., Partridge Harry. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 102, № 4, 292—298 (англ.)

Представлены результаты расчета потенц. кривой и ф-ции дипольного момента основного состояния молекулы OF, определенных на двух уровнях: в приближениях ССП для полностью активного пространства орбиталей и многобазисного однократного и двукратного конфигурационного взаимодействия; и в приближении, где используется двухэкспоненц. плюс поляризационный и расширенный гауссовый базисные наборы на каждом атоме. В. В. Росихин

дипольн.
момент,
теорет.
расчет

ср. 1984, 18, 44

FO

От. 18117

1983

4 Л155. Дипольный момент радикала FO. The dipole moment of the FO radical. McKellar A. R. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 186—192 (англ.)

Методом регистрации насыщенного поглощения в спектре лазерного магн. резонанса в присутствии электр. поля невысокой напряженности проведены прямые измерения электрического дипольного момента радикала FO ($^2\Pi_{3/2}$). Возбуждение молекулярной системы осуществлялось различными линиями CO₂-лазера. Свободный радикал создавался иницированием ВЧ-разряда в потоке CF₄ с незначительной добавкой кислорода. Установлена чрезвычайно малая величина дипольного момента для первых двух колебательных состояний ($\mu(v=0)=0,0043$ ед. Дебая, $\mu(v=1)=0,0267$ ед. Дебая). Высказано предположение, что этот факт объясняет неудачу многочисленных попыток зарегистрировать спектр ЭПР радикала FO. Библ. 19. В. С. З.

дипольный
момент

ср. 1984, 18, № 4

FO

Om. 18117

1983

8 Б1318. Дипольный момент радикала FO. The dipole moment of the FO radical. McKellar A. R. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 186—192 (англ.).

Из насыщ. спектров поглощения лазерного магнитного резонанса в присутствии эл. поля напряженностью ~ 1 кВ/см непосредственно определена величина дипольного момента радикала FO (основное состояние $^2\Pi$). Дипольный момент оказался самым малым среди измеренных до сих пор дипольных моментов гетерополярных двухатомных молекул и сильно изменялся с изменением колебат. состояния [$\mu(\nu=0)=0,0043(4)$, $\mu(\nu=1)=0,0267(9)$ D]. Знак дипольного момента одинаков для двух колебат. состояний ($\nu=0, 1$). Именно малой величиной μ объясняются предпринятые ранее неудачные попытки зарегистрировать вращательные и ЭПР-переходы радикала FO в газовой фазе; это удалось сделать только благодаря методу двойного резонанса.

С. Г. Лакеев

дипольный
момент

X. 1984, 19, №8

FO

[Om. 18117]

1983

99: 168214r The dipole moment of the fluorine oxide (FO) radical. McKellar, A. R. W. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 101(1), 186-92 (Eng). The elec. dipole moment of the FO radical ($^2\Pi_{1/2}$) was directly measured by observing its satd. absorption laser magnetic resonance spectrum ($v = 1-0$) in the presence of a moderate elec. field. The resulting dipole moment [$\mu(v = 0) = 0.0043(4)$ D, $\mu(v = 1) = 0.0267(9)$ D] is extremely small, and shows a large relative change with vibrational state. The sign of the dipole moment is the same for the two vibrational states. Previous failures to detect microwave or gas phase EPR spectra of FO are fully explained by this small dipole moment.

(4)

C.A. 1983, 99, N 20

~~FO~~

FO 17552, Am. 16617 1983

98:116160o Infrared diode laser spectroscopy of the fluorine monoxide radical ($^2\Pi_{3/2}$). McKellar, A. R. W.; Yamada, Chikashi; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 97(2), 425-9 (Eng). The fundamental band of the FO radical in the 9.6- μm region was studied using a tunable diode laser and a Zeeman-modulated multiple-traversal absorption cell. Although it was not possible to detect any transitions belonging to the $^2\Pi_{1/2}$ substate, 14 transitions of $^2\Pi_{3/2}$ were obsd. and accurately measured. Anal. of these measurements gave the following mol. parameters (with $A_0 = A_1$ fixed at -177.3 cm^{-1}): $\nu_0 = 1033.4829(5) \text{ cm}^{-1}$, $B_0 = 1.05285(9) \text{ cm}^{-1}$, $B_1 = 1.03933(8) \text{ cm}^{-1}$, $D_0 = 4.4(4) \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$, and $D_1 = 4.4(3) \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$.

Describe.
nonca,

M.D.

C.A. 198, 98, N 14

FO Om. 17552, Om. 16617 1983

9 Д482. ИК-спектроскопия радикала FO($^2\Pi_{3/2}$) с помощью полупроводникового лазера. Infrared diode laser spectroscopy of the FO radical ($^2\Pi_{3/2}$). McKellar A. R. W., Yamada Chikashi, Hirota Eizi. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 97, № 2, 425—429 (англ.)

Изучена основная полоса радикала FO в области 9,6 мкм с использованием полупроводн. лазера и зееман-модулированной многоходовой кюветы. Хотя не удалось обнаружить каких-либо переходов, относящихся к подуровню $^2\Pi_{1/2}$, были точно измерены 14 переходов, относящихся к подуровню $^2\Pi_{3/2}$. Анализ этих измерений дал следующие молекулярные параметры (с $A_0=A_1$, фиксированный при $-177,3 \text{ см}^{-1}$): $\nu_0=1033,4829(5) \text{ см}^{-1}$, $B_0=1,05285(9) \text{ см}^{-1}$, $B_1=1,03933(8) \text{ см}^{-1}$, $D_0=4,4(4) \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$ и $D_1=4,4(3) \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$.

А. В. Головин

М.Н;

ср. 1983, 18, 19

FO

17552, Om. 16617

1983

17 Б213. Инфракрасная полупроводниковая лазерная спектроскопия радикала $\text{FO}(^2\Pi_{3/2})$. Infrared diode laser spectroscopy of the FO radical ($^2\Pi_{3/2}$). McKellar A. R. W., Yamada Chikashi, Hirota Eizi. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 97, № 2, 425—429 (англ.)

Методом полупроводниковой лазерной спектроскопии с использованием ячейки многократного прохождения и зеемановской модуляции измерен фрагмент вращательной структуры (14 линий) фундаментальной полосы 1—0 радикала $\text{FO}(X^2\Pi_{3/2})$ в области 9,6 мкм. Молекулы FO образовались при прохождении смеси CF_4 (0,2 мм) с O_2 (0,03 мм) через МВ разряд. Спектр наблюдался также и без добавления кислорода, если разряд происходил в трубке из кварца или окиси алюминия. В этом случае интенсивность линий была вдвое меньше. Значения молекулярных постоянных FO (в см^{-1}): $\nu_0=1033,4829$, $B_0=1,052850$, $D_0=4,42 \cdot 10^{-6}$, $B_1=1,039328$, $D_1=4,39 \cdot 10^{-6}$. Никаких линий в спектре, к-рые можно было бы отнести к $\text{FO}(X^2\Pi_{1/2})$, не обнаружено.

В. М. Ковба

M.A;

X. 1983, 12, N 17

FO

Om. 17616

1983

4 Б1370. Дипольный момент радикала FO. Dipole moment of the radical. McKellar A. R. W. «Bull. Soc. chim. belg.», 1983, 92, № 6—7: 16th Int. Symp. Free Radicals, Lauzelle—Ottignies, Sept. 12—16, 1983, 516 (англ.)

Предположено, что отсутствие микроволновых и ЭИР спектров молекул FO в газ. фазе может быть связано с наличием у них постоянного дипольного момента. Дипольный момент FO, определенный методом лазерного магнитного резонанса с использованием электрич. поля $\sim 1,4$ кВ/см, оказался равным $0,0043(4)D$ в основном колебательном состоянии и $0,0267(9)D$ в состоянии с $v=1$.
Л. А. Корытко

дипольный
момент

X. 1984, 19, 14

OF

[Om. 17044]

1983

Politzer P., Sjöberg ,

Ac; . J. Chem. Phys., 1983,
78, 11, 7008-7010.

FO

1984

/ 101: 119878m Mass-spectrometric study of the ionization of an oxygen difluoride molecule. Alekseev, V. I.; Volkov, V. M.; Fedorova, L. I.; Baluev, A. V. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim.* 1984, (6), 1302-6 (Russ). Dissocn. ionization of F_2O mols. by electron impact was studied mass spectroscopically and the formation of FO as an intermediate in thermal decompn. of F_2O was confirmed. In the presence of a Hg vapor, the formation of HgOF is suggested. The activation energy of FO was estd. as being equal to 2.05 ± 0.08 eV.

масс-спектр.
исслед.

(+2) ☒

с. А. 1984, 101, N 14

FO

1986

2 Л137. Фурье-спектроскопия высокого разрешения 1—0 и 2—0 ИК-полос радикала FO ($^2\Pi_{3/2}$, $^2\Pi_{1/2}$). High-resolution Fourier transform spectroscopy of the 1—0 and 2—0 infrared bands of the FO radical ($^2\Pi_{3/2}$, $^2\Pi_{1/2}$). Burkholder James B., Hammer Philip D., Howard Carleton J., McKellar A. R. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 2, 471—480 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом фурье-спектроскопии исследован ИК-спектр поглощения радикала FO в газовой фазе. С разрешением $4 \cdot 10^{-3}$ и точностью $4 \cdot 10^{-4}$ см $^{-1}$ измерены положения линий для основной (1—0) и обертоновой (2—0) колебательно-вращательных полос. На основании сравнительного анализа измеренных частот и рассчитанных в приближении эффективного гамильтониана, учитывающего спин-орбитальное взаимодействие, представле-

(М.П.)

ср. 1987, 18, №2

на интерпретация наблюдаемого спектра с разделением $^2\Pi_{3/2}$ и $^2\Pi_{1/2}$ компонент полос. Определены положения начала полос, рассчитаны значения молекулярных постоянных FO в основном и возбужденных колебательных состояниях. Для ряда молекулярных параметров представлено сравнение с литер. данными по *ab initio* расчетам. Библ. 18.

В. К.

FO

1986

3 Б1276. Фурье-спектроскопия высокого разрешения инфракрасных полос 1—0 и 2—0 радикала FO ($^2\Pi_{3/2}$, $^2\Pi_{1/2}$). High-resolution fourier transform spectroscopy of the 1—0 and 2—0 infrared bands of the FO radical ($^2\Pi_{3/2}$, $^2\Pi_{1/2}$). Burkholder J. B., Hammer P. D., Howard C. J., McKellar A. R. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 2, 471—480 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

(м.п.)

С высоким разрешением ($0,004 \text{ см}^{-1}$, фурье-спектрометр) измерена вращат. структура полос 1—0 и 2—0 ИК-спектра радикала FO ($^2\Pi_{3/2}$, $^2\Pi_{1/2}$). Радикалы получались при взаимодействии атомарного фтора с озоном в проточной многоходовой ($l \sim 100 \text{ м}$) оптич. ячейке. Приведены значения вращат. постоянных B , D ($\cdot 10^5$), параметра Δ -удвоения (p) и др. постоянных (в см^{-1}): состояние $v=0$ —1,052040; 0,4296; 0,01470; $p_D = -1,5 \cdot 10^{-7}$; $A = -198,3$, $A_D = 2,8 \cdot 10^{-4}$; состояние $V = 1$ —1,038671; 0,4330; 0,01444; $\Delta A = A_1 - A_2 = +1,0624$.

X. 1987, 19, № 3

$\Delta A_D = \pm 2,0 \cdot 10^{-5}$; $\nu_0 = 1032,9648$; состояние $V =$
 $= 2 - 1,024888$; $0,4364$; $0,01415$, $\Delta A = A_2 - A_0 = 2,1598$;
 $\Delta A_D = 4,0 \cdot 10^{-5}$; $\chi_0 = 2045,4739$. Равновесные молек. по-
 стоянные ω_e , $\omega_e X_e$, B_e , a_e , γ_e равны соотв. $1053,42$,
 $10,23$, $1,05869$, $0,01325$, $-0,00011 \text{ см}^{-1}$, $R_e = 1,35412 \text{ \AA}$.
 Результаты сопоставлены с данными неэмпирич. расче-
 тов. В. М. Ковба

FO

(Om. 25747)

1986

105: 69312g High-resolution Fourier transform spectroscopy of the 1-0 and 2-0 infrared bands of the fluorine monoxide radical ($^2\Pi_{3/2}$, $^2\Pi_{1/2}$). Burkholder, James B.; Hammer, Philip D.; Howard, Carleton J.; McKellar, A. R. W. (NOAA Environ. Res. Lab., Boulder, CO 80303 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 118(2), 471-80 (Eng). The fundamental ($\nu = 1 \leftarrow 0$) and 1st overtone ($\nu = 2 \leftarrow 0$) bands of the FO radical were measured in the IR by using a high-resoln. Fourier transform spectrometer coupled to a long-pathlength flow tube absorption cell. The reaction of F atoms with O₃ was used to generate FO, and the spectra were recorded with a resoln. of 0.004 cm⁻¹ using an absorption path of about 100 m. Previously only the $^2\Pi_{3/2}$ component of the 1-0 band was obsd., but in the present work both $^2\Pi_{3/2}$ and $^2\Pi_{1/2}$ transitions were measured for the 1-0 and 2-0 bands. The anal. of 135 lines of the fundamental and 56 lines of the overtone yielded the 1st exptl. A-type doubling parameters for FO, as well as improved values of a no. of other mol. parameters.

UK Pyper
Crem

c. A. 1986, 105, N 8

FO

1986

Thakkar Ajit J.,
Sharma B.S., et al.

Reel.
Ck-836

J. Chem. Phys. 1986,
85(5), 2845-9.

(cc.  Li₂; III)

OF

[DM-26597]

1987

Harrison J. G.,

(Ae)
meopem.
pachem

J. Chem. Phys., 1987,
86, N5, 2849-2853.

FO

om. 27890

1987

Карачевцев Т. В.,

(He)

Ис. пер. 3. Искренн., 1987,
61, N 8, 2070-2074.

5

FO

(Om. 29290) 1988

108: 228860q High-resolution study of oxygen fluoride (FO) infrared chemiluminescence. Hammer, Philip D.; Sinha, Amitabha; Burkholder, James B.; Howard, Carleton J. (Aeron. Lab., NOAA, Boulder, CO 80303 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 129(1), 99-118. (Eng). Vibrationally excited FO radicals generated by the reaction $F + O_3 \rightarrow FO^* + O_2$ were obsd. in emission for levels up to $v' = 9$ in the ground electronic state. An IR spectrum for $\Delta v = 1$ quantum transitions was recorded at a nominal resolu. of 0.008 cm^{-1} (125-cm path difference) using a high-resolu. Fourier transform spectrometer. Transitions for $\Delta v = 2$ and 3 up to 9-6 were also obsd. at lower resolu. but were not used in the anal. An anal. of the $X^2\Pi_{1/2}$ and $X^2\Pi_{3/2}$ $\Delta v = 1$ transitions up to $v' = 8$ yielded new information about the vibrational state dependencies of the mol. parameters. Transition intensities and instrumental lineshapes were also investigated.

спектр
хемилумин

C.A. 1988, 108, ~26

FO

OM 29290

1988

Т 21 Б1228. Исследование с высоким разрешением инфракрасной хемилюминесценции FO. High-resolution study of FO infrared chemiluminescence. Hammer P. D., Sinha A., Burkholder J. B., Howard C. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 129, № 1, 99—118 (англ.)

На ИК-фурье-спектрометре с разрешением около $0,008 \text{ см}^{-1}$ измерен спектр излучения радикала FO в основном электронном состоянии для колебат. переходов $\Delta v=1$ ($880\text{—}1090 \text{ см}^{-1}$), $\Delta v=2$ ($1730\text{—}2090 \text{ см}^{-1}$) и $\Delta v=3$ ($2650\text{—}3000 \text{ см}^{-1}$). Радикал FO в возбужденных колебат. состояниях генерировался в р-ции $\text{F} + \text{O}_3 \rightarrow \text{FO}^* + \text{O}_2$. Анализ ИК-спектра выполнен для спиновых состояний $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$ с учетом вращат. структуры, спин-орбитального взаимодействия и Λ -удвоения. Определены равновесные значения молек. параметров и их зависимость от колебат. квантового числа. Измерено распределение интенсивностей линий в колебат. полосах. Сравнение вычисленной аппаратной формы линии излучения FO для перехода $4\text{—}3 \text{ } ^2\Pi_{3/2}\text{P}$ ($12,5$) при полуширине $0,0051 \text{ см}^{-1}$ с эксперим. значением $0,006 \text{ см}^{-1}$ согласуется с величиной доплеровского уширения линии $0,0021 \text{ см}^{-1}$ при $t\text{-ре } 350 \text{ K}$.

С. Н. Мурзин

М.А.

X. 1988, 19, N 21

FO

1989

Burkholder J. B.,

Orlando J. J. et al.,

~~crackrock~~ High Resolut. Fourier Trans-
~~napameta~~ form Spectrosc: Sum. Pap.

High Resolut. Fourier Trans-
form. Spectrosc. Top. Meet.,

Santa Fe, N. M.,

Feb. 13-15, 1989.-

Washington, 1989,

c. 94-97.

FO3+

(OM 32488)

1989

Pyykko P.,

Mol. Phys. 1989, 67, N4,
871-878.

ab initio
parcram

Ab initio study of bonding
trends among the 14-electron
diatomic systems: from
 B_2^{4-} to F_2^{4+} .

OF 3+

1989

Wong Ming Wah,
Nobes Ross H. et al.

J. Chem. Phys. 1989.

91 (5), 2971-9.

(see, N_2 ; III)

паче
аўры-
мусе
и До

OF³⁺

1989

Wong M.W., Nobes R.H.
et al.

Li.n.

J. Chem. Phys. 1989, 91,
NS.C. 2971-2979.

( N_2 ; III)

FO

Om 34078

1990

711 Д61. Неэмпирические исследования строения и термохимии радикалов FO. Ab initio studies of the structure and thermochemistry of FO radicals / Zhao Yao, Francisco Joseph S. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 167, № 4.— С. 285—290.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в рамках неограниченного хартри-фоковского подхода с учетом корреляции электронов в 4-м порядке теории возмущений Меллера — Плессета в нескольких больших базисах сгруппированных гауссовых ф-ций с включением поляризационных и диффузных ф-ций исследовано электронное строение радикала FO. В наибольшем базисе длина связи найдена равной 1,349 Å, теплота образования оценена в $27,8 \pm 1$ ккал/моль (с использованием схемы изодесмич. реакции), что в пределах погрешности согласуется с эксперим. значением.

В. Л. Лебедев

м.п., ΔfH



ф. 1990, № 11

FO(ΔfH)

FO

FO⁻

Um. 35286

1991

№ 14 Б1036. Электронное строение FO и его отрицательного иона. Electronic structure of FO and its negative ions / Haaland Peter // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 176, № 3—4.— С. 287—292.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с учетом энергии корреляции электронов в расширенных базисах ГФ, включающих поляризац. и диффузные ф-ции, проведены расчеты радикала FO в электронных состояниях $^2\Pi$ и $^4\Sigma^-$ и иона FO⁻ в электронных состояниях $^1\Sigma^+$ и $^3\Sigma^+$ при различных расстояниях R (F—O). Вычисленное адиабатич. электронное сродство FO равно 2,08+0,2 эВ. Энергия связи FO⁻ в состоянии $^1\Sigma^+$ составляет 3 эВ (относительно разделенных F+O⁻) при равновесном R=1,53 Å (для радикала R=1,36 Å). Сделан вывод о возможности колебат. возбуждения FO при вз-ии атомов F с озоном. Показано, что при сильном колебат. возбуждении ($\nu > 11$) ион FO⁻ адиабатич. диссоциирует на F и O⁻.

Э. Д. Герман

М.П.

X. 1991, N 14

FO

Om 35286

1991

FO⁻

114: 129638r Electronic structure of oxygen fluoride (FO) and its negative ions. Haaland, Peter (Air Force Inst. Technol. Dayton, OH 45433 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1991, 176(3-4), 287-302 (Eng). Electronic structure calcns. of FO and its anion have been performed at the QCISD(T) level of ab initio theory using 6-31+G and extended Gaussian basis sets. The adiabatic electron affinity of FO is calcd. to be 2.08 ± 0.2 eV. The $1\Sigma^+$ anion, which is bound by 3 eV, dissocs. to $F + O^-$ rather than lower energy products $F^- + O$. The disposition of the anion and neutral potentials suggests intriguing results from expts. which would examine the vibrational dependence of electron attachment to FO.

pccm Do

C.A. 1991, 114, N14

FO
FO⁻

OM 35286

1991

6 Д134. Электронная структура [радикала] FO и его отрицательного иона. Electronic structure of FO and its negative ions / Haaland Peter // Chem. Phys. Lett. — 1991. — 176, № 3—4. — С. 287—292. — Англ.

С использованием программы Гауссиан-88 проведены неэмпирич. расчеты электронной структуры радикала FO и его аниона FO⁻. Расчеты проводились в стандартном базисе 6-31 ГФ, дополненном поляризационными и диффузными ф-циями: 6-31+ГФ*. Корреляц. энергии рассчитаны с использованием квадратичного конфигурац. взаимодействия с пертурбативными оценками тройных возбуждений и теории возмущений Меллера — Плессета с учетом одно-, дву-, трех- и четырехкратных возбуждений. Получено значение адиабатич. сродства к электрону FO: $2,08 \pm 0,2$ эВ. Анион FO⁻ в состоянии ¹Σ⁺ имеет энергию связи 3 эВ. Диссоциация FO⁻ происходит на фрагменты F+O⁻, а не на F⁻+O. Анион имеет межъядерное расстояние на 0,17 Å больше, чем

М.Н.

ср. 1991, № 6

нейтральный радикал. Определены поверхности потенц. энергии для реакции $\text{FO} + e \rightarrow \text{F} + \text{O}^-$, которые предсказывают существование процесса диссоциативного прилипания, причем электрон оказывается связанным с атомным фрагментом, имеющим меньшую величину сродства к электрону.

Н. В. В.



FO⁻

1992

/ 8 51103. Фотоэлектронная спектроскопия оксидных анионов галогенов — FO⁻, ClO⁻, BrO⁻, IO⁻, OClO⁻ и OIO⁻. Photoelectron spectroscopy of the halogen oxide anions FO⁻, ClO⁻, BrO⁻, IO⁻, OClO⁻, and OIO⁻ / Gilles Mary K., Polak Mark L., Lineberger W. C. // J. Chem. Phys. — 1992. — 96, № 11. — С. 8012—8020. — Англ.

Измерены фотоэлектронные спектры анионов FO⁻, ClO⁻, BrO⁻, IO⁻, OClO⁻ и OIO⁻, возбуждаемые Ar⁺-лазером (линия 351,1 нм). Ионы FO⁻ получались в МВ-разряде через смесь O₂, следов NF₃ и He (буф. газ); ионы ClO⁻, BrO⁻ и IO⁻ образовались при вз-вии ионов O⁻ (МВ-разряд через O₂/He) соотв. с CCl₄, CF₃Br, и CF₃I; для получения ионов OClO⁻ использовалась р-ция между ионами O⁻, молекулами SF₆ и OClO; ионы OIO⁻ образовывались параллельно с ионами IO⁻. В спектрах анионов XO⁻ наблюдались прогрессии полос переходов XO(X_m²) ← XO⁻(¹Σ⁺) с компонентами спин-орбитального расщепления состояния ²Π, а в спектрах диоксо-анионов — прогрессии полос пе-

М.П.



X, 1993, N 8

переходов $\text{OXO}(^2B_1) \leftarrow \text{OXO}^-(^1A_1)$, связанные с симм. вал. (ν_s) и деф. кол. ($\text{OClO } 945 \text{ и } 445 \text{ см}^{-1}$ соотв., $\text{OIO } 765 \text{ и } 192 \text{ см}^{-1}$, ν_s для OClO^- и OIO^- $774 \text{ и } 675 \text{ см}^{-1}$ соотв.). Выполнен франк-кондоновский анализ распределения интенсивности в колебат. структуре переходов и оценены изменения геометрич. параметров. Величины сродства к электрону для нейтр. молекул составляют (в эВ): 2,272 (FO), 2,276 (ClO), 2,353 (BrO), 2,378 (IO), 2,140 (OClO), 2,577 (OIO). Для монооксидов галогенов получены след. значения R_s (в Å) и ω_s (в см^{-1}): $\text{FO}^-(^1\Sigma^+)$ 1,516, 769; $\text{ClO}^-(^1\Sigma^+)$ 1,673, 665; $\text{BrO}^-(^1\Sigma^+)$ 1,814, 575; $\text{BrO}(^2\Pi_{1/2})$ 1,733, 713; $\text{IO}^-(^1\Sigma^+)$ 1,929, 581; $\text{IO}(^2\Pi_{1/2})$ 1,887, 658. Для OClO^- рекомендованы след. геометрич. параметры: $R(\text{ClO})=1,563 \text{ Å}$, $\angle \text{OClO}=112^\circ$. Для двухатомных молекул (XO) и ионов (XO^-) определена разница в энергиях диссоциации, $D_0(\text{XO})-D_0(\text{XO}^-)$ (в эВ) и оценена энтальпия образования $\Delta_f H_{298}(\text{XO}^-)$ (в ккал/моль): 1,127, -26,3 (FO/ FO^-); 1,341, -28,29 (ClO/ ClO^-); 1,012, -24,20 (BrO/ BrO^-); 0,681, -13,00 (IO/ IO^-) ($\Delta_f H_{298}(\text{OClO}^-)=-24,35 \text{ ккал/моль}$). Библ. 69.

В. М. Ковба

FO⁻

Om. 37 423

1992

(we, $\Delta_5 H$)

117: 79197k Photoelectron spectroscopy of the halogen oxide anions oxygen fluoride ion(1-), oxygen chloride ion(1-), oxygen bromide ion(1-), oxygen iodide ion(1-), chlorine dioxide ion(1-), and iodine dioxide ion(1-). Gilles, Mary K.; Polak, Mark I.; Lineberger, W. C. (Jt. Inst., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309-0440 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(11), 8012-20 (Eng). The 351 nm photoelectron spectra of FO⁻, ClO⁻, BrO⁻, IO⁻, OClO⁻, and OIO⁻ are reported. The spectra of the halogen monoxides display transitions to both spin-orbit states of the $^2\Pi$ ground state neutrals. Anion vibrational frequencies are obsd. in the spectra and bond lengths are obtained for the anions from Franck-Condon simulations. Spectra of the halogen dioxides display two active vibrational modes: the asym. stretch and the bend. Anion sym. stretching frequencies and normal coordinate displacements from the corresponding neutral are reported. Adiabatic electron affinities found for the halogen oxides are 2.272(6) eV (FO), 2.276(6) eV (ClO), 2.353(6) eV (BrO), 2.378(6) eV (IO), 2.140(8) eV (OClO), and 2.577(8) eV (OIO). The difference between the neutral and anion dissocn. energies [$D_0(XO) = D_0(XO^-)$] is reported for each of the halogen monoxides. Anion heats of formation (298 K) are also detd.

FO
(Ae)[$D_0(XO) - D_0(XO^-)$]


C.A. 1992, 117, N 8

FO

1992

Xie Fangqing, Liu Lei,
et al.

ВУФХемтр,
Риздерг. совет.

Chem. Phys. Lett.
1992, 9 (3), 130-2.

(see. NF; III)

FO

1993

118: 176255f Electronic states of the oxygen fluoride (FO) radical. An MRSD-CI study. Xie, Fang-Qing; Xia, Yu-Xing; Huang, Ming-Bao (Anhui Institute Optics Fine Mechanics, Chinese Acad. Sci., Anhui, Peop. Rep. China). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 203(5-6), 598-602 (Eng). The potential-energy curves for six electronic states of the FO radical were calcd. at the MRSD-CI level using an extended Gaussian basis set. The results for the two lowest-lying states are compared with those reported by other groups; the results for the high-lying $^4\Sigma^-$ state supported the preliminary explanation for the previously reported (Fang-Qing Xie, et al., 1991) amplified-spontaneous-emission expt.

Атомный. σ -ал
высокая частота.
состояния

с.А. 1993, 118, N 18

FO

(OM. 37 773)

1994

Goldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons J.

и П.,
Д.,
г. Phys - Chem., 1994,
98, N 40, 9931-44.

эксперим.
теорет.
расчет

PO

сверх коротковолн.
+ молекуляр. газ.

$$A_5 H_{298}^0(FO) = 109,5 \pm 8,0 \text{ кJ mol}^{-1}$$

$$A_p = 511,5 \pm 10,0 \text{ кJ mol}^{-1}$$

Zhang Z., Kuos-ch., Klemm R.B., 1994

Morris P.S., Stief L.J.,

Chem. Phys. Lett., 1994, 229, 415

377-382

A discharge flow-photoionization
mass spectrometric study of the
PO($X^2\Pi_i$) radical.
Photoionization efficiency spec-
trum and ionization energy.

FO

JF 38058

1995

F: FO

P: 3

06.Д.0145. эмпирические колебательные постоянные FO{+} и FO.
FO{+} and FO ab initio vibrational constants / Johnson Russell D. (III) //
Chem. Phys. Lett. - 1995. - 245, N 4-5. - С. 484-487. - Англ.

The potential energy surfaces for both FO neutral and cation were calculated at CCSD(T)/cc-pVTZ (sixty basis functions). From these surfaces the vibrational levels were obtained using the Fourier grid Hamiltonian method. The spectroscopic constants obtained are: FO $\omega_{\text{mera}}[e]=1072 \text{ cm}^{-1}$ and $\omega_{\text{mera}}[e]x[e]=12 \text{ cm}^{-1}$, FO{+} $\omega_{\text{mera}}[e]=1331 \text{ cm}^{-1}$ and $\omega_{\text{mera}}[e]x[e]=11 \text{ cm}^{-1}$. The same calculations on the isoelectronic (to FO{+}) O[2] molecule yield an $\omega_{\text{mera}}[e]$ within 1% of the spectroscopically determined value and within 20% for $\omega_{\text{mera}}[c]x[e]$. The Franck-Condon factors were calculated for transitions from the lowest two levels of FO to



X. 1996, N 6

$\text{FO}\{+\}$. The peak intensity for the transition $\text{FO}\{+\}(\text{X}\{3\}'\text{CH}\Gamma\text{MA}'\{-\})' < \text{FO}(\text{X}\{2\}'\text{ПH}'\nu''=0)$ occurs at $\nu'=2$.



FO^+

F: FO+
P: 3

0538058

1995

06Д.0145. эмпирические колебательные постоянные FO{+} и FO. FO{+} and FO ab initio vibrational constants / Johnson Russell D. (III) // Chem. Phys. Lett. - 1995. - 245, N 4-5. - С. 484-487. - Англ.

The potential energy surfaces for both FO neutral and cation were calculated at CCSD(T)/cc-pVTZ (sixty basis functions). From these surfaces the vibrational levels were obtained using the Fourier grid Hamiltonian method. The spectroscopic constants obtained are: FO 'omera'[e]=1072 cm{-1} and 'omera'[e]x[e]=12 cm{-1}, FO{+} 'omera'[e]=1331 cm{-1} and 'omera'[e]x[e]=11 cm{-1}. The same calculations on the isoelectronic (to FO{+}) O[2] molecule yield an 'omera'[e] within 1% of the spectroscopically determined value and within 20% for 'omera'[c]x[e]. The Franck-Condon factors were calculated for transitions from the lowest two levels of FO to FO{+}. The peak intensity for the transition FO{+}(X {3}'CHГMA'{-})<-FO(X {2}'ПН' v''=0) occurs at v'=2.

X. 1996, N 6

FO⁺
FO

OT 38058

1995

1237324616v FO⁺ and FO ab initio vibrational constants. Johnson, Russell D. III (Chemical Kinetics and Thermodynamics Division, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD 20899 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1995, 245(4,5), 484-7 (Eng). The potential energy surfaces for both FO neutral and cation were calcd. at CCSD(T)/mL-pVTZ (sixty basis functions). From these surfaces the vibrational levels were obtained using the Fourier grid Hamiltonian method. The spectroscopic consts. obtained are: FO $\omega_e = 1072 \text{ cm}^{-1}$ and $\omega_e x_e = 12 \text{ cm}^{-1}$, FO⁺ $\omega_e = 1331 \text{ cm}^{-1}$ and $\omega_e x_e = 11 \text{ cm}^{-1}$. The same calcs. on the isoelectronic (to FO⁺) O₂ mol. yield an ω_e within 1% of the spectroscopically detd. value and within 20% for $\omega_e x_e$. The Franck-Condon factors were calcd. for transitions from the lowest two levels of FO to FO⁺. The peak intensity for the transition FO⁺(X ³ Σ^-) ← FO(X ² Π v' = 0) occurs at v' = 2.

констан.
vib. аб иницио
расчет

C. A. 1995, 123, N24

1995.

F: FO

P: 3

01 58058

11B129. Радикал FO[2]. овый успех теории функционала плотности. The FO[2] radical: A new success of density functional theory / Ventura Oscar N., Kieninger Martina // Chem. Phys. Lett. - 1995. - 245, N 4 5. - С. 488-497. - Англ.

Методом функционала плотности (B3LVP в базисе 6-311++ГФ (3df, 3pd) рассчитаны геометрич. параметры, частоты и энергии нулевых колебаний молекул FO[2] ($(2)A''$), O[2], OH, FO, H[2]O, FOH, HO[2], F[2]O[2], а также теплоты большого числа р-ций, включающих гомолитич. разрыв связей FO и O, и теплота образования FO[2]. По мнению авторов, используемый подход обладает определенными преимуществами в описании энергетики связей FO по сравнению с другими современными неэмпирич. "термохимическими" процедурами..DHf(FO[2])

X.1996, N 11.

FO

1996

(125: 341578t Studies of XO (X = F, Cl, Br, I) radicals using HeI photoelectron spectroscopy and density functional theory. Hong, Gongyi; Wang, Dianxun (State Key Lab of Molecular Unstable and Stable Structure, Academia Sinica, Beijing, Peop. Rep. China 100080). *Huaxue Tongbao* 1996, (8), 39-40 (Ch). The electronic structures of free radicals FO, ClO, BrO obtained by thermal decompn. of FONO₂, ClONO₂, BrONO₂, resp., and IO obtained by reaction of I₂ with O were studied by HeI photoelectron spectroscopy. The ionization energies of the free radicals in various ionic states were measured and compared with the results calcd. by the d. functional theory.

по могл.
сруктур

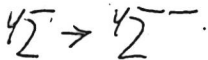
(2) ClO, BrO

△

C.A. 1996, 125, n 26

FO

1996



monom. pair
 H₂O
 $4\bar{\Sigma}^-$ common.

125: 96549j The $4\bar{\Sigma}^-$ states of the FO radical. Huang, Ming Bao (Dep. Chem., Academia Sinica, Beijing, Peop. Rep. China 100039). *Chin. Chem. Lett.* 1996, 7(5), 475-478 (Eng). For studying the $4\bar{\Sigma}^- \rightarrow 4\bar{\Sigma}^-$ transition in the FO radical to which an obsd. 268 nm ASE line was attributed, the potential energy curves of the 4 lowest-lying $4A_2$ states of FO were calcd. using the MRSDCI method. The 1st $4\bar{\Sigma}^-$ (1^4A_2) and the upper $4\bar{\Sigma}^-$ (4^4A_2) states are weakly bound and bound states, resp., and the 2^4A_2 and 3^4A_2 states are both repulsive states which are not relevant to the emission. The predicted Te value for the $4\bar{\Sigma}^- \rightarrow 4\bar{\Sigma}^-$ transition is 4.62 eV, which is in excellent agreement with the photon energy value (4.6 eV) of the ASE line. The procedure of the MRSDCI calcs. for excited states is described in detail, and the previous calcn. results for these states are discussed.

C.A. 1996, 125, N8

FD

(DM-38661)

1996

геометрия,
гармония.
гастом,
из кн. кн.,
у

Lee T.F., Rice J.E. et al.,
Mol. Phys., 1996, 89,
N 5, 1359-62.

OF

Li, Xiangzhu,
Paldus, Isid;

1996

мел.
расцен
мел.мел.
сочно-ст.

J. Chem. Phys., 1996, 104(23),
9555-62.

FO

1996

McBrath M.P., Rowland F.S.

U.N.

M, J. Phys. Chem. 1996, 100,
No. 12, 4815-4822.

Ac

Сравнительное исследование гомоло-
гич. галогеносоединений в остовных
и ароматических
растворах. 15 5164

1999

F: FO

P: 3

132:142220 Bonding in mixed halogen and hydrogen peroxides. Bridgeman, Adam J.; Rothery, Joanne
University Chemical Laboratories Cambridge
CB2 1EW, UK J. Chem. Soc., Dalton Trans., (22), 4077-4082 (English) 1999 The geometries and vibrational frequencies of the hydrogen and halogen peroxides XOOX' and the XOO and XO fragments ($\text{X}, \text{X'} = \text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ or I) studied using non-local d. functional theory. The X-O , X'-O and O-O bond energies were calcd. and likely dissocn. paths for these atmospherically important or potentially important mols. suggested. The sulfur analogs w also examd. A unified model for these chem. diverse species is presented on the interaction between O_2 and $\text{X} \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \text{X}$ fragments. correlation between their electronic structures is outlined. The

C-A. 2000, 132

antibond nature of the interaction between the halogen lone pairs and the π orbital of the O₂ fragments causes lengthening and weakening of the halogen-oxygen bonds. The electronegativity of X and X' determines the extent and direction of electron transfer between the O₂ and X...X fragments. O-O bond order is thus sensitive to the nature of the substituents and the multiple bond character decreases steadily as the electronegativity of X decreases. The O-O bond strengths, though, are also affected by steric interactions between the halogen 'lone pairs'. The O-O bonds in the HO-O species are thus much stronger than the bond orders and lengths suggest.

FO

[Om. 40017]

1999

Filippo Tamassia et al.,

U. N. J. Chem. Phys., 1999,

110, N15, 7273...

monoko 2cm.

Fine structure  spectrum
of FO radical, observed by

Far - infrared laser magnetic
resonance.



Qm. 40385

2000

F: FO

P: 3

133:314998 Valence and Rydberg States of FO: An ab Initio Search for Electronic Transitions. Lane, Ian C.; Orr-Ewing, Andrew J. School of Chemistry, University of Bristol Bristol BS8 1TS, UK J. Phys. Chem. A, 104(38), 8759-8764 (English) 2000. An electronic absorption spectrum of FO has yet to be obsd. exptl. but as a guide for future spectroscopic studies of this radical, CASSCF/MRCI ab initio calcns. were performed to locate and identify the lowest energy valence and Rydberg states. No bound valence excited

potentials were found save the a4.SIGMA.- state. The calcns. provide ests. of the transition energies T_e to the lowest Rydberg states and the wavelengths required for spectroscopic detection. Results for both the doublet and quartet states are presented, revealing the 3s.sigma., 3p.pi., 3p.sigma., 3d.delta., 4s.sigma., 3d.pi., and 4d.delta. Rydberg orbitals. Probably the repulsive valence states 12.SIGMA.- and 12.DELTA. predissociate the lowest Rydberg states of the same symmetry. Consequently, the 2.PI. Rydberg states, 3 of which are found here, are the most promising candidates for optical detection.

F: OF

2000

P: 3

132:257435 Selective vibrational excitations in the
OX (X=F, Cl, Br, I) molecules. Leonard, Celine;
Le Quere, Frederic; Rosmus, Pavel; Puzzarini, Cristina;
Pilar de Lara Castells, Maria Laboratoire de Chimie
Theorique, Universite de Marne-la-Vallee Marne-la-
Vallee F- 77454, Fr. Phys. Chem. Chem. Phys., 2(6),
1117-1122 (English) 2000 ~~Royal Society of Chemistry~~

C. A. 2000

Using ab initio calcd. potential energy and elec. dipole moment functions for the X2.P1. states of OF, OCl, OBr and OI, two models were tested to selectively populate their vibrational modes by ultrashort coherent light pulses. For a given form of the pulses either a perturbative approach using discrete vibrational eigenstates and elec. dipole transition moment matrix elements or a wavepacket propagation technique were used. The optimization of the pulse parameters and the mechanisms of the multiphoton processes are discussed. For the target level $v = 10$ populations of $>60\%$ were achieved in all four mols. For OCl it was possible to populate selectively all target levels between $v = 2$ and $v = 15$ using chirped pulses.

~~selective vibrational excitation balance~~

2000

F: FO

P: 3

132:257440 The detection of the free radical FO
(X2.PI.3/2) by submillimeter-wave spectroscopy.

Tamassia, Filippo; Brown, John M.; Saito,
Shuji Physical and Theoretical Chemistry
Laboratory Oxford OX1 3QZ, UK J. Chem.
Phys., 112(13), 5523-5526 (English) 2000

Pure rotational transitions of the free radical FO in its X2.PI.3/2 ground electronic state have been detected by millimeter-wave spectroscopy. Four transitions, which are all magnetic dipole in character, were measured in the frequency region from 219 to 408 GHz. The radical was produced by a well-known efficient reaction between ozone and

C.A. 2000

fluorine atoms. The high sensitivity available in the submillimeter-wave region and a very efficient prodn. method were essential for the detection of rotational transitions in this radical, which many other people have attempted in the past. No elec. dipole transitions have been detected in this expt. The precision of parameters assocd. with the rotational motion of FO has been improved considerably by fitting these lines together with previous data. Moreover, the parity-dependent nuclear spin rotation term CI' has been detd. for the first time. The r_0 and r_e structures of FO have been revised accordingly.

2001

F: FO

P: 3

134:272801 **The X12Π3/2 and X22Π1/2 Potential Energy Surfaces of FO.** Miller, Charles E.; Drouin, Brian J. Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA. J. Mol. Spectrosc. (2001), 205(2), 312-318. in Engl.

The X12Π3/2 and X22Π1/2 potential energy curves of the FO free radical were detd. from a fit to the available high-resoln. spectroscopic data. The data set spans the vibrational states $v = 0-7$ and includes X22Π1/2 X12Π3/2 fine-structure transitions. The determinable spectroscopic consts. provide an excellent description of the equil. properties of both the X1 and X2 states in addn. to the vibrational dependence of the spin-orbit coupling const. The exptl. properties of FO were used to evaluate the performance of different ab initio methods for describing the F-O bond.



FO

2001

134: 214302j A Study of the (2-0) Overtone Bands of the FO, BrO, and IO Free Radicals by Laser Magnetic Resonance. Tamassia, Filippo; Kermode, Stephen M.; Brown, John M. (The Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Mol. Spectrosc.* 2001, 205(1), 92-101 (Eng), Academic Press. The (2-0) overtone bands of the FO, BrO, and IO free radicals in their ground electronic state $X^2\Pi_{3/2}$ were detected by laser magnetic resonance. The data obtained from this work were fitted together with data from previous work. A set of mol. parameters, including vibrational, rotational, centrifugal distortion, spin-orbit, λ -doubling, hyperfine, and Zeeman terms, was detd. for each mol. (c) 2001 Academic Press.

(2-0) nonoc

of $X^3\Pi_{3/2}$ conf(u.n.) Δ (+2)

C.A. 2001, 134, N15.

FO
F₂O
FO₂
FOOF
J. Phys. Chem. A 2003, 107, 9641-9651.
Coupled Cluster Theory and
Multireference Configuration
Interaction Study of FO, F₂O,
FO₂ and FOOF.

em. 41942

2003

D. Feller, D. A. Dixon

J. Phys. Chem. A 2003, 107, 9641-9651.

prop. paper
esp. K. R. 16,
w₂, v₁,
A & K 298