

HF

1971

✓ 11 Б152. Колебательная релаксация фтористого водорода. Airey J. R., Fried S. F. Vibrational relaxation of hydrogen fluoride. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 8, № 1, 23—26 (англ.)

Методом лазерной флуоресценции измерена скорость колебательной релаксации молекул HF при t -ре 350° К. Флуоресценция возбуждалась импульсным хим. лазером HF ($v=1$, $I=5 \rightarrow v=0$, $I=6$) работающим на смеси $F_2O + HCl$. Измерения выполнены для чистого HF и для смесей HF с Ar, N_2 , F_2 и H_2 . Для чистого HF получено $\rho\tau = 0,014$ мсек·атм, а для смесей определены лишь нижние границы $\rho\tau$: $\rho\tau(Ar) > 4$, $\rho\tau(F_2) > 1$, $\rho\tau(N_2) > 4$ мсек·атм. Значение $\rho\tau$ для смеси HF + H_2 такого же порядка, что и для чистого HF. М. Р. Алиев

колебательная
релаксация

X. 1971.

11

MF

X1-861

1971

23 Б1160. Масс-спектрометрическое изучение фото-
ионизации F_2 , HF и DF . Berkowitz J., Chur-
ka W. A., Guyon P. M., Holloway J. H.,
Spohr R. Photoionization mass spectrometric study of
 F_2 , HF , and DF : «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 12.
5165—5180 (англ.)

J

20

На основании анализа пороговой области кривой эф-
фективности фотоионизации. (КЭФ) F_2 с образованием
 F_2^+ определен 1-й потенциал ионизации $I(F_2) = 15,686 \pm$
 $\pm 0,006$ эв. Процесс $F_2 + h\nu \rightarrow F^+ + F^-$ (1) начинается при
немного меньших энергиях. Он приписан пересечению ти-
па Ландау — Зенера ридберговских состояний, сходящихся
к основному состоянию $F_2^+(^2\Pi)$, с кривыми потенци-
альной энергии, соотв. разделенным ионам F^+ и F^- в
основных состояниях. Процесс (1) дает существенный



см. также F_2 (III)

X. 1971.23

X

вклад в ионизацию и при более высоких энергиях в области порога процесса $F_2 + h\nu \rightarrow F^+ + F + e^-$. Путем вычитания интенсивности ионного тока F^- из интенсивности F^+ в этой области получена скорректированная величина пороговой энергии 19,01 эв, что соответствует энергии диссоциации $D_0(F_2) = 1,59 \pm 0,01$ эв. При фото-

ионизации HF и (DF) также обнаружены ионизация с образованием молек. иона, образование ионной пары и диссоциативная ионизация. Получено $I(HF) = 16,00 \pm 0,01$ и $I(DF) = 16,03 \pm 0,01$ эв. Скорректированные величины пороговой энергии образования H^+ и D^+ равны 19,44 и 19,51 эв соотв., что дает $D_0(HF) = 5,84 \pm 0,01$ эв. На КЭФ и HF обнаружены автоионизац. пики и дана их колич. интерпретация. По резюме

HF

Berkowitz, Joseph.

1971

(Do)

"Electron Spectroscopy", Proc. Int. Conf.
1971, 391-9 (Pub 1972)

• (cell F_2 , III)

HF

1971

7 Б15. Экспериментальные кривые потенциальной энергии $X^2\Pi$ и $2\Sigma^+$ состояний HF^+ . Berkowitz J. Experimental potential energy curves for $X^2\Pi$ and $2\Sigma^+$ states of HF^+ . «Chem. Phys. Lett.», 1971, 11, № 1, 21—26 (англ.)

Методом фотоэлектронной спектроскопии исследованы молекулы HF и DF. В спектре HF найдено 4 колебательных полосы, соответствующих трем стационарным связанным состояниям и одному квазистационарному, в спектре DF найдено 5 полос, соответствующих четырем стационарным и одному квазистационарному состояниям. Из анализа

ш.п.

Do

+2

X. 1972. 7



колебательных полос получены след. величины энергий диссоциации D : $D(\text{HF}) \geq 5,86$ эв, $D(\text{F}_2) = 1,59$ эв, а также спектроскопич. постоянные ω_e , $\omega_e x_e$, r_e , D_e состояний $X^2\Pi$ и $^2\Sigma^+$ иона HF^+ и величина спин-орбитального взаимодействия в состоянии $^2\Pi$. Полученные данные сопоставляются с неэмпирич. расчетом иона HF^+ (см. пред. реф.). Согласно эксперименту, глубина потенциальной ямы состояния $^2\Sigma^+ \text{HF}^+$ равна 0,45 эв, что на 0,08 эв больше, чем по данным хартри-фоковского расчета.

А. Зембеков

ФН (м.п.) 1971
Борисов Ю.А., Булаков Н.Н.

„Теория функций оболочек
атомов и молекул“
Высшее, Минск, 1971,
167-169, ”

с. 171

FH

cer. no ob.

Boyd R.F.
Whitehead 'M.A.

1971.

J. Chem. Soc.,

y

1971, A, ~22, 3579.

(Cer. BH) IV

Сравнение, орбит. времени и времени
потенциалов калишанцев (9V)

Система параметров

М-ла Орбит. I II III IV экстр.

FH	π	16.45	15.16	16.78	15.63	16.05 π
	σ	17.21	16.12	17.86	17.02	20.00 σ
	σ	39.31	41.73	38.64	40.85	

H₂, HF, LiF, BF (cur. a. / pariem) / 5839 1971

Cavallp L., Cavalier J.-C.,

C.R. Acad. sci., 1971, C273, N14, 801-804
(gopans.)

théorique des géométries
libre et des constante de
les molécules diatomiques
la métho C.N.D.O.

1972, 5577

10 [C.N.D.O.]

HF

XI-1823

1971

Do

23 В1159. Кинетическая энергия ионов, образованных при фотоионизации HF и F₂. Chupka W. A., Berkowitz J. Kinetic energy of ions produced by photoionization of HF and F₂. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 12, 5126—5132 (англ.)

С помощью комбинации монохроматора вакуумного УФ-света и специального масс-спектрометра, позволяющего измерять кинетич. энергии (КЭ) ионов, изучены процессы $HF + h\nu \rightarrow H^+ + F^-$ и $F_2 + h\nu \rightarrow F^+ + F^-$ в пороговой области энергий возбуждающего света. Найдены 2 возможных значения энергии диссоциации

● См. также F₂ (III)

X. 1971.23

☒

$D_0(\text{HF}) = 5,91 \pm 0,02$ или $5,87 \pm 0,02$ эв, из к-рых послед-
нее совпадает с результатами более точных измере-
ний. Эта величина подтверждает значение сродства
атома F к электрону (3,400 эв). Получено также
 $D_0(\text{F}_2) = 1,58 \pm 0,03$ эв. Измерения КЭ показывают, что
ионы F^+ из F_2 образуются не только в основном сос-
тоянии 3P_2 , но и в состояниях 3P_1 и (или) 3P_0 . При по-
вышении энергии фотонов из F_2 образуются также
ионы $\text{F}^+(^1D)$. Обсуждаются процессы диссоциации и
преддиссоциации молек. ионов. В. Е. Скурат

HF

D₀

X1-1823

1823

(40573u) Kinetic energy of ions produced by photoionization of hydrogen fluoride and diatomic fluorine. Chupka, W. A.; Berkowitz, I. (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(12), 5126-32 (Eng). Kinetic energies were measured for the pos. ions produced in the ion-pair formation processes $\text{HF} + h\nu \rightarrow \text{H}^+ + \text{F}^-$ and $\text{F}_2 + h\nu \rightarrow \text{F}^+ + \text{F}^-$ at a no. of wavelengths in the region of the thresholds for these processes. The measurements prove that the dissoen. energy $D_0(\text{HF})$ is either 5.91 ± 0.02 or 5.87 ± 0.02 eV, depending on the value of the electron affinity of the F atom. Since the latter value for $D_0(\text{HF})$ agrees well with other more precise detns., these results support the value E.A. (electron affinity) (F) = 3.400 eV. The kinetic energy measurements also prove that $D_0(\text{F}_2) = 1.58 \pm 0.03$ eV. The measurements strongly suggest that the F^+ ions from F_2 are produced not only in the 3P_2 ground state but also in 3P_1 and (or) 4P_0 states as well. At higher photon energies, the F^+ ions from F_2 are also produced in the 1D state. Dissoen. and predissoen. processes of the mol. ions are discussed.

C.A.

1823 456



40573 (42)



HF

X1-26 20

1971

(1 Д142.) Теория молекулярных взаимодействий. II. Изучение полимеров HF методом молекулярных орбиталей с использованием минимального базиса слэтеровского типа. Del Bene Janet E., Pople J. A. Theory of molecular interactions. II. Molecular orbital studies of HF polymers using a minimal Slater-type basis. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 5, 2296—2299 (англ.)

Энергия E групп из n молекул HF вычислялась неэмпирич. методом МО ЛКАО ССП на миним. базисе слэтеровских АО, каждая из которых аппроксимирована линейной комбинацией из 4 гауссовых ф-ций. С предварительной оптимизацией базиса получены следующие значения: экспоненты $\zeta_{1s}=1,30$ для H, $\zeta_{2s}=8,65$, $\zeta_{2p}=\zeta_{2p}=2,55$ для F, $R(H-F)=0,938 \text{ \AA}$ (0,917), дипольный момент равен 1,39 ед. Дебая (1,82), $E=-99,2702$ ат. ед. (в скобках — эксперим. значения). При $n=2$ варьировалось расстояние между молекулами, и при всех расстояниях

ДЛХ
ИМНС

9, 1972, 12-3637

каждая из молекул ориентировалась по 12 направлениям икосаэдра. Из 144 взаимных ориентаций были выделены 16 существенно различных, и вблизи самой выгодной из точек полученного таким образом межмолекулярного потенциала плавным образом варьировалась геометрия димера. Получено, что $R(F-R) = 2,55 \text{ \AA}$, $\Delta E = 5,2 \text{ ккал/моль}$ (эксперим. 5—7), обе молекулы — в одной плоскости, угол между $F-F$ и осью донора 4° , между $F-F$ и осью акцептора 111° . Жесткость $(HF)_2$ больше жесткости $(H_2O)_2$. Из этих димеров конструировались плоские цепи ($n=3, 4, 5$). Оказалось, при всех n наиболее устойчива полностью *цис*-конформация, а стабильность растет с n резко нелинейно: $\Delta E = 13,6; 22,4$ и $44,5 \text{ ккал/моль}$. Еще более стабильны ($\Delta E = 19,3; 45,4; 63,1$ и $76,1 \text{ ккал/моль}$) циклич. полимеры $(HF)_n$, $n=3; 4; 5; 6$, построенные в симметрии C_n с варьированием радиуса многоугольника F_n , угла поворота FH в плоскости F_n и угла отклонения FH от этой плоскости (он оказался равным 0 при всех n , т. е. устойчивая симметрия C_{nh}). Подчеркивается заметная неаддитивность Н-связей: напр., вышеупомянутый межмолекулярный потенциал положителен для димера, мысленно выделенного из циклич. пентамера. Ч. I см. РЖФиз, 1970, 10Е120.

Ю. Е. Эйзнер

XI-937

1971

O_2 ; S_2 ; Se_2 ; Te_2 ; S_6 ; S_8 ; F_2 ; HCN ; HF(J)

Guyon PM, Berkowitz J.

J Chem Phys, 1971, 54, N4, 1814-26

CA, 1971, 74, N16, 81386h HO

X 3056] Расчет волн. стр. до (BeH_2 , BeH , BeH
 BeH_2 , BH_3 , CH , CH_2 , CH_3 , NH , NH_2 , NH_3 , CH_4 ,
 OH , OH_2 , FH , FH_2)

Hanson R.H., Frenkel G.,
Theor. chim. acta, 1971, 20, N 2,
105-112.

W

(op)

лет. ф.к

РХТО

$\text{BeH}_2, \text{BH}_3, \text{CH}_4, \text{NH}_5, \text{OH}_2, \text{HF}$ (структура, 1971)
к.мех. расчёт

IX 2999

Hansen K.H., Frenkel E.,

Theor. Chim. Acta, 1971, 20, N2, 93-100.
(нем.)

Spin valence calculations in
 AH_n molecules. I. Molecular geo-
metry of valence structures.

10 16 (D)

CA, 1971, 74, N12, 57396r

HF, (HF)₂ (v_i)

VI 2832

1971

Himes J.L., Wiggins T.A.,
J. Mol. Spectrosc., 1971, 40, N 2, 418-
- 420 (anus.)

Rotational structure in the
HF dimer spectrum.

B

BreLum, 1972, 125274

60

(+)

HF

X1-832

1971

13058y Submillimeter-wave spectra and equilibrium structures of the hydrogen halides. De Lucia, Frank C.; Helminger, Paul; Gordy, Walter (Dep. Phys., Duke Univ., Durham, N.C.). *Phys. Rev. A* 1971, [3]3(6), 1849-57 (Eng). Rotational transitions of a no. of isotopic species of the H halides have been measured in the 1.0- to 0.38-mm wavelength region of the spectrum. These transitions have been measured with a submm-wave spectrometer which employs a klystron-driven crystal harmonic generator and a 1.6°K InSb photoconducting detector.

Cp-pa

HCl
 (+3) HBr
 IX HS

C. A. 1971 752

Pg 14, 1972, 15222

HF

Julienne, P. S.; et al.

1971

"Chem. Phys. Lett."

1971, 11 (1), 16-20.

Крат.
назв.
Инф.

"Hartree-Fock energy curves for ...

● (см. HF⁺; III)

HF

XI-1099

1981

20 Б168. Спектры HF и DF изолированных в матрицах инертных газов в средней и длинноволновой инфракрасных областях. Mason M. G., Von Holle W. G., Robinson D. W. Mid-and far-infrared spectra of HF and DF in rare-gas matrices. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 8, 3491—3499 (англ.)

В ИК-области до 16 см^{-1} в Ne-, Ar-, Kr- и Xe-матрицах при $t \approx 4^\circ \text{K}$ получены колебательно-вращательные и чисто вращательные спектры HF и DF и проведено отнесение полос, соотв-щих мономерным молекулам. По



(см. также HF) III

X.1981.20

IX

величинам смещений чисто колебательных уровней вычислены параметры Леннарда—Джонса для взаимодействия полярной молекулы с ее соседними атомами. Для HF рассчитан центр действия дисперсионных сил и определены вращательные возмущения. Обнаружено, что величина эксперим. сдвигов частот не согласуется с теорией вращательно-трансляционного взаимодействия, но это несоответствие и отклонения др. параметров учитываются при рассмотрении анизотропии вращательной потенциальной функции.

О. Г. Гаркуша

HF

эмиссион.
спектр;

10 Б91. Определение исходного распределения колебательной энергии методом инфракрасной хемилюминесценции. 1. Реакция атомов фтора с водородом и метаном. Jonathan Neville, Melliar-Smith C. M., Slater David H. Initial vibrational energy distributions determined by infrared chemiluminescence. I. The reaction of fluorine atoms with hydrogen and methane. «Mol. Phys.», 1971, 20, № 1, 93—102 (англ.)

Исследован эмиссионный спектр в ИК-области молекул HF, образованных при р-ции атомов F с молекулами H_2 и CH_4 . Обнаружены линии колебательно-вращательных переходов из возбужденных состояний с $v' \leq 3$. Из относит. интенсивности линий определено распределение молекул HF по колебательно-вращательным уровням. Путем экстраполяции временной зависимости относит. заселенности колебательных уровней к начальной стадии р-ции вычислены относит. константы скорости заселения колебательных уровней: $k_3/k_2=0,76$, $k_2/k_1=3,4$ ($F+H_2$) и $k_3/k_2=0,23$, $k_2/k_1=3,0$ ($F+CH_3$).
М. Р. Алиев

X. 1971. 10

Ионет электро. (CH, CH⁺, CH₂, CH₂⁺, CH₃, CH₃⁺,
 иониз. $\Sigma i, \nu_i$ (CH₄; CH₄⁺, CH₅; CH₅⁺, NH₃,
 Сил. ност NH₃⁺, NH₂; NH₂⁺; NH₃; NH₃⁺;
 NH₄; NH₄⁺; OH, OH⁺, OH₂; FH,
 OH₂⁺; OH₃; OH₃⁺; FH, FH⁺, FH₂)

Khan W. A., Mehre W. J., Curtiss L. J.
 Pople J. A.
 J. Amer. Chem. Soc., 1971, 93, N24,
 6377-87

60

PX72

HF

1971

98706p Vibrational energy of linear molecules and allowed transitions in infrared and Raman spectra. Malisek, Vladimir (Natl. Sci. Fac., Univ. Palacký, Olomouc, Czech.). *Acta Univ. Palacki. Olomuc., Fac. Rerum Natur.* 1971, No. 33, 309-23 (Eng). Some quantum mech. and group-theor. characteristics of the vibrational state of a mol. are presented: the description of the vibrational state by means of sym. powers of the irreducible representations; the formulation of general selection rules in ir and Raman spectra; the illustration of a general way for the case of linear mols. For example, mols. XY (HF, TF, HCl, TCl, HBr, TBr, HI, NO, CO) and XYZ mols. (HCN, TCN, FCN, ClCN, BrCN, ICN, SCO, SCSe, SCTe) belong to the symmetry $C_{\infty v}$; the $D_{\infty h}$ symmetry appears in cases of X_2 (H_2 , D_2 , O_2 , N_2), X_3 (C_3 in C_3O_2 , N_3 in KN_3) and YXY (HCN, TCN, FCN, ClCN, BrCN, ICN, SCO, SCSe, SCTe) mols.

C. D. 1973. 79 N16



(117)

(100) 1973. 79 N16
 1973. 79 N16
 1973. 79 N16

HF

1941

132650z; Mid- and far-infrared spectra of hydrogen fluoride and deuterium fluoride in rare-gas matrices. Mason, M. G.; Von Holle, W. G.; Robinson, Dean Wentworth (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(8), 3491-8 (Eng). The "vibration-rotation" and "pure rotation" spectra of HF and DF in rare-gas matrices near 4°K were studied, and assignments of the features due to the monomeric mols. were made. The perturbations of the purely vibrational levels were used to compute Lennard-Jones parameters for the interaction between the polar mol. and its neighboring atoms. The center of action of the dispersion forces were calcd. for HF, and the rotational perturbations were evaluated. The spectral absorption frequencies are rather well reproduced. The exptl. frequency shifts are not consistent with a theory of rotational-translational coupling but they, and other "anomalous" spectral features, are predicted by considerations of the anisotropies in the rotational potential function. RCJQ

chem

rept

ll.h.

6601-1

(1)

C.A. 1971. 44.24



HF, DF (u.n.)

XI 2855

1971

Mason M. G.,

Diss. Abstr. Int., 1971, B32, N1, 208 (anw.)

Infrared spectra of matrix isolated hydrogen fluoride and deuterium fluoride.

10

Ⓢ

CA, 1972, 76, N2, 8521k

HF

1971

21 Б139. Инфракрасная хемилюминесценция в реакции атомов водорода с дифторидом кислорода. Регоня М. J. Infrared chemiluminescence from the reaction of hydrogen atoms with oxygen difluoride. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 9, 4024—4028 (англ.)

Струю H_2 , прошедшего область высоковольтного разряда, смешивали со струей OF_2 в сосуде из нерж. стали, снабженном окнами из $NaCl$. Вращательно-колебательный спектр испускания HF — продукта р-ции; $H + OF_2 \rightarrow HF^* + OF$ ($\Delta H = -92,9$, $E_{акт} = 2-3$ ккал/моль) — записан в области основной частоты и 1-го обертона

спектр

HF

маленький

X. 1971.21


 (H) I


(3300—8000 см^{-1}). С использованием ЭВМ получены след. относит. заселенности колеб. уровней $v=1, 2, \dots, 8$, исправленные с учетом излучательной релаксации (время жизни 1—5 мсек) и ударной дезактивации молекулами H_2 : 1,1; 1,4; 1,0; 0,71; 0,45; 0,22; 0,011; 0,012. Вращательное распределение больцмановское для $v=1$, но не больцмановское для $v=2$ и 3 при $J>6$; линейные участки графиков распределения соответствуют $T_{\text{вращ}}=436^\circ \text{K}$. В колебательно-вращательную энергию HF переходит не меньше 32% от $-\Delta H + E_{\text{акт}}$; сравнение частот колебаний ν_{OF} в OF_2 и в OF (831 и 1028 см^{-1}) показывает, что в р-ции укорачивается связь O—F и, следовательно, часть энергии р-ции переходит в энергию колебаний OF. В родственной р-ции $\text{H} + \text{OCl}_2 \rightarrow \text{HCl}^* + \text{OCl}$ HCl забирает также $\sim 30\%$ выделяющейся энергии, однако, в отличие от системы $\text{H} + \text{OF}_2$, параллельно образуются HOCl и Cl.

Р. Васильев

HF

1941

№ 6 Б17. Сопоставление двух методов определения зарядов на атомах на примере молекулы HF. Politzer Peter, Mulliken Robert S. Comparison of two atomic charge definitions, as applied to the hydrogen fluoride molecule. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 10, 5135—5136 (англ.)

Обсуждены недостатки метода анализа заселенностей Малликена при вычислении эффективных зарядов на атомах в молекулах — зависимость результатов от базисного набора АО (необходимость использования сбалансированного базисного набора) и трудности отнесения плотности перекрывания к отдельным атомам.

РЖХ, 1942, № 6

Предложено вычислять эффективные заряды непосредственно из молек. распределения электронного заряда путем интегрирования функции электронной плотности по областям, ассоциированным с отдельными атомами, определяя эти области через накладывающиеся распределения зарядов свободных атомов (см. РЖХим, 1971, 6Б25). При таком подходе - два расчета молекулы HF (РЖХим, 1964, 15Б26 и 1962, 21Б11) приводят к одинаковым зарядам на H (+0,27) и F (-0,27), тогда как при обычном делении заселенности перекрывания они дают расходящиеся результаты (для H +0,23 и +0,48).

М. Дяткина

$\text{H}\underline{\text{F}}$, $\text{H}\underline{\text{Cl}}$, $\text{H}\underline{\text{Br}}$, $\text{H}\underline{\text{I}}$, H_2O , H_2S , H_2Se , H_2Te , (сверх) 1
 NH_3 , PH_3 , AsH_3 , SbH_3 , CH_4 , SiH_4 , GeH_4 , SnH_4 1971

Price W.C., Potts A.W., XI 276

3rd Int Conf. dig. Tokyo, 1971,
1PA2-2/1 - 1PA2-2/4 (ann.)

The photoelectron and vacuum
ultraviolet spectra of the hyd-
rides of the elements in groups
IV, V, VI, and VII. y nej bag 6

P. Linn, 1972, 85176 to c. 2. 2. 2.

НГ

XI 2647

1971

1 Д201. Неэмпирический расчет силовых постоянных и равновесной геометрии. III. Гидриды второго периода. Pulay P. Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries. III. Second-row hydrides. «Mol. Phys.», 1971, 21, № 2, 329—339 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых орбиталей вычислены силовые постоянные, равновесные структурные параметры и дипольные моменты молекул HF , NH_3 , CH_4 и BH_4^- . Силовые постоянные определялись по теореме Гельмана—Фейнмана путем численного дифференцирования сил, действующих на ядра. Результаты расчета находятся в удовлетворительном согласии с эксперим. данными. Ч. II см. РЖФиз, 1970, 10Д169.

М. Р. Алнев

+3

9, 1972, 10-201



HF

N 2647

1971

2 Б45. Неэмпирический расчет силовых постоянных и равновесной геометрии. III. Гидриды элементов второго периода. Pulay P. Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries. III. Second-row hydrides. «Mol. Phys.», 1971, 21, № 2, 329—339 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых орбиталей вычислены силовые постоянные и равновесные структурные параметры и дипольные моменты молекул HF, NH₃, CH₄ и BH₄⁻. Силовые постоянные определялись по теореме Гельмана—Фейнмана путем численного дифференцирования сил, действующих на ядра. Результаты расчета находятся в удовлетворительном согласии с эксперим. данными. Сообщ. I см. РЖХим, 1970, 8Б80.

М. Р. Алнев

Сил. п.

Атом.
струк.

X. 1972.2

+3



HF

41-2647

1941

819037 Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries. III. Second-row hydrides. Pulay, P. (Res. Group Inorg. Chem., Hung. Acad. Sci., Budapest, Hung.). *Mol. Phys.* 1971, 21(2), 329-39 (Eng). Force consts. of the mols. HF, NH₃, CH₄ and BH₄⁻ have been calcd. ab initio by the force method with a 73/3 + 1 gaussian lobe basis set. The results, including a former calcn. on H₂O, agree well with expt.: the av. relative error is 12% for the diagonal force consts. and the av. abs. error is 0.06 mdyne/Å for the off-diagonal ones. The trends are also correctly reproduced. Ab initio calcs. of this accuracy can help to solve a no. of spectroscopic problems. Force consts. of BH₄⁻ have been detd. from a combination of spectroscopic and ab initio information. Geometries have been obtained with little computing work and show good agreement with expt.

сис.
ностр

C.A. 1941.45.12

NH₃

+3

CH₄

X

BH₄

HF

1971

5 Б12. Исследование молекулы HF методом разделенных электронных пар. Régnier S., M^{me}. Étude de F. H. par la méthode des paires d'électrons séparés. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1971, 68, № 9, 1246 (франц.)

Метод разделенных электронных пар применен к расчету энергии молекулы HF. Построено 5 взаимно ортогональных двухэлектронных орбиталей, одна из которых оказывается орбиталью связи. Ионный и ковалентный характер связи описываются вариац. параметрами.

По резюме

расчет
энергии

X. 1972. 5

(HF) LiH,
H₂O, CH₃,
NH₄

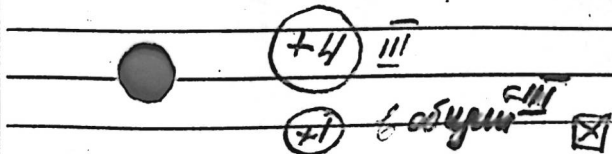
X-5316

1971

8 Д173. Обусловленность «колебательных» и «вращательных» уровней энергии протонной структурой молекул. Thomas I. L. «Vibrational» and «rotational» energy levels as protonic structure in molecules. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 2, 565—567 (англ.)

Показано, что «колебательная» структура спектров гидридов обусловлена электрическими дипольными переходами протонов из их основного состояния (с главным квантовым числом n) в возбужденное состояние (с главным квантовым числом $n+1$). Напр., для молекулы HF вычисленное значение энергии перехода $4277,4 \text{ см}^{-1}$ близко к экспериментальному $3969,57 \text{ см}^{-1}$, аналогичные величины для LiH равны $1562,3 \text{ см}^{-1}$ и $1359,2 \text{ см}^{-1}$ соот-

ф. 1971.82



ветствено. Обсуждаются молекулы воды, аммиака и метана в связи с возможностью в них электрических квадрупольных, магнитных дипольных, двухпротонных и электрон-протонных переходов. Предполагается, что «вращательная» структура возникает в результате электрических дипольных переходов из основного состояния в состояния с более высоким орбитальным моментом, без изменения главного квантового числа. Р. А. Эварестов

HF

X-5316

1971

17 Б61. «Колебательные» и «вращательные» энергетические уровни как протонная структура в молекулах. Thomas I. L. «Vibrational» and «rotational» energy levels as protonic structure in molecules. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 2, 565—567 (англ.)

Модель протонной структуры молекулы, развитая автором в пред. работах (РЖХим, 1970, 7Б77) применена к расчету энергии колебательно-вращательных уровней. Вариац. методом выполнены численные расчеты для молекул HF и LiH. При расчете использован приближенный Гамильтониан $E = E^1 + \sum e^2/r_{ip}$, где E^1 — приближенная энергия иона F^- (или Li^-), r_{ip} — расстояние между электроном и протоном. Колебательные уровни в этой модели описываются главным квантовым числом n ,

Ei

+ l

X. 1971. 17

+4 III

41 бобин



причем для основного состояния HF $n=108$ и для основного состояния LiH $n=125$, а вращательные уровни — азимутальным квантовым числом l при заданном n . Для энергий дипольных переходов ($\Delta n=1$) $n=108$ $s \rightarrow 109$ p в HF и $n=125$ $s \rightarrow 126$ p в LiH получены значения 4277,4 и 1562,3 см^{-1} (эксперим. значения 3961,57 и 1359,2 см^{-1}). Качественно рассмотрены также уровни и переходы для воды, аммиака и метана. М. Р. Алиев

HF

12 Б17. Колебательно-вращательное взаимодействие в молекуле HF. Torouzkhanian A. H., Torouzkhanian A. S. Vibration-rotation interaction in the HF molecule. «Z. Naturforsch.», 1971, 26a, № 10, 1630—1633 (англ.)

Принтегрировано уравнение Шредингера для вращающегося осциллятора Морзе. Расчет проведен на цифровой ЭВМ и аналоговой ВМ для молекулы HF. Рассчитаны уровни энергии и волновые функции состояний с квантовыми числами $v=0, 1, 3$ и вращательными числами $0 \leq J \leq 12$. Результаты, полученные с использованием аналоговой ВМ и цифровой ЭВМ практически совпадают, что подтверждает точность метода, использующего аналоговую ВМ, реализация расчета на к-рой проще, чем на ЭВМ. А. Зембеков

расчет

8,1

X. 1972. 12

888-17
X-2828

HF

XI-2888

1971

39370q³ Vibration-rotation interaction in the hydrogen fluoride molecule. Topouzkhian, Ara H.; Topouzkhian, Ari S. (Fac. Pedagog., Beirut, Lebanon). *Z. Naturforsch. A* 1971, 26(10), 1630-3 (Eng). The vibration-rotation interaction term in the potential term is evaluated by a digital computer and the deformed potential curves belonging to each rotational level are detd. by an analog method.

MeH

C. A. 1972. 76. 8

HF

X1-2888

1971

5 Д114. Колебательно-вращательное взаимодействие в молекуле HF. Torouzkhanian Aга H., Torouzkhanian Aгi S. Vibration-rotation interaction in the HF molecule. «Z. Naturforsch.», 1971, 26a, № 10, 1630—1633 (англ.)

(м.н) Из численного решения уравнения Шрёдингера найдены волн. ф-ции возбужденных колебательно-вращательных состояний молекул HF. При этом учитывалось, что из-за вклада колебательно-вращательного взаимодействия в общую потенц. энергию каждому вращательному уровню соответствует своя, немного отличающаяся от других, потенц. кривая. Б. Ф. Горднец

Ф. 1971. 52

HF

1971

12 Д221. Изменение электрического дипольного момента при изменении межъядерного расстояния в случае колебательно-вращательных полос излучения молекулы HF. Torouzkhanian Ara, Torouzkhanian Ari, Grandmontagne Raymond. Variation du moment électrique dipolaire avec la distance internucléaire dans le cas des bandes de vibration—rotation émises par la molécule HF. «C. r. Acad. sci.», 1971, 272, № 24, B1370—B1372 (франц.)

З. 1971. 12Д

Потенциальная энергия молекулы HF представлена в виде суммы ф-ции Морзе и энергии колебательно-вращательного взаимодействия. Численные значения постоянных известны и $G(v) = 4134,97(v+1/2) - 85,723(v+1/2)^2$. При помощи машинного расчета решено уравнение Шрёдингера и с найденными волн. ф-циями вычислены r -центроиды $r_{1,2}^n$, $n=1-4$, для перехода (1,0). По опытным значениям интенсивностей I_J линий с $J=7, 8, 9, 10, 11$, измеренным в спектре излучения HF при T -рах 3257; 3616 и 3890° K, по ф-ле $\bar{r}_{1,2}M_1 + \bar{r}_{1,2}^2M_2 + \bar{r}_{1,2}^3M_3 + \bar{r}_{1,2}^4M_4 = \text{const} \cdot \{(I_J/v^4J) \exp[B(J+1)(J+2)/kT]\}^{1/2}$ вычислены отношения M_1 к M_2, M_3, M_4 . Разложение электрич. дипольного момента в ряд по степеням межъядерного расстояния имеет вид: $M = M_0 + M_1r(1 - 2,4r + 1,1r^2 + 0,4r^3)$. Равновесное значение в состоянии $X^1\Sigma$ равно 0,9171 Å. М. А. Ковнер

FH

XI - 3178

1942

(79607z) Potential energy surface including electron correlation for $F + H_2 \rightarrow FH + H$. Refined linear surface. Bender, Charles F.; O'Neil, Stephen V.; Pearson, Peter K.; Schaefer, Henry F., III (Lawrence Radiat. Lab., Univ. California, Livermore, Calif.). *Science* 1972, 176(4042), 1412-14 (Eng). A priori quantum mech. calcs. have been carried out on about 150 linear geometries for the F plus H mol. system. An extended basis set of Gaussian functions was used, and electron correlation was treated explicitly by configuration interaction. Comparison with the exptl. activation energy and exothermicity suggests that the theoretical potential surface is quite realistic.

notes.

no bery.

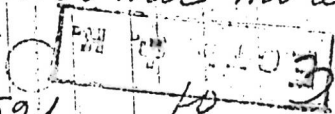
C.A. 1942. 77. 12

Li₂, LiH, F₂, HF (Ei, pacrim) ¹¹ 87261 1972
Bendazzoli G. L., Bernardi F.
Geremia A., Palmieri P. A.

Theor. chim. acta, 1972, 24, N^o 63-
- 68 (encl.)

M.O. calculations for some
first row diatomic molecules.

Phc Lume, 1973, 3521



OH, HF^+ , HF, HF^- , NeH^+ , NeH (ϵ_i , ζ_e , D_0 ,
u.n., parities)

Bondybey V., Pearson P. K.,
Schaefer H. F. III, VI 3141

J. Chem. Phys., 1972, 57, N3, 1123-
- 1128 (atom.)

Theoretical potential energy
curves for OH, HF^+ , HF, HF^- , NeH^+
and NeH.

Pre Lums, 1972, 24524 5 10 (P)

ommu 3272

1972

HF,F₂(u.n)(D₀)

11828s Electronic spectra of hydrogen fluoride and molecular fluorine. Di Lonardo, G.; Douglas, A. E. (Div. Phys., Natl. Res. Counc., Ottawa, Ont.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(10), 5185-6 (Eng). The high-resolution vacuum uv absorption and emission studies of HF and F₂ made possible rotational anal. and identification of vibrational levels of the ground electronic states of these mols. The vibrational levels $v = 7$ to $v = 19$ of ground-state HF and $v = 0$ to $v = 10$ of the upper electronic state were identified in the $V^1\Sigma-X^1\Sigma$ emission spectrum. The highest rotational level of the $v = 19$ level of the ground state lies at $47,337.43 \text{ cm}^{-1}$ above the lowest rotational level $J = 0, v = 0$. The HF disocn. energy is $47,333 \text{ cm}^{-1}$. Rotational anal. of the F₂ absorption bands involving $v'' = 0-2$ gave $\Delta G(1/2) = 893.95$, $\Delta G(3/2) = 870.05$, $B_0 = 0.08827$, $\alpha = 0.0131 \text{ cm}^{-1}$ for the ground state of F₂. The disocn. energy of F₂ given by W. Strickler and L. Krauss (1968) is questioned.

6962 X

C. A.

1972

44.2

(11)



Отмисси 3272

1972

HF

✓10 Д310. Электронные спектры HF и F₂. Di Lorenzo G., Douglas A. E. Electronic spectra of HF and F₂. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 10, 5185—5186 (англ.)

(Do)
(min)

Проведены измерения спектров поглощения и испускания HF и F₂ на спектрографе высокого разрешения (дисперсия 0,2 Å/мм) в УФ-области до 1480 Å. В спектре испускания HF идентифицированы 60 полос и определено относит. положение колебательных уровней от $v=7$ до $v=19$ основного состояния и от $v=0$ до $v=10$ первого возбужденного. Вычислены абс. значения энергии впервые определенных уровней. Найдена энергия диссоциации HF, равная $47\,333 \pm 60$ см⁻¹, что согласуется с теоретич. расчетами. В спектре поглощения HF впервые обнаружены дискретные вращательные линии в области от 1040 Å до ионизационного предела. При высоком разрешении идентифицированы 25 вращательных линий в спектре поглощения F₂ и определены константы основного состояния молекулы. Сделан вывод, что ранее определенные значения энергии диссоциации F₂ не следует считать надежными.

47035-1X

(+1)

⚡

П. Ш.

Ф. 1972. 10

HP

1972

A_{H^+}

Engelbrecht A.

"Chem. Phys. Lett."

1972, 16, N3, 560-562.

(see HCl; III)

HF

1972

Kammeyer, C.W., Whitman D.R.

re

J. Chem. Phys., 1972, 56, N9,
4419-4421.

● (cm CF₄); III

40305.8909
TE, Ch, Ph

HF

1972

* 4-3920

K p.N 40305.8904K

Lipscomb W.N.

Molecular properties.

"Theor. Chem." London e.a., 1972,
167-196

(англ.)

(см. Li_2 ; III); (см. LiH ; III) 0058 мек

038 042

ВИНИТИ

FO (2.) OH, (OF) 5 $\sqrt{1}$ 2845 1972

Levy D.H.

J. Chem. Phys., 1972, 56, 173, 1715-1716

Production of hydrogen in the reaction
of H_2 and F_2O and the binding energy of
FO.

PN Nov., 1972

13 5297



3 FO (P)

КН,
ВМЧ

к. м. м. х.
расчет

56

1972
Montgomery H. E., et al.

J. Chem. Phys., 1972,
44, 1449.

Применение вариацион-
ного метода теории возмущений
к спектрам. I. Кенето-
вые 10-электронные ионизы

Монтгомери, Х. Э.

Дж. Хим. Физ., 1972, 44, 1449.

РЖХ, 1972, 15619

X1 3076

1982

HF

Münterz J.S.

26847w Polarizability anisotropy of hydrogen fluoride. Muentzer, J. S. (Dep. Chem., Univ. Rochester, Rochester, N.Y.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(11), 5409-12 (Eng). The hyperfine spectra for the $J = 1$ and 2 states of HF were obsd. by mol. beam elec. resonance spectroscopy. The obsd. Stark coeffs. are cor. for centrifugal distortion and yield a value for the polarizability anisotropy, $\alpha = 0.220 \pm 0.020 \text{ \AA}^3$. Differences in the values for the spin-rotation interactions were obsd. for the 2 rotational states and these are used to calc. $dC_F/dR = (1.66 \pm 0.10) \times 10^3 \text{ kHz/\AA}$ and $dC_H/dR = (2.5 \pm 1.4) \times 10^3 \text{ kHz/\AA}$.

C.A. 1972. 77.4, 26847 p

PH

1972

Paruk H. Odoz.

"Theor. chim. acta."

1972, 28, II, 85-98.

xi

● (cat. BH; III)

HF

1972

Prophet H., Syverud A. N.

V:
Govt. Rep. Announce, 1972, 72,
76-77.

● (see H2Brc) III

1972

HF

5 Д384. Интенсивности и коэффициенты ударного уширения полосы второго обертона фтористого водорода. Spellicy R. L., Meredith R. E., Smith F. G. Strengths and collision broadened widths in the second overtone band of hydrogen fluoride. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 12, 5119—5123 (англ.)

Рассчитаны и экспериментально измерены интенсивности линий колебательно-вращательных переходов $(v, J) \rightarrow (v-3, J \pm 1)$ молекулы HF. Найдено, что матричный элемент электрического дипольного перехода $v=3 \rightarrow v=0$ равен $1,628 \cdot 10^{-21}$ ед. СГСЕ. Измерены также коэф. самоуширения. Экспериментально найденная зависимость этих коэф. от J находится в хорошем согласии с теорией Андерсона. Б. Гордиец

спектр

Ф. 1973 № 5

N_2 ; O_2 ; H_2 ; I_2 ; CO ; NO ; HF (D₀, u. n.,
vacuum) 1972
Sprandel A. L., Kern C. W., XI 3460

Mol. Phys., 1972, 24, N6, 1383-1391
(ann.)

A test of perturbation theory
for determining anharmonic
vibrational corrections to proper-
ties of diatomic molecules.

Pre. Fiz., 1973, 50175 (3) 10 (P)

HF

XI 2889

1972

119316s Vibration-rotation interaction in the hydrogen fluoride molecule. II. Evaluation of the r -centroids and the higher terms of the electric dipole moment for some vibration-rotation bands. Topouzkhanian, Ara H.; Topouzkhanian, Ari S. (Fac. Sci., Univ. Lyon, Lyon, Fr.). *Z. Naturforsch. A* 1972, 27(1), 68-71 (Eng). The r -centroids relative to the 1-0 transition of the $X^1\Sigma^+$ state of HF were detd. from wave functions calcd. by methods previously described by T. and T. (1971). Comparison with exptl. line intensities showed that the different terms of the elec. moment expansion were of the same order of magnitude. A 4th-order representation of the dipole moment was proposed.

T. and T.

C.A. 1972. 76. 20

X1 2889

1972

MF

15 Б266. Вращательно-колебательное взаимодействие в молекуле HF. II. Оценка r -центroids и высших членов электрического дипольного момента некоторых колебательно-вращательных полос. Torouzkhanian A. и A. H., Torouzkhanian A. и S. Vibration-rotation interaction in the HF molecule. II. Evaluation of the r -centroids and the higher terms of the electric dipole moment for some vibration-rotation bands. «Z. Naturforsch.», 1972, 27a, № 1, 68—71 (англ.)

Оценены величины r -центroids $\overline{r^k_{1-2}} = \int_0^\infty \Psi_1 r^k \Psi_2 dr$

(r — междядерное расстояние) для $0 \leq K \leq 4$ и $7 \leq J \leq 12$ перехода 1—0 основного электронного состояния $X'\Sigma^+$ молекулы HF. Величины r -центroids входят в выражение матричного элемента R рассматриваемого колебательного перехода $R = \sum_k M_k r_{1-2}^k$, где M_k — коэф. в

X: 1972.

15

разложении электрич. дипольного момента M по степеням r . Анализ эксперим. данных Шевалейра по интенсивностям линий $7 \leq J \leq 11$ перехода $0 \rightarrow 1$ в спектре испускания молекулы HF ($3257 \leq T \leq 3890^\circ \text{ K}$) показывает, что в разложении электрич. дипольного момента M молекулы HF необходимо учитывать все члены до $K=4$ включительно. Приведены определенные в работе относительные величины членов в разложении M по степеням r молекулы HF: $M_1/M_0 = -2,20$, $M_2/M_0 = 0,14$, $M_3/M_0 = 2,27$, $M_4/M_0 = -1,21$. А. П. Александров

LiH ; HF ; H_2O (м.н., печать) $\bar{x}$ 8027 1973
Allison D.J., Handy N.C., Boys S.F.,
Mol. Phys., 1973, 26, N3, 715-723 (англ.)

A new basis set for molecular
wavefunctions.

Л.С.Т.б. С.Р.К.

Резюме, 1974, 5535

10

(оп)

HP

1973

(c.n.)

Anderson, Alfred B.

J. Chem. Phys.

1973, 58(1), 381-3.

● (ev. LiH; III)

LiH ; BH ; BH_3 ; BF ; CH_4 ; CH_2NH ; HCN ;
 CO ; N_2 ; HNa^+ ; N_2O ; HF ; Li_2 ; BeH_2 ; BH_4^- ;
 BH_3 ; B_2H_6 ; CH_3^+ ; C_2H_6 ; C_2H_4 ; C_2H_2 ;
 C_3H_6 ; H_2CO ; HCOOH ; HCOF ; NH_3 ; H_2O ; H_2O_2

(ed. 1973)
 ситфурт.
 паерсн

Avdeef S., Fackler J. P., Jr., 1X 4216

Young. Chem., 1973, 12, N3, 713-716

(am.)
 Computer generation of cubic
 molecular symmetry orbitals.

Рохун, 1973, 16514

~~10-10-10~~
 10 (P) 3 10-10-10

Bachet G.

1973

HF

конструктор
брауэр
мшмш

These doct. sci, phys.

Fac. sci techn. Saint-
Jerome, 1973, 80 Xvi p

2 pp
(Fr)

I973

HF

G.C.Berend and R.L.Thommarson

J.Chem.Phys.58,3203 (I973)

Vibrational relaxation inHF and DF

1973

HF

DF

Заселенн.
к.с.с.б.
соедин.

7 Д1067. Реакция $F+H_2$, D_2 , HD : определение с помощью химического лазера населенностей колебательных состояний продуктов и внутримолекулярный кинетический изотопный эффект реакции $F+HD$. Berry Michael J. $F+H_2$, D_2 , HD reactions: chemical laser determination of the product vibrational state populations and the $F+HD$ intramolecular kinetic isotope effect. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 12, 6229—6253 (англ.)

Определены заселенности колебательных состояний генерирующих молекул в химич. лазере на колебательно-возбужденных молекулах HF и DF , образующихся в процессе импульсного фотолиза при комнатной т-ре смесей различных фторсодержащих соединений с H_2 , D_2 и HD . Показано, что для всех четырех изотопных реакций $F+H_2$, D_2 , HD имеет место, с небольшими исключениями, полная идентичность в распределении энергии по колебательным уровням. В качестве источников атомов

Ф. 1974 N 7

(+1)

фтора применялись CF_3J , $\text{CF}_2=\text{CFJ}$, $\text{CF}_2=\text{CFBr}$, $\text{CF}_2=\text{CFCl}$, $\text{CF}_2=\text{CCl}_2$ и $\text{CFCl}=\text{CFCl}$. Рассмотрена возможность колебательной дезактивации генерирующих молекул атомами и свободными радикалами, образующимися при фотолизе этих соединений, и показана малая роль таких процессов при использованных эксперим. условиях. Изучена временная и спектральная эволюция выходного импульса лазера, сделан вывод о быстрой вращательной релаксации возбужденных молекул. Определены относит. константы скоростей реакций образования HF в процессе взаимодействия F с H_2 и HD , а также образования DF в процессе $\text{F}+\text{D}_2$ и $\text{F}+\text{DH}$, на основании которых рассчитана величина внутримолекулярного кинетического изотопного эффекта. Приведены доказательства эффективности процесса переноса энергии от возбужденного HF ($v=3$) к HD ($v=0$), а также от $\text{J}(^2P_{1/2})$ к HF ($v=0$). Библиография 122.

П. Ш.

HF

M.J. Bina C.R?Jones

1973

Appl. Phys. Lett. 22,44(1973)

Use of direct overtone excitation in measurement of the HF ($v=2$) deactivation rate

HF

1973

13 Б239. Квантованное вращательное движение в жидкостях: вращательные спектры в длинноволновой инфракрасной области молекул HF и NH₃ в растворах жидкого SF₆. Birnbaum George. Quantized rotational motion in liquids: far infra-red rotational spectrum of HF and NH₃ in liquid SF₆. «Mol. Phys.», 1973, 25, № 1, 241—245 (англ.)

Получены длинноволновые ИК-спектры поглощения молекул HF и NH₃ в жидких р-рах SF₆ при т-рах 0° и —45° (разрешение 1—4 см⁻¹). В обоих спектрах идентифицированы полосы, соотв-щие квантованным вращательным переходам: полосы HF более резкие, чем полосы NH₃. Полосы HF смещены в область низких частот по отношению полос газа. С использованием полуэмпирич. модели оценены ширины полос для вращательных переходов HF в р-ре с SH₆ и HCl в р-рах с SF₆, CCl₄, Kr и Ar. Для HF—SF₆ и HCl—SF₆ получено удовлетворительное согласие с экспериментом.

М. Р. Алнев

спектры.

х. 1973. № 13.

① ⊗

HF

1973

6/10/73.
chemsp

77623y Quantized rotational motion in liquids. Far infrared rotational spectrum of hydrogen fluoride and ammonia in liquid sulfur hexafluoride. Birnbaum, George (Sci. Cent., North Am. Rockwell Corp., Thousand Oaks, Calif.). *Mol. Phys.* 1973, 25(1), 241-5 (Eng). The resolved rotational structure was obsd. in the far-ir spectra of HF and NH₃ in liq. SF₆. The rotational lines of HF in SF₆ at 0° and -45° were much more pronounced than those in the HCl spectrum (B. and W. Ho, 1970), whereas the rotational structure was barely resolved in the NH₃ spectrum. The 1st resolved rotational line of HF was the $J = 2$ line ($J = 3 \leftarrow J = 2$) at 123 cm⁻¹ (in HCl, it was the $J = 4$ line at 106 cm⁻¹). The HF lines were shifted to lower frequencies relative to the corresponding gas-phase lines, and relative intensities of the rotational lines changed with temp.

C. A. 1973.78, N 13

(NH₃) (+1) 

HF

4 Б116. Колебательная релаксация HF в интервале температур 600—2400° K. Blair L. S., Breshears W. D., Schott G. L. Vibrational relaxation of HF in the temperature range 600—2400° K. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 4, 1582—1587 (англ.)

1973

Колесит.
релаксация

По скорости затухания флуоресценции вблизи 2,5 мк, к-рую возбуждали излучением импульсного HF лазера с поперечным разрядом, измерена т-рная зависимость времен колебательной релаксации молекул HF в смесях с HF, Ag и F в интервале т-р от 600 до 2400° K, создававшихся с помощью техники ударной трубы. В интервале т-р от 1500 до 2400° K атомы F в 2—5 раз более эффективны для дезактивации HF, чем молекулы HF. Подтверждены результаты др. исследований о неэффективности атомов Ag для дезактивации HF. Впервые наблюдался максимум в т-рной зависимости времен колебательной релаксации для смеси HF—HF. Колебательная релаксация в этой смеси от значения 0,15 мсек·атм при т-ре 300° K медленно возрастает до значения 0,10 мсек·атм при т-ре 1400° K и в дальнейшем с повышением т-ры несколько уменьшается. Полученные результаты удовлетворительно согласуются с лит. данными. Библ. 21.

С. Н. Мурзин

X1974
N4

HF

130994u Vibrational relaxation of hydrogen fluoride in the

temperature range 600–2400°K. Blair, L. S.; Breshears, W. D.; Schott, G. L. (Los Alamos Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, N.Mex.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(4), 1582–7 (Eng). HF vibrational deactivation by HF, Ar, and F atoms was studied at 600–2400°K by using the shock tube-laser-induced fluorescence method. Mixts. of HF-Ar and F₂-HF-Ar were heated by reflected shock waves; following establishment of thermal equil., HF was vibrationally excited by pulsed radiation from an HF pin laser. Relaxation times were obtained from the time-resolved decay of the laser-induced vibrational fluorescence. Measurements of relaxation by F atoms were limited to >1500°K, where F₂ dissocs. completely behind the reflected shock wave. The HF self-relaxation time, $p_{\text{THF-HF}}$, exhibits a broad max. with temp., peaking at $\approx 0.10 \mu\text{sec. atm}$ at $\sim 1400^\circ\text{K}$. F atoms were 2–5 times more efficient than HF for HF vibrational deactivation at 1500–2400°K. Ar was a very inefficient collision partner; values of $p_{\text{THF-Ar}}$ at 800–2400°K are reported. This is the 1st study in which the max. of $p_{\text{THF-HF}}$ with temp. has been fully described; the present results both confirm and unify those of previous high (>1400°K) and low (<1000°K) temp. studies.

1973

У.В.

Калей
пенасы

CA1973

79, 22



+2

Калей, В.В. пенасы
У.В.

Зак. 247

FA

1973

Molecular orbital determination
of chemical bond multiplicity

Author: Borisova N.P. Semenov S.C (USSR)
Journal: Vestn Leningrad. Univ. Fiz. Khim
Year: 1973 (3) 119-124 (Russ)

(excl HCN-III)

C.A. 1974.80. N12

3aL 247

HF

1973

Brown R.D., Williams G.R.

"Austral. J. Chem." 1973, 26, N5, 921-925.

uncertain
not puzzle
Loverb.

● (enc. CO; III)

XI 3758
от тисел 1838

1973

HF

HF⁺

(м.п. 2)

11 Б14. Сравнительный расчет молекулярных свойств молекул HF и HF⁺ методом молекулярных орбиталей и методом полного спаривания. Bruce R. E., Mitchell K. A. R., Williams M. L. A comparison of perfect pairing and molecular orbital methods for the calculation of molecular properties of HF and HF⁺. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 23, № 4, 504—507 (англ.)

Проведен расчет молек. св-в основного состояния молекулы HF(¹Σ) и двух низколежащих состояний молекулы HF⁺(²Σ, ²π) методом ССП МО ЛКАО и методом полного спаривания; волновая функция последнего строится как комбинация слэйтеровских детерминантов, отвечающая простой валентной схеме. При этом спаривание связывает поляризованные орбитали атомов фтора и водорода. Для обоих методов орбитали остова

Х. 1974 № 11

полагаются фиксированными, кроме линейных параметров орбиталей варьируются и значения орбитальных экспонент. Приведены рассчитанные обоими методами значения энергии, равновесных межъядерных расстояний, дипольных моментов, силовых постоянных и орбитальных заселенностей. Кроме того приведены значения потенциалов ионизации, определенные с помощью теоремы Купманса и непосредственно по разности энергий молекулы и иона. Полученные результаты использованы для обсуждения возможностей обоих методов.

В. И. Пупышев



40226.7302
CH, Ph, TE

HF

96201

1473
1838

Bruce R.E., Mitchell K.A.R., Williams M.L.
A comparison of perfect pairing and
molecular orbital methods for the
calculation of molecular properties
of HF and HF⁺.

"Chem. Phys. Lett.", 1973, 23, N 4, 504-507

(англ.)

0050 ммк

034 035 0043

ВИНИТИ

Н.Ф.

Н.Ф.

XI-3758
отписи 1838

1973

6 Д142. Сравнение методов молекулярных орбиталей и идеального спаривания для расчетов молекулярных свойств HF и HF+. Bruce R. E., Mitchell K. A. R., Williams M. L. A comparison of perfect pairing and molecular orbital methods for the calculation of molecular properties of HF and HF+. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 23, № 4, 504—507 (англ.)

- Методом ССП МО и методом валентных схем в приближении идеального спаривания (ИС) в миним. базе АО слэтеровского типа с полной оптимизацией орбитальных экспонент проведены расчеты основного $^1\Sigma$ -состояния HF, а также $^2\Pi$ - и $^2\Sigma$ -состояний HF+, возникающих при ионизации соответственно с $2p\pi$ - и 1σ -МО. Приведены полные энергии, дипольные мо-

м.п.

Ф. 1974 № 6



менты, оптимизированные значения экспонент, орбитальные заселенности, равновесные длины связи и силовые постоянные (для основного состояния HF), потенциалы ионизации с 1σ - и 1π -МО, рассчитанные по теореме Кулманса и как разности полных энергий. Результаты расчетов обоими методами сравниваются между собой и с результатами расчетов без оптимизации экспонент.

А. Багатурьянц

HF

1973

Burden F.R., Hart B.T.

"Austral. J. Chem."

1973, 26, N7, I381-93.

пакет
рецепт.

М.П.

(сск. H₂O; III)

HF

Omni-cell 2106

1973

Cade Paul E.

Huo Winifred .

" Atom. Data and Nucl.
Data Tables."

1973, 12 NO, 415-66

(ex. LiH, III)

FH

Cammack 3143

1973

57939y Comparative study of the approximation of NNDO [neglect of nonbonded differential overlap]. Carbo, Ramon; Riera, Jose M. (Dep. Quim. Org., Inst. Quim. Sarrid, Barcelona, Spain). *An. Fis.* 1973, 69(1), 1-7 (Span). The NNDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap) approxn. within the method of all valence electron (AVR) is applied to the calcn. of mol. properties. Results including the effect of inner electrons are compared with "ab initio" calcn. using Slater orbitals (STO) represented by Gaussian functions (GTO) in FH, H₂O, NH₃, CH₄, BH₃ and CO. GTO show good agreement with STO method, and much better in all cases than NNDO. Total energies from NNDO approxn. are lower than those from "ab initio" calcn. Inner levels energies from NNDO have correct values and ionization potentials agree with those of "ab. initio." Intermediate energy levels show serious discrepancies. Total energy of H₂O mol. calcd. as a function of HOH angle using NNDO is min. at 180°.

F. Danon

Carbo
Munoz

3798
IX

C.A. 1974, 79, N10

⑤



50331.419

TC, Ph

66072 (E)

FH (рецензия)

1973

3-143

Carbó Ramón, Riera José M.^a Un estudio
comparativo de la aproximación NNDO.

"An. fís. Real soc. esp. fís. y quim.",
1973, 69, № 1-3, 1-7

(исп., рез. англ.) 0335 пик

306 309

03

ВИНИТИ

X1-3640

Wynne

CO DATA

Bulletin, 1973, 10, 2.

38

T.X. HF

40306.8431

HF

197-3

Ch, Ph, TE

41125

3-3918

Curtiss L.A., Pople J.A.

Molecular orbital calculation of some
vibrational properties of the complex
between HCN and HF.

"J. Mol. Spectrosc.", 1973, 48, N 3, 413-
426 (англ.)

045 046 0050 0057 ВИНИТИ

40123.7226

Ch, Ph, TE

HF

(c.n.)

49969

1973

* 4-3179

Cyvin S.J., Devarajan V., Brunvoll J.,
Ra ϕ .

Vibrational analysis of polymeric
hydrogen fluoride: cyclic $(\text{HF})_6$.

"Z.Naturforsch.", 1973, 28a, N 11, 1787-1793

(англ.)

0030

ВИНИТИ

009 010

003

31207.9059

TE, SIS, Ch, Pl

PH XI-3679
(E) 49587

1973

1395

von
Diereckson G.H.F., Niessen W., Krae-
 mer W.P. SCF LCGO MO studies on the
 fluoronium ion FH_2^+ and its hydrogen
 bonding interaction with hydrogen flu-
 oride FH. "Theor. chim. acta", 1973,
 31, N 3, 205-214.

(англ.)

РМХ. 1974, 5537

996 997 0 1 1013 АКК ВИНТИ

HF, DF

HCl
cryst.

1973

T.A. Dillon,
J.C. Stephenson

J. Chem. Phys., 1973,
58(5), 2056-64

"Calculation of vibrational and
rotational energy transfer
between HF, DF, HCl and CO₂"

HF

X1 3414

1973

15 Б148. Электронный спектр HF. I. Система полос $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$. Di Leonardo G., Douglas A. E. The electronic spectrum of HF. I. The $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ band system. «Can. J. Phys.», 1973, 51, № 4, 434—445 (англ.; рез. франц.)

Исследованы с высоким разрешением спектр испускания (1480—2670 Å) и спектр поглощения (700—1040 Å) газ. HF(I). Найденные полосы I отнесены электронному переходу $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ (обозначавшемуся ранее $V^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$). Из анализа 51 полосы спектра испускания определены молек. постоянные I для состояний $X^1\Sigma^+$ ($0 \leq v \leq 19$) и $B^1\Sigma^+$ ($0 \leq v \leq 10$): $G_0(v)$, $T_0 + G_0(v)$, B_v , D_v , H_v и L_v . В спектре поглощения I идентифицировано 56 полос системы $B - X$. Из анализа спектра поглощения

(м.и)

См. м.и. 3-122

и N 864

X. 1973 N 15

определены молекулярные постоянные I $T_0 + G_0(v)$, B_v и D_v для состояний $B^1\Sigma^+$ ($14 \leq v \leq 26$). В случае более высоких колебательных квантовых чисел ($26 \leq v \leq 73$) из-за сильных возмущений оказалось невозможным определить значения постоянных B_v и D_v , однако были определены начала полос $T_0 + G_0(v)$. Для состояний X и B I вычислены потенциальные кривые Ридберга-Кляйна-Риса. Отмечено, что при больших межъядерных расстояниях связь в состоянии I имеет почти ионный характер. Определена энергия диссоциации $D_0(I) = 47333 \pm 60 \text{ см}^{-1}$.

По резюме

HF

* 4 - 122

1973

unassigned 864

X13414

(u.n.; do)

117235g Electronic spectrum of hydrogen fluoride. I. $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ band system. Di Lonardo, G.; Douglas, A. E. (Div. Phys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Phys.* 1973, 51(4), 434-45 (Eng). The electronic emission and absorption spectrum of HF was photographed at high resolu. with a 10 m grating spectrograph. The emission, which extends from 1480 to 2670 Å, consists entirely of bands of the $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ (previously denoted as the $V^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$) system. From the anal. of 51 bands of the emission spectrum, const. of the vibrational levels of the X state from $v = 7$ and 19 and of the B state from $v = 0$ to 10 were detd. The dissocn. energy of HF was $D_0(\text{HF}) = 47,333 \pm 60 \text{ cm}^{-1}$. In the absorption spectrum, 56 bands of the B-X system were identified. Vibrational levels of the B state between $v = 14$ and 26 were well behaved and readily analyzed, but levels between $v = 26$ and 73 were highly perturbed. Rydberg-Klein-Rees potential curves were calcd. for the B and X states. At large internuclear distances, the bonding of the B state was almost entirely ionic.

C.D. 1973.
78 N18

HF

X/ 3414

1973

✓ 7 Д332. Электронный спектр HF. Ч. I. Система полос $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$. Di Leonardo G., Douglas A. E. The electronic spectrum of HF. I. The $B\Sigma^+ - X\Sigma^+$ band system. «Can. J. Phys.», 1973, 51, № 4, 434—445 (англ.; рез. франц.)

Электронные спектры излучения и поглощения HF сфотографированы с высоким разрешением. Эмиссионный спектр в области 2670—1480 Å полностью состоит из полос системы $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$. Определены молекулярные константы уровней $X^1\Sigma^+ v=7-19$ и $B^1\Sigma^+ v=0-10$. Вычислена энергия диссоциации HF $47\,333 \pm 60$ см⁻¹. В спектре поглощения в области 1040—700 Å идентифицировано 56 полос системы $B-X$. Отмечается, что колебательные уровни состояния B с $v=26$ по $v=73$ сильно возмущены соседним состоянием $^3\Pi$. Методом Ридберга — Клейна — Риса получены потенц. кривые состояний B и X . Библ. 15. И. Дворников

эл. спектр

15-122

Дмитри. 864.

фр. 1973 № 7

NF

Halgren et al. 1973

мелко
сдрано

"J. Chem. Phys."
1973, 58, N4, 1589-1591

• (Lilien III)

HF

1973.
Harrison Walter A.

Memoranda
Conference

"Phys. Rev. A: Gen. Phys"
1973, 7 N6, 1876 - 88

● (encl. CH4; III)

HF.

DF

Качеб.
релакс

1973

21 Б167. Колебательная релаксация фтористых водорода и дейтерия. Hinchey J. J. Vibrational relaxation of hydrogen and deuterium fluorides. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 1, 233—240 (англ.)

Методом лазерной ИК-флуоресценции исследована колебательная релаксация в газах HF, DF, смесей HF с Ar и He и смесей DF с Ar, He, H₂ и N₂ при t-ре 295° K и при различных давл. Для возбуждения флуоресценции использованы импульсные лазеры на HF и DF в поперечных разрядах через смеси SF₆ с H₂ и D₂ соотв. Метод основан на измерении временной зависимости флуоресценции на линиях полосы 0—1 после возбуждения молекул лазерным импульсом. При давлениях 0,1—12 мм получена одиночная экспоненц. кривая затухания и линейная зависимость вероятности дезактивации (*K*) уровня $\nu=1$ от давл. Полученные значения *K* сопоставлены с лит. данными и отмечено значит. расхождение между результатами разных авторов, обусловленное неучитываем-

X. 1974. N1

мыми эффектами нагрева газа при облучении и заселения высших колебательных уровней при столкновениях, а также влиянием малых примесей; в настоящей работе влияние этих факторов устранено. Результаты измерений проанализированы по теории, учитывающей колебательно-вращательную и колебательно-поступательную релаксацию. Показано, что колебательно-вращательная релаксация в HF, DF и в их смесях является основным механизмом дезактивации возбужденных колебательно-вращательных уровней HF и DF, причем релаксация в HF и DF происходит на несколько порядков быстрее, чем в др. галогенидах водорода. Этот результат качественно согласуется с предсказанием теории Шинна, учитывающей сильное притяжение на малых расстояниях между молекулами. Показано также, что релаксация в смесях HF и DF с двухатомными молекулами происходит значительно быстрее, чем в смесях HF и DF с инертными газами.

М. Р. Алиев

1973

HF
DF
1 Д712, Колебательная релаксация фтористых водорода и дейтерия. H i n s h e n J. J. Vibrational relaxation of hydrogen and deuterium fluorides. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 1, 233—240 (англ.)

Методом возбуждаемой лазером ИК-флуоресценции исследована колебательная релаксация HF и DF при 295° К. Определены константы скорости колебательной релаксации при столкновении HF с HF и DF с DF, а также константы скорости передачи колебательной энергии при столкновении HF — DF. Полученные результаты сравнены с известными данными для систем HCl — DCl и HBr — DBr, а также с теоретич. результатами. Получены константы скорости передачи колебательной энергии в системах DF — D₂ и HF — H₂, а также скорости колебательной релаксации DF при столкновениях с Ar, He, H₂, N₂ и HF при столкновениях с Ar и He.
Резюме
Библ. 16.

Кол. релаксация

Ф 1974

211

40219.7572

TE, Ph, Ch

HF

40892

1973

1802

Kalman Barry L. Self-consistent extended
Hückel theory. I. "J. Chem. Phys.", 1973, 59,
N9, 5184-5188

(англ.)

0047 ББК

030 032 040

ВИНИТИ

31016.7314
Ch, Ph, TE

HR

49587

1973

4-2038

Jug Karl.

A new definition of atomic charges
in molecules.

"Theor. chim. acta", 1973, 31, N 1, 63-73
(англ.)

0983 ПИИ

968 969 976

ВИНИТИ

1973

HF

HCl

магнит.
св-ва и
мол. квадр.
момент

7 Д187. Магнитные свойства и молекулярный квадрупольный момент для HF и HCl, определяемые по методу спектроскопии электрического резонанса в молекулярном пучке. de Leeuw F. H., Dumanus A. Magnetic properties and molecular quadrupole moment of HF and HCl by molecular-beam electric-resonance spectroscopy. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 48, № 3, 427—445 (англ.)

Методом электр. резонанса в молекулярных пучках измерялись магн. характеристики и квадрупольные моменты молекул HF и H^{35}Cl в основном колебательном ($v=1$) и первом вращательном ($J=1$) состояниях. Эксперим. результаты были пересчитаны к жесткой (неколеблющейся) молекуле введением соответствующих поправок на нулевые колебания. Для молекул HF и H^{35}Cl соответственно найдены следующие значения различных

вие,



9. 1974 N 7

физич. характеристик: ядерный вклад во вращательный магн. момент (в ядерных магнетонах): 0,97367 и 0,98571; электронный вклад во вращательный магн. момент (в ядерных магнетонах) — 0,23263 (15) и — 0,52636 (9); средняя поляризационная парамагн. восприимчивость (10^{-6} эрг/гс²моль) 0,5579 (4) и 2,46 (5); анизотропия восприимчивости $\chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$ (10^{-6} эрг/гс²моль): 1,342 (25) и 3,49 (10); электронный вклад в квадрупольный момент (10^{-24} абс. эл. ст. ед. см²): —1,52 (3) и —3,95 (12); ядерный вклад в квадрупольный момент: 3,88 и 7,69; полный квадрупольный момент 2,36 (3) и 3,72 (12); g-факторы: 0,74104 (15) и 0,45935 (9); для ядерного магн. экранирования (в миллионных долях) найдено анизотропия экранирования протона ($\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp}$) 24 (9) и 21 (5), в том числе анизотропия чистодиамагн. экранирования —96 (9) и —148 (7); анизотропия экранирования галогена ($\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp}$): 108 (9) и 300 (24), в том числе анизотропия чистодиамагн. экранирования: —1 (9) и —4 (25).

Т. К. Ребане

HF

XI 3650

м. и. Е.и
гос. центрX. 1974
N 3

3 Б35. Неэмпирические расчеты малых гидридов с учетом электронной корреляции. IX. Равновесные геометрии и силовые постоянные HF, OH⁻, H₂F⁺, H₂O, а также энергии протонирования F⁻, OH⁻, HF, H₂O. Lischka H a n s. Ab initio calculations on small hydrides including electron correlation. IX. Equilibrium geometries and harmonic force constants of HF, OH⁻, H₂F⁺ and H₂O and proton affinities of F⁻, OH⁻, HF and H₂O. «Theor. chim. acta», 1973, 31, № 1, 39—48 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в расширенном базисе сгруппированных лепестковых гауссовых орбиталей, с включением функций поляризации *d*-типа на атомах F и O и *p*-типа на атомах H проведен расчет энергий молекул HF, OH⁻, H₂F⁺, H₂O для ряда межъядерных расстояний и валентных углов. Полученные данные использованы для определения равновесной конфигурации ядер и силовых постоянных, отвечающих координатам симметрии. На основе проведенных расчетов ССП выполнены расчеты энергий корреляции в приближении независимых электронных пар (см. сообщ. VIII, 1973, 5Б15). С этой целью найденные МО при каждом межъядерном расстоянии локализованы по Бойзу, после чего для каждой локализованной МО найдена разложением по нату-

1973

химик
22040

ΔX

(73)

ральным орбиталям парная корреляц. функция, определенная в эффективном поле остальных частиц. С помощью парных функций определены внутри- и межоболочечные корреляционные энергии. Найдено, что учет корреляц. эффектов вносит изменения в значения равновесных геометрич. параметров и силовых постоянных, превышающие по величине ошибку хартри-фоковского расчета, так что оценки получаемые методом ССП и с учетом корреляций образуют интервал, содержащий эксперим. результаты. Аналогичными методами проведен расчет энергий протонирования систем F^- , OH^- , HF , H_2O , для чего дополнительно были выполнены расчеты систем F^- и H_3O^+ , причем в последнем случае найдено, что конфигурация равновесного состояния ядер является пирамидальной, хотя и близкой к плоской. Полученные результаты сопоставлены с эксперим. данными и теор. данными др. авторов.

В. И. Пупышев

олуч

HF

X/ 3650

1973

д. н.
 доцент
 С. А. Н. Н.
 А. Н.

2 Д209. Неэмпирические расчеты малых гидридов с учетом электронной корреляции. IX. Равновесная геометрия, гармонические силовые постоянные HF , OH^- , H_2F^+ , H_2O и сродство к протону F^- , OH^- , HF и H_2O . Lischka Hans. Ab initio calculations on small hydrides including electron correlation. IX. Equilibrium geometries and harmonic force constants of HF , OH^- , H_2F^+ and H_2O and proton affinities of F^- , OH^- , HF and H_2O . «Theor. chim. acta», 1973, 31, № 1, 39—48 (англ.)

В приближении ССП и метода «независимых электронных пар с парными натуральными орбиталями» (НЭП) проведены расчеты геометрич. характеристик, силовых постоянных и сродства к протону молекул и ионов: F^- , HF , OH^- , H_2O , H_2F^+ и H_3O^+ . Базис состоял из сжатых орбитальных ф-ций Гаусса, которые аппроксимировали s , p и

863-2040

(75) 1

Ф1974 N2

AO, центрированные на тяжелых атомах молекул, и ρ AO на атомах H. После учета корреляционных поправок методом НЭП получено хорошее согласие (в пределах 5%) с эксперим. значением для валентных силовых постоянных HF и H₂O. Геометрич. характеристики рассмотренных соединений слабо меняются при учете корреляции. Приведены таблицы рассчитанных свойств молекул при различных значениях межъядерных расстояний и углов, сделано, где возможно, сравнение с эксперим. значениями. Ч. VIII см. РЖФиз, 1973, 6Д170.
А. И. Дементьев

HF

H₂O

(M.H.)

Kb. Mex.
perumC.A. 1974.80
N 4Summer 2040
81-3650

1973

20895a Ab initio calculations on small hydrides including electron correlation. IX. Equilibrium geometries and harmonic force constants of hydrogen fluoride, hydroxide, dihydrogen fluoride ion [H₂F⁺], and water and proton affinities of fluoride, hydroxide, hydrogen fluoride, and water. Liszka, Hans (Inst. Phys. Chem. Electrochem., Univ. Karlsruhe, Karlsruhe, Ger.). *Theor. Chim. Acta* 1973, 31(1), 39-48 (Eng). Near Hartree-Fock ab initio SCF and correlation energy calcs. based on the independent electron pair approx. (IEPA) and on the direct calcn. of approx. natural orbitals of electron pair functions are reported for F⁻, HF, OH⁻, H₂O, H₂F⁺, and H₂O⁺ by using Gaussian type orbital basis sets. The SCF values for the equil. geometries and harmonic force consts. were cor. in the desired direction by inclusion of the correlation energy. The SCF errors were, however, always overcompensated. The agreement with expt. was improved for the sym. stretching force consts. of HF and H₂O, but bond lengths are too long in the IEPA by the same amt. by which they are too short in the SCF calcn. Protonation energies were computed and compared with expts.

+1

JP

HF

A-2091

1973

M.N.

Miller, Carl E. et al.
At. Data 1973, 5(1), I-49.

(see LiH, III)

HF

1973

вещов.
р-ум

Niessen W.

"theor. chim. acta."

1973, 29, NI, 29-48.

(св. LiH; III)

LiH, BeH₂, BH₃, CH₄, IX 4560 1973
NH₃, H₂O, HF (u.n.).

Norbeck J. M.; Gallup, G. A.

Int. J. Quantum. Chem., Symp. 13
1973, 7, 161-8 (Eng).

6 9, 10 1076
First-row hydrides and influences of orbital scaling on formally charged valence bond structures.

C.A. 1974.80 N18. 100466b. 10 (P) 4

(FH-FH) (м.н., профессор) XI 3826 1973

Niessen W. von,

Theor. chim. acta, 1973, 31, N4, 297-
-309 (англ.)

A theory of molecules in molecules. III. Application to the hydrogen bonding interaction of two FH molecules.

РФ. хим. 1974, 8524

10

Ⓟ

HF (γ_{H-F} ; γ_{F-F} ; $\angle HFF$) χ_{13573} 1973
Kb. Mex. pacrim

O'Neil S.V., Pearson P.K., Schaefer H.F.,
II, Bender C.F.,

J. Chem. Phys., 1973, 58, 113, 1126-31
(am.)

Atomic hydrogen + molecular fluo-
rine $\rightarrow$ hydrogen fluoride + atomic
fluorine react ion. Ab initio poten-
tial energy surface
CA. 1973. 48. N16. 102197x

10



40206.3711

TE, Ch, Ph, MGU

FH

96201

1973

1705

Politzer P., Elliott J.D., Meroney B.F.
Properties of atoms in molecules. A
proposed method for calculating the
extent of distortion of an atom. "Chem.
Phys. Lett.", 1973, 23, N 3, 331-334
(англ.)

025 025

УДК

0038

ВИНИТИ

HF

1973

Rode Bernd M.

"Z. Naturforsch"

Дневн.
список

-1973, 28a, N 9, 1537-38.

(ver. F₅SO⁻; III)

30717.8878
TE, Ch

HF

(E)

40892

23-1076a

Schatz George C., Bowman Joel M.,
Kupfermann Aron.

Large quantum effects in the collinear
 $F+H_2 \rightarrow FH+H$ reaction.

"J. Chem. Phys.", 1973, 58, N 9, 4023-4025
(англ.)

П917

895 896

9 1 0

ВИНИТИ

H₂O; HF (i.e., pure) XI 3370 1973

Simons G,

Chem. Phys. Lett., 1973, 18, N3, 315-
-318 (anal.)

Pseudopotential studies of the
water and hydrogen fluoride
molecules.

Proc Phys, 1973, 6D123 CH-1973, 7 10

2nd am. mon-del, HF, CO. XI-5312 ¹⁹⁷³
(nomens. sp-us-l)

Simons G., Parr R.G., Finlan J.
J. Chem. Phys., 1973, 59 (6), 3229-
-3234.

New alternative to the Dunham
potential for diatomic molecules.

(
C.A. 1975, 83 n 4. 33271 f. 10 $\textcircled{\Phi}$ 5

HF

CO

2nd am. acc. ref.(nonacc.
p-3111)

Brunner 1456

1973

332711 New alternative to the Dunham potential for diatomic molecules. Simons, Gary; Parr, Robert G.; Finlan, J. Michael (Dep. Chem., Wichita State Univ., Wichita, Kans.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(6), 3229-34 (Eng). A procedure for constructing potential curves for diat. mols. is developed. The procedure is similar to the J. L. Dunham (1932) method, except that the expansion parameter is $(R-R_e)/R$ instead of $(R-R_e)/R_e$. The expansion, which has a formal theor. basis, is superior in terms of both rate of convergence and region of convergence. The expansion coeffs. may be obtained from spectroscopic data, and the proper behavior of the potential at large R permits detn. of addnl. coeffs. and of dissocn. energies. To illustrate the method, the ground states of HF and CO are treated. Possible extensions to polyat. mols. are discussed.

X-5312

(+2) ☒

C. H. 1975. 83 NY

HF

J. Simons; W.D. Smith.

1973

"J. Chem. Phys"

(Ae)

1973, 58, N11, 4899-4907,

"Theory of electron affinities
of small molecules."

HF

1973

Синдром Ойстера, Павел И. Ойстер

"У. Андер. Шен. 893." 1973, 99, 117, 9433-9442.

мерные
связи

(см. ВМ III)

H_2 , LiH , BH , HF , CO (потенц. ср-ции) 1973.
 $\Sigma 8493$

Сорогинская В.Е., Морозов В.П.,
Теор. и эксперим. химия, 1973,
9(6), 795-8. 2

Применение метода ЛАО МО
для расчета констант меже-
атомных потенциалов в двух-
атомных молекулах.
210-ес76 8

С.Д. 1974. 80 N 22. 125090 п. 10



31211.8825
TE, Ch, Ph, MGU

HF

40892

1973

3-2707

Tait K.S., Kolb C.E., Baum H.R.
and vibrational
Classical calculations of rotational exci-
tation in energetic atom-diatomic hydride
collisions.

"J.Chem. Phys.", 1973, 59, N 6, 3128-3137

(англ.)

1021 ББК

1005 1006

1014

ВИНИТИ

HF

1973

DF

конец.

перелом.

✓ 71740h Vibrational relaxation of hydrogen fluoride and deuterium fluoride in a shock wave. Vasil'ev, G. K.; Makarov, E. F.; Papin, V. G.; Tal'roze, V. L. (Inst. Khim. Fiz., Moscow, USSR). *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 1973, 64(6), 2046-50 (Russ). Vibrational relaxation of HF and DF was investigated by recording the ir radiation behind the front of an incident shock wave in mixts. of HF (DF) and Ar at 1500-5000°K. The relaxation times in this temp. range can be expressed by $A \exp(B/T^{1/3})$.

C.A.

1973

79 N12

(+1) ☒

HF

DF

(M.H)

XI 3451

1973

(15 Б23) Влияние колебаний ядер на поляризационную составляющую магнитного экранирования протона в молекулах галогенводородов. Володичева М. И., Ребане Т. К. «Вестн. Ленингр. ун-та», 1973, № 4, 38—45 (рез. англ.)

Для парамагнитной экранировки протона σ^p в двухатомных молекулах получена зависимость от межъядерного расстояния методом варьирования простейших функций градиентного преобразования, к-рый сводится к переносу начала отсчета векторного P_t в центр тяжести электронного облака молекулы. Вычислены колебательно-вращательные поправки $\delta\sigma$ к σ^p в молекулах HF, DF, HCl, DCl, HBr, DBr с использованием эксперим. значений производных от дипольных моментов и спектроскопич. постоянных при t -ре 0 и 300° К. Отмечено, что наибольший вклад в $\delta\sigma$ вносят нулевые колебания молекул.

Автореферат

X. 1973 N 15523

(+4) ☒

HF

DF

(Т.м.п.)

1-922
X 3264

отмечены 5-3173; 5-3243 1973

5 Д299. Вращательный контур полос в фотоэлектронной спектроскопии: HF и DF. Walker T. E. H., Dehmer P. M., Berkowitz J. Rotational band shapes in photoelectron spectroscopy: HF and DF. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 8, 4292—4298 (англ.)

Контур полосы фотоэлектронного спектра построен на основании рассчитанных сил линий всех вращательных переходов и ширины линий, полученных с помощью известной инструментальной ф-ции. Этот метод, примененный к молекулам HF и DF, хорошо воспроизводит результаты экспериментов и позволяет получить из эксперим. данных уточненное значение константы спин-орбитального взаимодействия A . Найденная величина $A = -290 \pm 10 \text{ см}^{-1}$ согласуется с результатом расчета по методу Хартри—Фока. Ионизационные потенциалы ($16,044 \pm 0,003 \text{ эВ}$ для HF и $16,058 \pm 0,003 \text{ эВ}$ для DF) определены с точностью, на порядок превышающей точность эксперим. данных, полученных при наилучшем разрешении. Библ. 30. И. Дворников

Ф.1974-522.29

⊕ ⊗

40225.8484

HF

1973

TE, Ph, MGU

29540

4-3912

Hansen P., Strong J., Vanpee M., Vidaud P.
High resolution infrared emission spectroscopy of low pressure pre-mixed flames. "Infrared Phys.", 1973, 13, N 4, 327-332

(см. ОН; III) (англ.)

0051

032 038

ВИНИТИ

31031.4512

TE, Ph, Ch, MGU

HF

40892

1973

1263

Tregay G.W., Valance W.G., MacLean D.I.
Dissociation of diatomic molecules.

I. Effect of limited numbers of rotational states. "J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 4, 1634-1640 (англ.)

0993 ОК

973 975

ВИНИТИ

HF

3173
3243

(7)

X. 1974

1410

10 Б72. Формы вращательных полос в фотоэлектронной спектроскопии. HF и DF. Walker T. E. H., Dehmer P. M., Berkowitz J. Rotational band shapes in photoelectron spectroscopy: HF and DF. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 8, 4292—4298 (англ.)

Предложен метод вычисления сил осцилляторов вращательных переходов при ионизации с учетом только парциальных s-волн. По этим данным определены контуры вращательных полос в фотоэлектронных спектрах HF и DF с учетом инструментального уширения линий. Полученные формы полос хорошо согласуются с экспериментальными, что позволяет по эксперим. данным определить константу спин-орбитального взаимодействия. Найденная таким образом величина $-290 \pm 10 \text{ см}^{-1}$ хорошо согласуется с лит. данными расчетов методом Хартри—Фока. Потенциалы ионизации (ПИ) HF и DF найдены равными $16,044 \pm 0,03$ и $16,058 \pm 0,03$ эв, соотв. Различие ПИ HF и DF частично обусловлено разницей нулевых колебательных энергий этих молекул и разницей вращательных энергий ионов HF^+ и DF^+ . Остающееся расхождение $\sim 4,7$ мэв может быть предположительно отнесено за счет изотопного электронного сдвига.

По резюме

1973

1973 IX

(41)

X

HF

* 4 - 3243

1973

DF

54344k Rotational band shapes in photoelectron spectroscopy. Hydrogen fluoride and deuterium fluoride. Walker, T. E. H.; Dehmer, P. M.; Berkowitz, J. (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(8), 4202-8 (Eng). Rotational line strengths for ionization were calcd. by assuming only s partial waves. Rotational band contours were then constructed by broadening each rotational line with a known instrumental line shape. This technique was applied to HF and DF, and reproduces the exptl. results well, allowing an accurate value of the spin-orbit coupling const. to be detd. from expt. The value of $-2581 \pm 10 \text{ cm}^{-1}$ agrees with previous Hartree-Fock calns. The ionization potentials ($16.044 \pm 0.003 \text{ eV}$ for HF, $16.058 \pm 0.003 \text{ eV}$ for DF) are obtained with an accuracy one order of magnitude better than the exptl. resolu., and there is some evidence for an electronic isotope shift.

(7)

X 3264

C.A. 1974. 80. N10

⊕ ⊗