

HF^+ (Do, u.n.)
 DF^+ , Berkowitz Y, " 2738 1971
 F_2
Chem. Phys. Lett., 1971, 11, N1, 21-26.

(ann.)

Experimental potential energy curves for $X^2\Pi$ and $^2\Sigma^+$ states of HF^+ .

4 — (9)

Proc Phys., 1972, 30433 W

1971

Fig
all. na 05.

Boyd R. Y.,
Whitehead M.T.

y

J. Chem. Soc.,

1941, A, 22, 3549.



(Ces. Bk) III

Сравнение орбит, диаметров и массовых
показателей водоемкости (ЭВ)
Система кораллов

М-на	Орбит.	I	II	III	IV	Диаметр.
F ₂	гг	16.90	15.13	17.23	15.46	15.63 гг
	ог	19.84	17.92	19.31	17.59	17.35 ог
	жн	20.32	18.55	19.93	18.23	18.46 жн
	бн	34.25	35.13	36.89	38.13	
	бг	47.28	49.04	42.46	43.98	

X-5255

1971

F₂ и гр / papers и review. essays,

Cher. Sam Y., Frost A.A.,

J. Chem. Phys., 1971, 54, n2,

764-768

X1-2678

1971

113065

Electron affinities of halogen diatomic molecules as determined by endoergic charge transfer. Chupka, W. A.; Berkowitz, J. (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(6), 2724-33 (Eng). Ion pair formation by photon absorption at threshold wavelengths has been used to prep. I^- , Br^- , and F^- ions with approx. room-temp. thermal energies, as verified by retarding-potential measurements. The primary ions were accelerated, and their reactions with halogen mols. studied at lab. kinetic energies from 0.0 to ~ 4.0 eV. Thresholds were detd. for endoergic reactions of the type $X^- + Y_2 \rightarrow X + Y_2^-$, where X may be the same as Y. At least 2 reactions were used in detg. each electron affinity. The agreement was good in all cases. The values of electron affinity obtained are 3.08 ± 0.1 eV for F_2 , 2.38 ± 0.1 eV for Cl_2 , 2.51 ± 0.1 eV for Br_2 , and 2.58 ± 0.1 eV for I_2 . Interhalogen mol. ions such as IBr^- were also obsd., and measurement of the threshold for formation gave the value 2.7 ± 0.2 eV for the electron affinity of IBr . The retarding-potential measurements of F^- from F_2 strongly support a value for the dissocn. energy of F_2 in the neighborhood of 1.6 eV.

H₂

Ae

Do

C.A. 1971, 45, 18

+ CO₂ Br₂H₂; I₂

N

F₂

XI-2678

1971

2 Д339. Сродство к электрону галогидных двухатомных молекул, определенное с помощью эндотермической перезарядки. Chupka W. A., Berkowitz J., Gutman David. Electron affinities of halogen diatomic molecules as determined by endoergic charge transfer. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 6, 2724—2733 (англ.)

Образование ионных пар при поглощении фотонов в припороговой области использовалось для приготовления отрицат. ионов J⁻, Br⁻, F⁻ с приблизительно термич. энергией, соответствующей комнатной т-ре, как установлено в экспериментах с использованием задерживающего потенциала. Первичные ионы ускорялись, и изучались их реакции с молекулами галогенов при ки-

Ф. 1972. 2 Д

+4



нетич. энергиях в Л-системе координат от 0 до 4 эв. Определены пороги для процессов эндотермич. перезарядки. Из величин пороговой энергии рассчитаны величины сродства к электрону (в эв): $3,08 \pm 0,1$ для F_2 , $2,38 \pm 0,1$ для Cl_2 , $2,51 \pm 0,1$ для Br_2 , $2,58 \pm 0,1$ для J_2 . Наблюдались также интергалонидные молекулярные ионы, напр., JBg^- . Измерение порога их появления дает величину сродства к электрону молекулы JBg $2,7 \pm 0,2$ эв. Измерения кинетич. энергии F^- из F_2 указывают на величину энергии диссоциации F_2 в окрестности 1,6 эв.

Г. К.

F_2

Ac

5 Б123. Определение сродства к электрону двух-
атомных молекул галогенов методом эндоэргического
переноса заряда. Chupka W. A., Berkowitz J.,
Gutman David. Electron affinities of halogen dia-
tomic molecules as determined by endoergic charge trans-
fer. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 6, 2724—2733 (англ.)

Методом эндоэргич. переноса заряда по механизму
 $X^- + Y_2 \rightarrow X + Y_2^-$ или $X^- + Y_2 \rightarrow XY^- + Y$ ($X, Y = F, Cl, Br, J$) измерено сродство к электрону двухатомных моле-
кул галогенов. Для получения ионов X^- использована
р-ция $X_2 + h\nu \rightarrow X + X^-$ при учете кинетич. энергии обра-
зующихся ионов Y_2^- или XY^- . Эксперименты проведе-
ны со всеми ионами X и их смесями и показано, что
все р-ции $X^- + Y_2 \rightarrow XY + Y^-$ экзотермичны или же слегка
эндотермичны. Изучена зависимость сечения р-ций от
ускоряющего потенциала и найдена заметная кривизна
этой зависимости вблизи порога. Результаты измерений
показывают, что большинство ионов F_2^- образуется при
р-ции $J^- + F_2 \rightarrow F_2^- + J$ при сравнительно малом ускоряю

1971

8792-17

X. 1972.5

(4)



щем потенциале, причем эта р-ция или экзотермическая, или же термически нейтральная, а р-ции Br^- , $\text{F}^- + \text{F}_2 \rightarrow \text{F}_2^- + \text{Br}$, F эндоэргические. Р-ции всех ионов с Cl_2 эндоэргические. Подробно проанализированы погрешности измерений. Для сродства к электрону молекул F_2 , Cl_2 , Br_2 , J_2 и JBr получены значения 3,08; 2,38; 2,51; 2,58 и 2,7 эв соотв. Оценена энергия диссоциации F_2 (~ 1.6 эв).

М. Р. Алиев

F₂

XII-1823

1971

D₀

12 D255. Кинетическая энергия ионов, образующихся при фотоионизации молекул 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 целью определения энергий диссоциации *D* молекул HF и F₂ методом фотоионизационной масс-спектрометрии измерены кинетич. энергии положительно заряженных ионов, образующихся при следующих процессах: $\text{HF} + h\nu \rightarrow \text{H}^+ + \text{F}^-$ (1); $\text{F}_2 + h\nu \rightarrow \text{F}^+ + \text{F}^-$ (2). Найдено,

см. также HF (III)

Ф. 1971. 12Д

D

что при электронном сродстве атома F, равном 3,40 эв, величина энергии диссоциации молекулы HF оказывается равной $5,87 \pm 0,02$ эв, что хорошо согласуется с результатами ~~других~~ измерений. Величина $D(F_2)$ найдена равной $1,58 \pm 0,03$ эв. Исследование кинетич. энергии ионов выше порога процесса (2) показывает, что ион F^+ образуется в следующих состояниях 3P_2 , 3P_1 , 3P_0 ; при более высоких энергиях возможно образование F^+ -ионов в D-состоянии.

А. Зембеков

B 6629-X

1971

F_2 -(D₀), $CsF_2(\Delta G)$

Copsey D. N., Mirrell J. N.,

Stamper J. G.,

Mol. Phys., 1971, 21, 12, 193-204

F₂

X1 1492

1971

21 Б30. Расчеты геометрии и свойств некоторых межгалогенных соединений с учетом всех валентных электронов и применением методов ППДП/2 и ЧПДП. Deb B. M., Coulson C. A. CNDO/2 and INDO allvalence—electron calculations on the geometry and properties of some interhalogens. «J. Chem. Soc.», 1971, A, № 8, 958—970 (англ.)

Ив. мех.
расчет

Проведен расчет МО молекул F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 , ClF , BrF , IF , $BrCl$, ICl , IBr , ClF_3 , BrF_3 , IF_3 , ClF_5 , BrF_5 , IF_5 , IF_7 , BrF_7 и ClF_7 с включением валентных АО атомов (s и p), без учета вакантных d -АО с помощью методов ППДП/2 и ЧПДП. Показано, что для гомоатомных молекул одноцентровые части в выражении для энергии не зависят от геометрич. строения молекул (межатомных расстояний и углов) и предполагается, что это приближенно выполняется и для гетероатомных систем, так

X. 1971.21

+15



что для суждений о геометрии достаточно варьировать только двухцентровую часть энергии. В кач-ве АО выбраны безузловые ФСТ со специально подобранными экспонентами. Излагаются способы вычисления интегралов и матричных элементов и показано, что метод позволяет вычислить орбитальные энергии F_2 в хорошем согласии с расчетом полным методом Рутана. Для двухатомных молекул приведены равновесные расстояния, вычисленные из полных энергий и двухцентровых частей. Оба значения сравнительно близки, но их согласие с опытом ухудшается от F к J, как предполагается, вследствие приближенного характера используемого параметра β . Для многоатомных молекул удается предсказать значения углов при данной конфигурации, тогда как выбор конфигурации на основании ее сопоставления с другими геометрич. расположениями менее надежен. Предсказанные углы для молекул XY_3 (T-образных) согласуются с опытом. Для XY_5 и XY_7 расчет предсказывает более стабильные структуры в виде бипирамид (три- и пентагональной), в противоречии с опытом, но углы для опытных структур передаются хорошо. Для найденных равновесных геометрий вычислены дипольные моменты, константы ядерного квадрупольного взаимодействия, силовые постоянные и энергии одноэлектронных переходов, а также приведены орбитальные энергии. Метод ЧПДП, в общем, приводит к лучшему численному согласию с опытом.

М. Дяткина

Б₂

XI 2743

1944

(У)

6 Б118. Влияние горячих полос на порог ионизации некоторых двухатомных молекул галогенов. Diber V. H., Walker J. A., McCulloh K. E., Rosenstock H. M. Effect of hot bands on the ionization threshold of some diatomic halogen molecules. «3rd Int. Conf. Vacuum Ultraviolet Radiat. Phys., Tokyo, 1971. Conf. dig.» Tokyo, 1971; 1pAl-4/1-1pAl-4/4 (англ.)



ДЖК, 1942, ~6

Методом фотоионизац. масс-спектрометрии зарегистрированы начальные участки кривых эффективности фотоионизации (КЭФ) 6 двухатомных молекул галогенов. Все КЭФ обнаруживают пики, связанные с процессами автоионизации как в области порога, так и при более высоких энергиях фотонов, что не позволяет определять высшие потенциалы ионизации (ПИ). КЭФ имеют в области порога «хвосты», обусловленные больцмановским заселением 1- и 2-го колебательного уровней возбуждения молекул. Эти «хвосты» затрудняют определение первых ПИ молекул. Для их исключения понижали т-ру ионизац. камеры, что позволило получить точные значения адиабатич. ПИ молекул (эВ): F_2 $15,69 \pm 0,01$; Cl_2 $11,48 \pm 0,01$; Br_2 $10,52 \pm 0,01$; I_2 $9,37$; ICl $10,07 \pm 0,01$; IBr $9,79 \pm 0,01$. Полученные данные сравниваются с известными из литературы. В. Е. Скурат

F₂

XI-2744

1941

(7)

(7903z) Effect of hot bands on the ionization threshold of some diatomic halogen molecules. Dibeler, Vernon H.; Walker, James A.; McCulloh, K. E.; Rosenstock, Henry M. (Inst. Mater. Res., Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1971, 7(3), 209-19 (Eng). Photoion-yield curves are obtained for the mol. ions of the homonuclear diat. halogens and for ICl and IBr. Except for I₂, ionization thresholds of ground-state and vibrationally excited mols. are sep. identified by measurements made at several ion-source temps. The adiabatic ionization energies (in eV) are: $I(\text{F}_2) = 15.69$, $I(\text{Cl}_2) = 11.48$, $I(\text{Br}_2) = 10.52$, $I(\text{ICl}) = 10.07$, and $I(\text{IBr}) = 9.79$. A preferred value of $I(\text{I}_2) = 9.37$ eV is proposed. }

⑦ I₂, Cl₂, Br₂

P.A. 1942. 46. 2



1/100. 8/100

X1-2744

1971

F₂

7 Б146. Влияние горячих полос на порог ионизации двухатомных молекул некоторых галогенов. Dibeleg Vernon H., Walker James A., McCullough K. E., Rosenstock Henry M. Effect hot bands on the ionization threshold of some diatomic halogen molecules. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1971, 7, № 3, 209—219 (англ.)

(у) В области 850—1400 Å измерены квантовые выходы фотоионизации молекул F₂, Cl₂, Br₂, JCl, J₂ и JBr при различных т-рах источника ионов. Идентифицированы ионизац. пороги, соотв-щие основному и возбужденным колебательным состояниям. Определены адиабатич. потенциалы ионизации: 15,69 (F₂), 11,48 (Cl₂), 10,52 (Br₂), 10,07 (JCl) и 9,79 эв (JBr). Для J₂ предложена оценка 9,37 эв. М. Р. Алиев

(5)

X

X. 1972. 7

Fig 2

X1 205

1971

(103199d) Electron affinities of the halogen molecules by dissociative electron attachment. DeCorpo, James J.; Franklin, Joe L. (Dep. Chem., Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(5), 1885-8 (Eng). The electron affinities of the halogen mols. have been detd. mass spectrometrically. This was accomplished by measuring both the appearance potentials and av. translational energy of the neg. halogen mol. ion resulting from dissociative electron attachment reactions. The values reported in this work agree favorably with those found in the recent literature. Also reported are the heats of formation of several free radicals used as auxiliary data. RCJQ

(+4) I

(+3) II

C.A. 1971. 74.12

☒

XI - 1493

1974

F
2

9 Д82. Электронная структура молекулы фтора.
Fajans K., Johnson O. The electronic structure of
the fluorine molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 9, № 2,
95—98 (англ.)

Проведено исследование эксперим. данных для молекул галогенов и интергаллидов. На основании сравнения межъядерных расстояний, силовых констант в основном состоянии и их изменений при возбуждении молекул показана аномальность этих характеристик для молекулы фтора. Это указывает, что электронная структура F_2 отлична от структур $X^+ \bar{e}_2 X^+$ и $X^+ \bar{e}_2 Y^+$, которые являются подходящими для молекул других галогенов и интергаллидов. Приводится вероятная электронная структура молекулы фтора $2^2 1^2 (F^{9+}) \bar{e}_{10} (F^{9+}) 1^2 2^2$.

В. Я. Артюхов

электр.
стр-ра

Ф. 1971. 9Д

F₂

XI-1493

1971

42654v Electronic structure of the fluorine molecule, Fa-
ians. K.; Johnson, O. (Dep. Chem., Univ. Michigan, Ann
Arbor, Mich.). *Chem. Phys. Lett.* 1971, 9(2), 95-8 (Eng).
The electronic structure of F₂ is different from that of Cl₂,
Br₂, and I₂, as suggested by the quanticule theory (F., 1963-5).
The internuclear distance, the vibrational force const., and
their changes on excitation for F₂ do not agree with the values
expected for X⁺ $\bar{e}_2$ X⁺, and for X⁺ $\bar{e}_2$ Y⁺ which fit BrCl, ICl, and
IBr.

u. n.,

н. ер-па

C. A. 1971

45

6

XI-1493

1971

U18 B12. Электронное строение молекулы фтора.
Fajans K., Johnson O. The electronic structure of the
fluorine molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 9, № 2, 95—
98 (англ.)

Обсуждены аномалии в св-вах F_2 по сравнению с дру-
гими Hal_2 : энергии связи, относит. возрастание силовой
постоянной и $1/r_e$ (по сравнению с J_2) и на этом осно-
вании высказано предположение о том, что тип связи в
 F_2 отличен от связи в других Hal_2 . Если Cl_2 , Br_2 и J_2 мо-
гут быть описаны ф-лой $X^+e_2-X^+$, то для F_2 предлагает-
ся ф-ла $2^21^2(F^{9+})e_{10}^-(F^{9+})1^12^2$, где 1^2 и 2^2 означают элек-
троны, принадлежащие только одному ядру, а e_{10} — де-
сять обобществленных электронов. С этой же точки зре-
ния рассматриваются молекулы интергалогенов.

М. Дяткина

X. 1971. 18

$O_2, S_2, Se_2, Te_2, Sc, S_8, F_2, HCN, HF(I)$ 1971^{11, 12}

Guyon P. M., Berkowitz J.,^{13, 14}

J. Chem. Phys., 1971, 54, No 4, 1814-26
(ann.)
XI 937

Interpretation of photoionization threshold behavior.

14 Aug 1971

10

⑤

ca 1971, 74, N16, 813866

XI 2648

1971

F₂

24 B132. Фотоэлектронные спектры галогенов и смешанных галогенидов JCl и JBr. Potts A. W., Price W. C. Photoelectron spectra of the halogens and mixed halides JCl and JBr. «Trans. Faraday Soc.», 1971, 67, № 5, 1242—1252 (англ.)

В области энергий 9—21 эв получены фотоэлектронные спектры высокого разрешения F₂, Cl₂, Br₂, J₂, JCl и JBr. Измерены вертикальные и адиабатич. ионизац. потенциалы, а также проведено отнесение колебательной структуры по всем ионизац. состояниям, образующимся при удалении электрона с каждой молек. орбитали. Полученные результаты сопоставлены с данными эмиссионной спектроскопии молек. ионов и молек. спектрами в вакуумной УФ-области, а также обсуждены на основе данных об электронном строении исследованных молекул.

О. Г. Гаркуша

J; ш.п.

+5к

+5



X. 1971. 24

F₂

XI 2648

1971

аннотация.

судя

(4)

(12726c) Photoelectron spectra of the halogens and mixed halides iodine chloride and iodine bromide. Potts, A. W.; Price W. C. (Dep. Phys., Kings Coll., London, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 1971, 67(Pt. 5), 1242-52 (Eng). High-resoln. photoelectron spectra of F₂, Cl₂, Br₂, I₂, ICl, and IBr are reported and interpreted in terms of the electronic structures of these mols. Vertical and adiabatic ionization potentials as well as vibrational data are given for the ionized states arising from the removal of an electron from each MO. Where possible, these values are related to the emission spectra of the mol. ion and to the vacuum uv spectra of the neutral species.

75

X

C. A. 1971. 752

OF₂, OF(Vi), O₂, F₂ (V₁) XI 3031 1972
Andrews L.

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

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

ppp В. В. Алексеев

Вхс Хим, 1972, 23 5217

10



X1-3034

1972

F₂Cl₂(w_e)

40900q Laser Raman spectra of liquid fluorine and chlorine. Barral, Jean C.; Hartmanshenn. Olivier (C.E.N.-Saclay Commis. Energ. At., Gif-sur-Yvette, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1972, 274(16), 981-4 (Fr). In the laser-excited Raman spectrum of liq. F at -180° under pressures of 2-3 atm., the fundamental vibrational frequency (891.5 cm^{-1}) was similar to that of the gas (891.8 cm^{-1}). The shape of the liq. vibrational band was slightly asym. The half-width was 0.8 cm^{-1} . The degree of depolarization was very small (0.05) and was similar to that in the gas (0.058). The Raman frequencies of liq. Cl at -34.6° , 1 atm, were $7-8\text{ cm}^{-1}$ lower than corresponding frequencies in the gas phase. The degrees of depolarization of vibrations in liq. Cl₂ were very small.

C.A. 1972. 77. 6

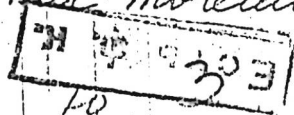
$\text{Li}_2, \text{LiH}, \text{F}_2, \text{HF}$ (Ei, pacem) " $\bar{x} 7261$ 1972

Bendaxoli G. L., Bernardi F.
Grecchia A., Palmieri P. A.

Theor. chim. acta, 1972, 27, N1, 63-
-68 (chem.)

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

Proc. Chem., 1973, 3521



F₂

XI 3217

1972

(~~169515~~) 169515x Shock tube calorimeter for the dissociation energy of fluorine. Blauer, Jay; Solomon, Wayne (Air Force Rocket Propul. Lab., Edwards, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1972, 57(9), 3587-9 (Eng). The shock tube was used as a calorimeter to det. the dissocn. energy D_0° of F₂. Mixts. of F₂, HF, and Ar were shock heated to 1400-3200°K and allowed to approach dissociative equil. The equil. temp. was detd. by monitoring the HF equil. radiant intensity at 2.5 μ . The resultant value of

D_0° of 37.1 ± 1.2 kcal/mole was compared with the recent results.

C.A. 1972, 77, N 26

И 3217-

1972

F₂

№ 6 Б743. Ударная труба как калориметр для определения энергии диссоциации фтора. Blauer Jay, Solomon Wayne. Shock tube calorimeter for the dissociation energy of fluorine. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 9, 3587—3589 (англ.)

В области т-р 1400—3200° К в ударной трубе определена энергия диссоциации F₂. Равновесные условия за фронтом ударной волны рассчитаны из первоначальных условий и измерений скорости ударной волны. Равновесные т-ры для смесей F₂+Ar определены по интенсивности излучения примеси HF при 2,5 мк. Найдено выражение т-рной зависимости этого излучения (R) в виде: $\lg R = (12,82 \pm 0,03) + (3,91 \pm 0,2) \lg T$. Вычислена стандартная теплота образования атомов фтора и энергия диссоциации при 0° К, равные, соотв., $19,3 \pm 0,6$ и $37,1 \pm 1,2$ ккал/моль. Отмечена возможность расширения т-рной области эксперимента. В. К. Камышова

(70)

(ΔHF)

X. 1973. №6.

(+1)

☒

1972

 F_2 Cl_2 сечен.
иониз.

! 4 Д268. Сечения ионизации F_2 и Cl_2 электронным ударом. Center R. E., Mandl A. Ionization cross sections of F_2 and Cl_2 by electron impact. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 10, 4104—4106. (англ.)

С помощью квадрупольного масс-спектрометра измерены сечения ионизации F_2 и Cl_2 электронным ударом. Регистрировались отношения ионных токов для смесей Cl_2 —Ag и F_2 —Ag при энергиях электронов 15—100 эв. Максим. сечения $\sigma_{\text{макс}}$ достигаются при 100 эв и составляют $1,5 \cdot 10^{-16}$ и $7,0 \cdot 10^{-16}$ см² для F_2 и Cl_2 соответственно. Величина $\sigma_{\text{макс}}$ для Cl_2 согласуется с эмпирической линейной зависимостью между $\sigma_{\text{макс}}$ и корнем квадратным из поляризуемости, справедливой для атомов и молекул многих в-в (за исключением щелочных металлов). Оценка поляризуемости для F_2 дает $8 \cdot 10^{-25}$ см³.

В. Ю. Орлов

+1



Ф. 1973. № 4

F₂

XI. 2967

1972

119198e Theoretical study of the fluorine molecule using the method of optimized valence configurations. Das, G.; Wahl, Arnold C. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). J. Chem. Phys. 1972, 56(7), 3532-40 (Eng). The method of optimized valence configurations (OVC) was used to study the potential curve for the ground state of the F₂ mol. All the important electron correlation-effects within and between various mol. shells are investigated via the multiconfiguration SCF

M. N.

ub. mex.
pcreti

C. A. 1972. 76. 20

(MCSCF) process. Consistent with the philosophy of the OVC method, these effects fall into 2 distinct categories: (1) the mol. correlation, which vanishes when the mol. dissociates into the constituent atoms, and (2) the at. correlation, which passes asymptotically to that for the atoms. The very weak interdependence or "coupling" of the 2 correlation types results in considerable computational simplification by permitting MCSCF calcs. to be performed on groups, consisting of a comparatively small no. of configurations, and the evaluation of their resp. contributions to the bonding interaction by a simple summation in the spirit of pair theory. Such calcs. on F_2 yield a potential curve which is very similar to the one derived from expt. Calcd. values of the spectroscopic consts. D_e , ω_e , R_e are, resp., 1.67 eV, 942 cm^{-1} , 2.67 bohr. These are in good agreement with the corresponding exptl. values 1.68 eV, 932 cm^{-1} , 2.68 bohr. General rules are given for applying this procedure to other mol. systems.

X1-2267

1972

19 Б22. Теоретическое исследование молекулы F_2 методом оптимизированных валентных конфигураций. Das G., Wahl Arnold C. Theoretical study of the F_2 molecule using the method of optimized valence configurations. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 7, 3532—3540 (англ.)

Отмечено, что существующие до сих пор квантово-хим. расчеты молекулы F_2 приводят к неудовлетворительным результатам для энергии связи и потенциальной кривой. Так метод ССП МО при точности, близкой к хартри-фоковской, вообще приводит к отсутствию связи в молекуле F_2 по отношению к диссоциации на атомы. Наилучшие расчеты по методу конфигац. взаимодействия дают энергию связи в 2 раза меньше экспериментальной. Эти результаты подчерки-

расчет
М.И.

X.1972.19

вают 2 основных недостатка хартри-фоковского приближения: неправильное описание образования молекулы и диссоциации и неучет увеличения энергии корреляции при образовании новой электронной пары. В связи с этим предприняты расчеты молекулы F_2 методом оптимизированных валентных конфигураций (ОВК, см. РЖХим, 1966, 16Б11), основанным на формализме многоконфигурац. ССП. Метод ОВК предусматривает отбор

наиболее важных конфигураций для описания образования молекулы: 1) необходимых для правильного описания процесса диссоциации, 2) существующих в молекуле, но формально исчезающих в пределе разделенных атомов, 3) описывающих внутриатомные корреляции, если их вклад изменяется при образовании молекулы на некоторую заданную пороговую величину. Конфигурации первых двух типов могут быть отобраны чисто формально и получают потенциальную кривую с точностью до $\pm 0,3$ эв. Конфигурации 3-го типа могут быть отобраны только в процессе расчета и требуются для достижения большей точности (0,06 эв.). Использован базис АО слейтеровского типа вплоть до $4f$ со значениями магнитного квантового числа $|m|=0,1$, дающий энергии ССП молекулы при равновесном расстоянии в пределах 0,001 ат. ед. и двух разделенных атомов в пределах 0,0004 ат. ед. от соответствующих точных хартри-фовских значений. Подробно проанализирована роль различных корреляц. эффектов. Рассчитанная потенциальная кривая очень близка к экспериментальной и дает следующие значения спектроскопич. констант: $D_e = 1,67$ эв (1,69), $\omega_e = 942$ cm^{-1} (932), $R_e = 2,67$ ат. ед. (2,68), в скобках — опытные значения. Сформулированы общие правила применения метода ОВК к др. молек. системам.

А. Багатурьянц

HF, F₂ (u.n., Do) XI 3074 1972

Donardo G.D., Douglas A.E.,
J. Chem Phys., 1972, 56, No. 10,
5185-5186 (enu.)

Electronic spectra of HF and F₂.

Bye Lum, 1972, 215157 10



F₂

XI 3260

1972

(Do) 156649u Shape of the dissociative ionization curve and energy of dissociation of the fluorine molecule. Dronin, A. A.; Gorokhov, L. N. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). *Teplofiz. Vys. Temp.* 1972, 10(4), 750-3 (Russ). The ionization curve for the reaction $F_2 + h\nu \rightarrow F + F^+ + e$ was calcd. At energies 0.20 eV higher than the threshold, the curve exhibits a linear section. At 80°K, F₂ exhibits a rotary excitation. The linear sections justified extrapolation in the detn. of the dissocn. energy of F₂. When fragment ions dominate the mass spectra, linear extrapolation is not justified.

C.A. 1972. 77, N24.

X1 3260

1972

F₂

2 Б101. Форма кривой диссоциативной ионизации и энергия диссоциации молекулы F₂. Д р о н и н А. А., Г о - р о х о в Л. Н. «Теплофиз. высоких температур», 1972, 10, № 4, 750—753

Проведен расчет кривой ионизации для процесса $F_2 + h\nu \rightarrow F + F + e$. Показано, что кривая имеет линейный участок на протяжении 0,2 эв избытка энергии над пороговым значением. Таким образом, при линейной экстраполяции должно получаться правильное значение потенциала появления. В случае преобладания в масс-спектре осколочных ионов метод линейной экстраполяции неприменим.

Резюме

X. 1973. №2.

F_2

om m u e u 3420

XI-3772

1972

T_2

151191v Pure rotation and vibration-rotation Raman spectra of fluorine and tritium. Edwards, H. G. M.; Long, D. A.; Love, R. (Sch. Chem., Univ. Bradford, Bradford, Engl.). *Advan. Raman Spectrosc.* 1972, 1, 504-14 (Eng). The pure rotational Raman spectra gave the consts. $B_0 = 20.041$, $D_0 = 0.0051$, $\nu_0 = 2464.08$, $B_1 = 19.463$, and $D_1 = 0.0050$ cm^{-1} for

u. n.

T_2 and $B_0 = 0.8845$, $D_0 = 5.31 \times 10^6$, $\nu_0 = 892.02$ cm^{-1} , and $r_0 = 1.4164$ Å for F_2 .

чисто бранс.

и калед. бранс. спектр

(+1) ~~17~~

C. A. 1973, N 26, 79

1982

F₂

19 Б28. Расчеты молекул по методу Томаса—Ферми—Дирака. II. Одноэлектронные энергии для F₂. Goodisman Jerry. Thomas—Fermi—Dirac calculations for molecules. II. One—electron energies for F₂. «Theor. chim. acta», 1972, 25, № 3, 205—214 (англ.; рез. нем.)

(одноэлектр.
энергии)

Вычислены энергии одноэлектронных уровней в молекуле F₂ при межъядерном расстоянии 2,68 ат. ед. по методу Томаса—Ферми—Дирака. Электростатич. потенциал, полученный в рамках метода Томаса—Ферми—Дирака, модифицирован с учетом обменного потенциала типа $\sim r^{1/3}$ так, чтобы получить правильную (кулоновскую) асимптотику на больших расстояниях от ядер. Для сравнения аналогичные расчеты выполнены для объединенного атома (Ar) и для разъединенных атомов (F). Орбитальные энергии качественно согласуются с расчета-

X.1982.19

ми методом самосогласованного поля. После введения поправки (из сравнения одноэлектронных уровней атома F в приближении самосогласованного поля и в статистич. модели) одноэлектронные уровни F_2 в обоих методах совпадают с точностью порядка 1 эв. Т. К. Ребане

F₂

(y; d₀)

107317a Vacuum ultraviolet spectrum of molecular fluorine. Gole, James L.; Margrave, John L. (Dep. Chem., Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 43(1), 65-86 (Eng). The absorption spectrum of F₂ was obsd. in the vacuum uv region at <1500 Å at a dispersion of 3.75 Å/mm. Spectra were obsd. at pressures from 80 to 600 μ and at temps. both somewhat <20° and at approx. 100°. Previously obsd. spectra in the vacuum uv region have been reinterpreted and extended. The spectroscopic detn. of the F₂ dissocn. energy is discussed. A previously identified progression of bands at 877 Å is used to fix a min. value for the dissocn. energy of 33.05 kcal/mole for F₂. The implication of this result to other recent studies is discussed. Rydberg series converging to the first ionization potential of F₂ were established and further Rydberg series are discussed. The current data are compared with previous studies in the uv region and data from photo electron spectroscopy to reinterpret data on F₂⁺. Insight is provided on the binding energies of the "π" mol. orbitals. Some evidence suggests that the "π" mol. orbitals may be more important than previously anticipated.

1972.

XI-5231

C.A. 1972. 77. v 16.

X/ 3231

1972

 F_2

6 Б136. Вакуумный ультрафиолетовый спектр молекулярного фтора. Gole James L., Margrave John L. The vacuum ultraviolet spectrum of molecular fluorine. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 43, № 1, 65—86 (англ.)

(м.п.) Исследован вакуумный УФ-спектр поглощения молекулы F_2 ниже 1500 Å с дисперсией 3,75 Å/мм при давл. 80—600 мм.рт.ст. и т-рах 20° и 100°. Пересмотрены также лит. данные по спектрам F_2 в УФ- и видимой областях. Нижняя граница энергии диссоциации оценена в 33,05 ккал/моль. Идентифицирована ридбергова серия, сходящаяся к пределу ионизации; структура этой серии сопоставлена с данными по фотоэлектронному спектру. Для изменения частоты колебания при переходе от основного состояния к состояниям $^2\Pi_g$ и $^2\Pi_u$ получены значения 150 и -387 см^{-1} , соотв. Отмечено, что основной выход в образовании хим. связи в F_2 играют π_u -орбитали.

М. Р. Алнев

X. 1973. № 6

Li₂, F₂ (кб. нес. парем) $\bar{x}$ 7703 1972

Hernandez A., Audena E.V.,

J. Chem. Phys., 1972, 57, N12, 5350-3
(англ.)

Loge localization analysis of
diatomic molecules. Diatomic
lithium and molecular fluorine.

10

⊕

○

(см. примечан.) CA, 1973, 78, N8, 481905

F₂

Jonston Harold
Birks John.

1972

Do

"Accounts Chem. Res"

perman.

1972, 5 v 10, 327-35.

● (c.c. H₂; III).

$\text{Li}_2, \text{Be}_2, \text{B}_2, \text{C}_2, \text{N}_2, \text{F}_2$ (paper) 1972
IX 4062 Niessen W. van.,
Theor. chim. acta, 1972,
27, N1, 9-23

10

LiH, Li_2 ; BH, AlH, HF, BF, CO, N₂, 1972
F₂; ClF; H₂O, NH₃, CH₄; CH₃F;
H₂O (ex. h.) X 7811

Одзор

ships comm. W. N., MTP (Med. Tech. Publ.
Co.) Int. Rev. Sci.: Phys. Chem., Ser.
One, 1972, 1, 164-96

XI-3086

1972

F₂

Cl₂

Br₂

I₂

(D₂
u.h.)

(an. equiv.)!



(+3) A

C.A.

1972. 76. 20

T 119139m Physical and spectroscopic properties of the halogens. Turner, James Johnson (Univ. Chem. Lab., Cambridge, Engl.). MTP (Med. Tech. Publ. Co.) Int. Rev. Sci.: Inorg. Chem., Ser. One 1972, 3, 253-91 (Eng). Edited by Gutmann, Viktor. Butterworths: London, Engl. A review with 160 refs. includes discussion of: bond dissocn. energies; spectroscopic consts. and potential energy curves; resonance fluorescence; resonance Raman effect; spectral properties of halogen atoms; photochem. studies; complexes; ESR, NMR, and Moessbauer spectra; and solid halogens (structures, thermochem. data, nuclear quadrupole resonance).

1972

F₂

М. В.

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

Определение вол.ност. и термо-
динамических свойств доцест.

F₂

Peslak John, Jr.

1972

"Diss. Abstr. Int. B",

1972, 32, (11), 6333.

Ab initio molecular orbital
study of hydrogen



(see H; III)

4 03 05.89 06
TE, Ch, Ph

F₂

1472
3
1851

K p.N 40305.8904K

Wahl_A.C.

The calculation of energy quantities for
diatomic molecules.

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

0058 ММК

038 042

ВИНИТИ

F₂

1973

Anderson, Alfred B.

J. Chem. Phys.

1973, 58(3), 503-5.

(c. n.)

■ (cu. LiH; III)

1973

F₂

(Ae)

115348x Fragmentation of negative ions formed in collisions of alkali atoms and halogen molecules. Baede, A. P. M.; Auerbach, D. J.; Los, J. (FOM-Inst. Atoom-Molecuulfys., Amsterdam, Neth.). *Physica (Utrecht)* 1973, 64(1), 134-48 (Eng). Total cross sections were measured for the production of neg. halogen ions in collisions between alkali atoms and homonuclear halogen mols. at relative energies from threshold up to about 20 eV. By means of a mass spectrometer the cross sections for neg. parent-ion and fragment-ion production could be measured sep. These measurements confirm the previously measured adiabatic electron affinities of the homonuclear halogen mols. The fragment- and parent-ion cross sections are about equally large. The general behavior of the fragment-ion cross sections is characteristically dependent on the alkali collision partner: the K cross sections peak sharply at energies just above threshold; the Na cross sections, however, have a smooth max. at higher energies. This could be explained qual. by a simple model.

C. 07. 1973. 78 N 18 $\boxtimes$ (+3) Cl₂, Br₂, I₂;

F_2 (газ, ж., крист.)

1973

18 Б211. Исследование спектроскопическими методами фтора в конденсированном и адсорбированном состоянии. Barral Jean—Claude. Etude par les méthodes spectroscopiques du fluor à l'état condensé et adsorbé. Thèse doct. ing. Univ. Claude Bernard Lyon, 1973. 121 p., ill. (франц.)

Коллбат.

Спектроскоп

Исследованы особенности колебательных спектров и вращательных спектров фтора в газ., жидк., крист. (α - и β -фазы) и адсорбированном состояниях. Оценены времена периориентации молекул в жидк. состоянии, уточнена структура различных кристаллич. фаз, состояние адсорбированных молекул и характер их упаковки на поверхности. А. Бобров

Х. 1976 N 18

Li, F₂; LiF; F (all, Mo, Fe)
pacific m) X 7691 1973

Balint - Rivetti G.G.,
Mol. Phys., 1973, 25, N2, 393-435
(ann.)

Potential energy surfaces
for simple chemical reactions:
 $\text{LiF} + \text{F}_2 \rightarrow \text{LiF} + \text{F}$.

Proc Amer., 1973, 15582 10

F₂

XI 3662

1973

Д 6 Б101. Энергия диссоциации фтора. Berkowitz J.,
Wahl Arnold C. The dissociation energy of fluorine.
Adv. Fluorine Chem. Vol. 7». London, 1973, 147—174
(англ.)

Обзор. Библ. 75

Энергия
диссоц.

X.1974N6

30720.8766
TE, Ch, Ph, Me,
MGU

F_2

40892

отчек
N 785

Breshears W. Dale, Bird Paul F.

Density gradient measurements of F_2
dissociation rates in shock waves.

"J. Chem. Phys.", 1973, 58, N 11, 5176-5177

8:00 PM.)

0320 пик

907 907 9 1 3

ВИНИТИ

F₂

X-8382

1973

7303m. Electrostatic calculation of bond energy. Boeyens, J. C. A. (Natl. Inst. Metall., Rand Afrikaans Univ., Johannesburg, S. Afr.). *J. S. Afr. Chem. Inst.* 1973, 26(3), 94-105 (Eng). The described method, for calcg. the energies of covalent bonds by using bond lengths (d) and at. radii (r) as parameters, is based on the overlapping of spherical charge clouds as the model for covalent bonding, in which the amt. of overlap is detd. by the obsd. d value. The appropriate r values are tabulated, and are shown to be inversely proportional to the 1st ionization potentials for atoms having similar electronic configurations. For bonds with predominantly covalent character, satisfactory agreement with published exptl. values was obtained with the calcd. bond dissocn. energies (D) for many homonuclear (e.g., F_2 , Cs_2 , H_2 , Si_2) and heteronuclear (e.g., AgH , BN , PO , ICl) diat. mols., and with the calcd. D values and bond energies of many common polyat. mols. (e.g., CH_4 , H_2S , $Cr(CO)_6$, MeI). For all bonds with significant partial ionic character, agreement between calcn. and expt. was unsatisfactory.

Do
paerem

C.A. 1974. 80. N2

(+11) ☒

X-8382

Cs₂, F₂, H₂, ICl, H₂S, PO, Si₂, CH₃I, BN,
Ag.H, Cr(CO)₆ (D.)

Boeyens J.C.A.,

J. S. Africa Chem. Inst.,

1973, 26, N3, 94-105

10, 11

CA, 1974, 80, N2, 7303m

F₂

аннотации 3-3272 1973

(5).

1973-1X

5 Д141. Улучшенный расчет потенциалов ионизации молекул с замкнутыми оболочками. Cederbaum L. S., Hohlneicher G., Niessen W. v. Improved calculations of ionization potentials of closed-shell molecules. «Mol. Phys.», 1973, 26, № 6, 1405—1424 (англ.)

Развитый авторами метод нахождения полюсов одночастичной ф-ции Грина применен для расчета вертикальных потенциалов ионизации молекул F_2 , H_2O , C_2H_2 и H_2CO . В качестве начального приближения используются одночастичные хартри-фоковские энергии, далее находятся поправки разложением собственно энергетич. части в ряд теории возмущений. Показано, что для малых молекул разложение собственно энергетич. части до второго

ф. 1974 v5

(+3)

порядка недостаточно, поэтому в расчете используются члены до четвертого порядка. При этом появляются новые полюса ф-ции Грина, соответствующие многократно ионизованным состояниям. Найденные вертикальные потенциалы ионизации для F_2 согласуются с эксперим. данными, тогда как по теореме Купманса получаются неверные значения.

А. И. Дементьев

F_2

(7)

XI-3764

аттест # 3-3272

X. 1974
N 10

10 Б16. Улучшенный расчет потенциалов ионизации молекул с закрытыми оболочками. Cederbaum L. S., Hohlneicher G., Niessen W. v. Improved calculations of ionization potentials of closed-shell molecules. «Mol. Phys.», 1973, 26, № 6, 1405—1424 (англ.)

Развитый авторами ранее (см. Chem. Phys. Lett. 1973, 18, 503) метод функций Грина для вычисления потенциалов ионизации применен для расчета молекул F_2 , H_2O , C_2H_2 и H_2CO . В кач-ве начального приближения используются значения одноэлектронных энергий в приближении Хартри-Фока. Поправка получается по теории возмущений из разложения собственно-энергетич. части. Показано, что для малых молекул разложение собственно-энергетич. части до второго порядка недостаточно. Поэтому используются члены более высокого порядка (до четвертого). При этом появляются новые полюса функции Грина, соотв-щие многократно ионизированным состояниям. Эти потенциалы ионизации (элементарные возбуждения) определяются итерационным решением ур-ния Дайсона. Дальнейшее улучшение согласия с экспериментом предлагается достигнуть расширением хартри-фоковского базиса включением дополнительных порядков теории возмущений и учетом неадиабатичности.

В. Р. Блок

1973

+3

☒

40227.7523

Ph, Ch, TE

F₂

XI 3763

40892

1973

1832

Child M.S., Bernstein R.B. Diatomic
 interhalogens: systematics and implica-
 tions of spectroscopic interatomic poten-
tials and curve crossings. "J. Chem. Phys.",
 1973, NII, 5916-5925

(англ.)

58

(см. Br₂; III)
 039 040 3 0 4 6

0054 ПРИ ВИНТИ

1973

$I_2; Br_2; Cl_2; F_2; YCl;$
 $YBr; BrCl; ClF; BrF; YF$ (I, A) $\bar{x} 3768$
(Ogop)

Coxon Y. A.,

Mol. Spectrosc., 1973, 1, 177-228
(ann.)

Low-lying electronic states
of diatomic halogen mole-
cules.

10

to

(F)

CA, 1973, 79, N22, 1307840

NF:

F₂.

расчет
м.п.

XI 3681 XI 3777

1973

4 B25. Кривые потенциальной энергии и спектроскопические постоянные ряда двухатомных систем. Ellis D. J., Banyard K. E., Tait A. D., Dixon M. Potential energy curves and spectroscopic constants for some diatomic systems. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1973, 6, № 9, 1233—1236 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия в миним. слейтеровском базисе рассчитаны энергии и волновые функции основного и ряда возбужденных состояний систем NF, NF⁻, F₂²⁺, F₂⁺, F₂ и F₂⁻. Для трех последних молекул учтены все конфигурации, для остальных — конфигурации, включающие возбуждения только валентных электронов. Межъядерное расстояние R менялось в интервале от 1,5 до 3,9 ат. ед., причем для всех молекул взято по 13 точек, кроме F₂⁻, где расчет проведен в 10 точках. Методом Данхема по получен-

XI 974 N 4

☒

(+5)

④ Виноград

ным потенциальным кривым основных состояний вычислены спектроскопич. постоянные R_e , ω_e , $\omega_e x_e$, B_e и α_e . Основное состояние F_2^{2+} типа симметрии ${}^3\Sigma_g^-$ получено несвязанным, хотя в области $2,7 < R < 3,1$ ат. ед. потенциальная кривая имеет почти горизонтальный участок. Для состояний других типов симметрии (Σ и Δ) кривые также получены отталкивательными. Сравнение с опытными данными для F_2 , F_2^+ и NF показывает, что все рассчитанные ω_e завышены, $\omega_e x_e$ согласуются качественно, B_e совпадают с эксперим. данными в пределах 10%, а α_e занижены на 15—25%. Максим. отклонение в R_e составляет $\sim 0,15$ ат. ед. (для NF). Н. Ф. Степанов

F₂

X3681

XI-3777

1973

2 Д140. Кривые потенциальной энергии и спектроскопические постоянные некоторых двухатомных молекул.

Ellis D. J., Banyard K. E., Tait A. D., Dixon M. Potential energy curves and spectroscopic constants for some diatomic systems. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1973, 6, № 9, 1233—1236 (англ.)

В рамках метода, основанного на использовании минимального базисного набора АО молекул F_2 , F_2^+ и F_2^- было учтено взаимодействие всех возможных конфигураций, обладающих требуемыми свойствами симметрии и спином. Этим методом вычислены электронные термы основных состояний молекул. Определены некоторые спектроскопич. постоянные. Аналогичные вычисления, учитывающие лишь взаимодействие конфигураций, отвечающих наличию «замороженной сердцевины», образованной четырьмя $1\sigma(1s)$ МО, проделаны для молекул NF , NF^- и F_2^{++} . Результаты расчета сравниваются с эксперим. данными и теоретич. расчетами других авторов.

Ю. П. Денисов

М. И.
Э. С.

(+)

☐

4/1974
N2

F₂

YI-3681

1973

XI-3774

not eny.
Kpue

130812h Potential energy curves and spectroscopic constants for some diatomic systems. Ellis, D. J.; Banyard, K. E.; Tait, A. D.; Dixon, M. (Dep. Phys., Univ. Leicester, Leicester, Engl.). *J. Phys. B* 1973, 6(9), L233-L236 (Eng). By using a minimal basis set of at. orbitals, F_2 , F_2^+ , and F_2^- were examd. by means of complete configuration interaction (CI) calens. whereas, for NF , NF^- and F_2^{2+} , a complete valence CI treatment was employed. Potential energy curves were detd. with the object of calcg. spectroscopic constns. and, where possible, such results were compared with previous calens. and also with expt.

CA1973

79, 22

(+5)



40123.7233
Ch, Ph, TE

P_2

(м. н.) 49969

1973

1811

оппозиции А-2588

Hooydonk G. van.

(м. H_2 ; III)

On an ionic approximation to
homonuclear bonding.

"Z.Naturforsch.", 1973, 28a, N 11, 1836-1842

(англ.)

0030

009 010

023

ВИНИТИ

X1-3404

1973

22 Б13. Неэмпирические расчеты молекулы F_2 . Kas, seckert E. Ab Initio-Rechnungen zum F_2 -Molekül. «Z. Naturforsch.», 1973, 28a, № 5, 704—708 (нем.; рез. англ.)

Основное и ряд низко лежащих возбужденных состояний молекулы F_2 рассчитаны неэмпирич. методом конфигурац. взаимодействия (КВ) в базисе волновых функций метода валентных схем с АО слейтеровского типа и в базисе волновых функций ССП со сгруппированными лепестковыми гауссовскими функциями. Метод ССП КВ приводит к достаточно хорошему описанию св-в основного состояния, однако, осталось невыясненным в какой мере достоверны результаты для возбужденных состояний. Анализ потенциальных кривых нек-рых высоко лежащих возбужденных состояний привел к заключению, что экспериментально наблюдаемая система полос в видимой оранжевой части спектра может быть отнесена к двум переходам ${}^1\Sigma_g^- \rightarrow {}^1\Pi_u$ и ${}^1\Sigma_u^+ \rightarrow {}^1\Pi_g$. По резюме

X. 1973 N 22

X 9-1333

F₂

11 Д270. Неэмпирические расчеты молекулы F₂. Kasseckert E. Ab Initio-Rechnungen zum F₂-Molekül. «Z. Naturforsch.», 1973, 28a, № 5, 704—708 (нем.; рез. англ.)

1973

Методом валентных связей и МО с учетом взаимодействия конфигураций рассчитаны термы основного и возбужденных состояний молекулы F₂. В методе ВС использовался мин. набор слэтеровских АО, в методе МО — функции Виттена. Для основного состояния с учетом восьми конфигураций, возникающих из мин. набора, энергия диссоциации оказывается равной 2,1 эв, что больше эксперим. величины 1,6 эв. Наилучшее значение теоретич. энергии диссоциации (1,56 эв) получается при учете 52 конфигураций симметрии $^1\Sigma_g^+$, построенных на принятом базисе МО. Расчет возбужденных состояний, в которые ионные конфигурации дают больший вклад, выполнен с меньшей точностью. В частности, термы $^1\Sigma_g^-$, $^1\Pi_u$ и $^1\Sigma_u^+$, $^1\Pi_g$, переход между которыми дает систему полос в оранжевой области спектра, расположены на ≈ 30 эв выше основного, что является заведомым завышением. Уточнение расчета возможно только при учете в использованном базисе АО М-оболочки.

Е. Е. Никитин

ш.п.; 1973
X-3424

X. 1973

N 11

*4 - 1333

F₂

X1-3409

1973

hominy
kryline

71682r Ab-initio calculations of the fluorine molecule. Kasseckert, E. (Int. Theor. Phys., Justus-Liebig-Univ., Giessen, Ger.). *Z. Naturforsch., Teil A* 1973, 28(5), 704-8 (Ger). For the ground state and the lower lying excited states of F₂, valence bond-configuration interaction (CI) calcs. with Slater-type orbitals and SCF-CI calcs. with contracted Gauss-Lobe functions were carried out. The SCF-CI method yielded a fairly good description of the ground state. From the potential curves of some higher excited states, the exptl. obsd. orange band systems were assigned to the transitions $^1\Sigma_g^- \rightarrow ^1\Pi_u$ and $^1\Sigma_u^+ \rightarrow ^1\Pi_g$.

4-4-1333

C.A. 1973, 43N12

40219.7572

TE, Ph, Ch

F₂

40892

1973

1802

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

(англ.)

0047 ББК

030 032

010

ВИНИТИ

40222.1940

Ph, TE, Ch

F₂

34469
эксп. свдз

1973

N 1992

Kulkarni K.S., Sarma C.R., Murthy J.S.

Semi-empirical evaluation of single bond energies of some polyatomic molecules.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1973,
11, N 6, 431-432 (англ.)

0050 ИИИ

038 038

0060 ИИИИИИИИ

F₂

Omniucci 1580

1973

Mulliken R.S., Garza G.T.

Spectroscopic methods in molecules.

"J. Phys. Chem. and Mol. Phys.",

1973, 6, 111, 177-2303.

me, m
ch, yu

F₂

Kushawana V. S.

1973

аномалии
поведения

"Indian J. Pure and
Appl. Phys"

1973, 11, N1, 63-66.

(see. F; III)

$\text{Li}_2; \text{B}_2; \text{C}_2; \text{N}_2; \text{F}_2; \text{O}_2; \text{BN}; \text{BO};$
 $\text{BF}; \text{CN}; \text{CO}; \text{NO}; \text{LiF}; \text{BeO}; \text{BeF}$
 $\text{IX 4402 Náchay - Szabo G.,}$

(M.H., E.D.) 1973
расчёт
основного
состояния

Int. J. Quant. Chem., 1973, 7, N3, 569-581
(англ.)

Decoupled Hartree - Fock methods.
II. Calculation of the potential
curves of diatomic molecules.

Рис. XIII. 1974, 4524
14
10
орбит
2936

on mca 1740

1973

F₂

(u.n.)

1741-18

C.A. 1974. 80. N14

✓76100e Vibrational spectra of solid fluorine. Niemczyk, T. M.; Getty, R. R.; Leroi, G. E. (Dep. Chem., Michigan State Univ., East Lansing, Mich.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59-(10), 5600-4 (Eng). Raman and far-ir spectra of cryst. F₂ were obtained in both solid phases. As expected for the disordered higher temp. form, only the Raman-active stretching fundamental was obsd. for β -F₂. Near $\sim 20^\circ\text{K}$, α -F₂ exhibits the following spectral features (in cm^{-1}): Raman $\nu(1-0)$ 985; $\nu(2-0)$ 1764; $\nu(\text{libration})$ 44, 55, 77, (93?); ir $\nu(\text{translation})$ 28, 42.5, 80. The predictions of a preliminary calcn. of the optically active lattice frequencies for the low temp. phase are in poor agreement with the obsd. lattice frequencies, suggesting that an improved model will be required to help distinguish the correct α -F₂ crystal structure. Solid F₂ more closely resembles O than it does the other halogens. In particular, the intermol. forces are extremely weak, as exemplified by the small shifts of the internal frequencies from their gas phase values, the absence of observable factor group splitting of the fundamental and the overtone, and the relatively low values of the external (lattice) frequencies.

F₂ (76)

1973

U.K. U

Raman
crystal

130996w Vibrational spectra of solid fluorine. Niemczyk, T. M.; Getty, R. R.; Leroi, G. E. (Dep. Chem., Michigan State Univ., East Lansing, Mich.). *U.S. Nat. Tech. Inform. Serv., AD Rep.* 1973, No. 763686, 22 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Govt. Rep. Announce. (U.S.)* 1973, 73(17), 60. Raman and far -ir spectra of cryst. F₂ were obtained in both solid phases. As expected for the disordered higher temp. form, only the Raman-active stretching fundamental was obsd. for β -F₂. The predictions of a preliminary calcn. of the optically active lattice frequencies for the low-temp. phase are in poor agreement with the obsd. lattice frequencies, suggesting that an improved model will be required to help distinguish the correct α -F₂ crystal structure. Solid F₂ more closely resembles O₂ than it does the other halogens. In particular, the intermol. forces are extremely weak, as exemplified by the small shifts of the internal frequencies from their gas phase values, the absence of observable factor group splitting of the fundamental, and the overtone, and the relatively low values of the external (lattice) frequencies.

CA1973

79, 22

$\text{Cl}_2; \text{F}_2; \text{Br}_2; \text{I}_2$ (м.н., До, pacиm) 1973

XI 4091
Sannigrahi A.B., Mohammad S.N.,

Int. J. Quant. Chem., 1973, 7, 1183
- 1192 (англ.)

Selected valence electron split-shell molecular orbital calculations on the diatomic interhalogen molecules.

Bre Pur, 1974, 100209

11

⑨

IX-4778

1973

beO, F₂, O₂ (passer max. wester.)

Sinabungla O,

J. Molec. Structure, 1973, 12, v1,
81-91

10

F₂

1973

Sinanoglu Oksay, Faruk H. Oksay

"J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, 117, 5435-5442.

эксперимент
связи

(см. ВН; III)

3 Б28. Расчет молекул F_2 , Cl_2 , Br_2 , J_2 в приближении ЧПДП с параметрами Деба и Коулсона. Spruiling Thomas H., Snook Ian K. INDO calculations on F_2 , Cl_2 , Br_2 and J_2 using the Deb-Coulson parameters. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1973, Part 2, 69, № 8, 1183—1186 (англ.)

Проведен расчет молекул галогенов методом ССП МО, ЛКАО в приближении ЧПДП с использованием параметров Деба и Коулсона (см. РЖХим, 1971, 21Б30).
Найдено, что изменение полной энергии, орбитальных энергий, энергий переходов и межъядерных расстояний в ряду молекул галогенов находится в хорошем соответствии с эксперим. данными. Показано, что значения матричных элементов гамильтониана, определяемые параметрами Деба и Коулсона, лучше согласуются со значениями соотв-щих величин, полученных из неэмпирич. расчетов, чем параметры, определенные на основе схемы Попла. Высказано мнение, что полученные ранее в рамках исследуемой схемы неудовлетворительные результаты при расчете молекул галогенов были вызваны ошибками расчета параметров гамильтониана, что подтверждено сравнением рассчитанных значений одноцентровых интегралов с данными цитированной работы Деба и Коулсона.

В. И. Пупышев

1973

оттиски 1204

6555 IX

(+3)

IX

F_2

расчет
молекулы

и.и.

Е.с.

21974

N3

F₂

1 Д120. Расчеты F₂, Cl₂, Br₂ и J₂ методом ЧПДП с параметрами Деба — Коулсона. Spurling Thomas H., Snook Ian K. INDO calculations on F₂, Cl₂, Br₂ and I₂ using the Deb—Coulson parameters. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1973, Part 2, 69, № 8, 1183—1186 (англ.)

1973

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ЧПДП с параметрами Деба — Коулсона (см. РЖХим, 1971, 21Б30) исследовано электронное строение F₂, Cl₂, Br₂ и J₂. Приведены равновесные межъядерные расстояния, силовые постоянные, орбитальные энергии, энергии переходов. Обнаружено, что полученные результаты согласуются с опытными данными (в ряде случаев согласие хорошее) и во всех случаях правильно передают тенденции в ряду галогенов. Плохое согласие для некоторых из рассмотренных молекул, обнаруженное Дебом и Коулсоном, по мнению авторов, обусловлено ошибками в их программе. Подчеркнуто, что использованная параметризация приводит к существенно лучшим результатам, чем стандартная параметризация схемы ЧПДП.

В. Л. Лебедев

XI-3599
см. м.с. 1204.

(+3)



силов.
пост.
м.т.; ϵ_i

Ф 1974 N 1

F₂

ammex 1204

1973

XI 35.99

(+) 139863h INDO [Intermediate neglect of differential overlap] calculations on fluorine, chlorine, bromine, and iodine using the Deb-Coulson parameters. Spurling, Thomas H.; Snook, Ian K. (Div. Appl. Chem., CSIRO, Melbourne, Aust.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1973, 69(Pt. 8), 1183-6 (Eng). Intermediate neglect of differential overlap calcs. of mol. properties of F₂, Cl₂, Br₂, and I₂ using the parameters suggested by B. M. Deb and C. A. Coulson (1971) followed exptl. trends more closely than in the original publication.

M.N.

pacem

CA 1973

79/24

(+3) ☒

F₂ (203)

(u. n.)

Struck 1469

1973

XI 3942

89176j Laser-excited Raman spectrum of gaseous fluorine. Stricker, W.; Hochenbleicher, J. G. (DFVLR-Inst. Reaktionskinet., Stuttgart, Ger.). *Z. Naturforsch., Teil A* 1973, 28(1), 27-30 (Ger). The pure rotational and the rotation-vibrational Raman spectra of F(g) at pressure 2 atm were recorded photoelec. The vibrational transitions $0 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 2$, and $0 \rightarrow 2$ were obsd. The anal. of the spectra yielded the fundamental vibration quantum $\Delta G_{1,2}$ (893.5 ± 1.5) cm^{-1} , the rotational consts. B_0 , D_0 , and B_1 (0.8847 ± 0.0010), (0.49 ± 0.10) $\times 10^{-5}$, and (0.872 ± 0.002) cm^{-1} , and the anharmonicity const. $\omega_e x_e$ (11.8 ± 1) cm^{-1} .

C. A. 1974.80 N16

F₂спектр 3/6/2
X1

8 Б202. Возбужденный лазером спектр комбинационного рассеяния газообразного фтора. Stricker W., Höchenbleicher J. G. Das lasererregte Raman-Spektrum von gasförmigem Fluor. «Z. Naturforsch.», 1973, 28a, № 1, 27—30 (нем.; рез. англ.)

Получен чисто вращательный и колебательно-вращательный спектр КР ($\lambda_{\text{возб}} 5145\text{Å}$) газообразного F₂ при давлении ~ 2 атм. Наряду с колебательным переходом $0 \rightarrow 1$ наблюдали также «горячий» переход $1 \rightarrow 2$ и обертон $0 \rightarrow 2$; определено положение максимумов Q-ветвей. Рассчитаны вращательные постоянные (см^{-1}) для основного и колебательно-возбужденного состояний и константа ангармоничности: $B_0 = (0,8847 \pm 0,0010)$, $D_0 = (0,49 \pm 0,10) \cdot 10^{-5}$, $\Delta G_{1/2} = (893,5 \pm 1,5)$, $\omega_e = (917,1 \pm 3,5)$, $\omega_e x_e = (11,8 \pm 1)$, $B_1 = (0,872 \pm 0,002)$. Наблюдается небольшое расхождение, в частности для величины $\Delta G_{1/2}$ между результатами настоящей работы и лит. данными.

А. Бобров

1973

список 1469

X. 1974 № 8

F₂

оттиски 1469

1973

5 Д349. Спектры комбинационного рассеяния газообразного фтора при лазерном возбуждении. Stricker W., Hochenbleicher J. G. Das lasererregte Raman-Spektrum von gasförmigem Fluor. «Z. Naturforsch.», 1973, 28a, № 1, 27—30 (нем.; рез. англ.)

Изучены чисто вращательные и вращательно-колебательные спектры комб. рас. газообразного фтора при

давлении 2 атм. На основании полученных данных вычислены молекулярные постоянные. Библ. 5.

м.п.

XI-3942

ф. 1974 № 5

1973

F₂

15 B1191. Диссоциация фтора электронным пучком. Wilson Jack, Chen Hao-Lin, Fyfe Walter, Taylor Raymond L., Little Roger, Lowell Robert. Electron beam dissociation of fluorine. «J. Appl. Phys.», 1973, 44, № 12, 5447—5454 (англ.)

диссоциация

Изучали образование атомов F в газовых смесях F₂ с He, CO₂ и HCl различного состава при давл. 1 атм при облучении импульсами электронов с энергией 20—140 кэВ длительностью 250 нсек при плотности тока 100—600 а/см². За конц-ией атомов F следили по интенсивности поглощения HF, образующегося в быстрой р-ции $F + HCl \rightarrow HF + Cl$. В кач-ве источника света использован хим. лазер на HF. Найдено, что при каждом столкновении электрона с молекулой образуется 3 атома F, что соответствует расходу энергии ~12 эВ на каждый образующийся атом F. Таким образом, электронный пучок может использоваться для инициирования хим. лазеров на HF. Обсуждаются возможные процессы, приводящие к диссоциации F₂.

В. Е. Скурат

X. 1974

N 75

247

40522.7339
Ch, Ph, TE

F₂ ^{XI-4092}
-наерий 0604 02
основного состояния

1973

*4-5000

К р. N 40522.7299

Weinberger Peter, Knowalow Daniel D.

A study of the ground states of N₂, O₂,
and F₂ and their ESCA spectra by
the multiple scattering X α method.

"Int.J.Quant.Chem.Symp.", 1973, N 7, 353-367
(англ.)

088 095 107 0115 ЕСК | ВИННИТИ

см. N₂, III

расчет м.п., & (CO, F₂, O₂, NH₃) 1973

Whitten J.L., XI 3609

Accounts Chem. Res, 1973, 6, 17, 238-245
(англ.)

Ab initio studies of molecules and
concepts of molecular structure.

Рукхин, 1974, 2541

10

10

CP

Вор - 1-X A-270 1974

F₂

23 Б23. Описание двухатомных молекул с использованием одно-электронных конфигурационных энергий с двухчастичным взаимодействием. Anderson Alfred B., Hoffmann Roald. Description of diatomic molecules using one electron configuration energies with two-body interactions. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 11, 4271—4273 (англ.)

Полная энергия двухатомной молекулы АВ представлена в виде $W(R) = W^{(1)}(R) + D^{(2)}(R)$, где $W(R)$ обозначает суммы электростатич. энергии взаимодействия ядра А с нейтр. атомом В и энергии перераспределения электронной плотности при образовании молекулы. Последняя идентифицируется со связывающей компонентной энергии и определяется в рамках расширенного метода Хюккеля как сумма одноэлектронных энер-

расчет
потенц.
кривых

см. LiF; ~~107~~

(+9) ☒

x.1974. N23

гий. Для ряда молекул рассчитаны потенциальные кривые с использованием упомянутого приближения. Во всех случаях первая составляющая является отталкивающей, а вторая ответственна за притяжение. При расчете гомоядерных молекул F_2 и Cl_2 полученные потенциальные кривые лежат ниже экспериментальных, но имеют близкую форму. В случае молекул LiF , $NaCl$, BE , SiO и $AlCl$ расчетные кривые лежат выше экспериментальных. Проведен также расчет потенциальных кривых молекул C_2 , ацетилена и этилена. Обсуждается возможность расширения метода расчета на более сложные системы.

А. Дементьев

1974

 F_2 (ne)

9 Д442. Анализ контуров полос комбинационного
рассеяния жидкого фтора. Barral Jean-Claude,
 Hartmannschen Olivier, Rigny Paul. Raman
 bandshape analysis in liquid fluorine. «Chem. Phys.
 Lett.», 1974, 26, № 1, 79—81 (англ.)

спектр

Получены спектры комб. рас. жидкого фтора при
 т-рах 75—110° К в области основного тона F_2 . Ширина
 поляризованной компоненты $\sim 0,9$ см⁻¹. Асимметрия,
 ширина и частота компоненты немного увеличиваются с
 понижением т-ры, указывая на усиление специфич. вза-
 имодействий. По температурным изменениям ширины
 деполяризованной компоненты определена зависимость
 времени ориентационной релаксации т-ры. Изменение
 характера этой зависимости при 85° К указывает на
 перестройку структуры жидкого фтора в этой точке.
 Определена энергия активации переориентации
 $\sim 0,3$ ккал/моль. Дана картина поворотного движения
 молекул F_2 в жидкости. Библ. 9. М. В. Тонков

ф. 1974. № 9

1974

F_2

0530p

(20)

137245e Dissociation energy of fluorine. Berkowitz, J.; Wahl, Arnold C. (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *Advan. Fluorine Chem.* 1973, 7, 147-74 (Eng). A review with 75 refs. is given on exptl. and theor. detns. of the dissocn. energy of the F_2 mol. E. R. Kurginski

C.A. 1974. 80. N24.

$H_2; F_2; N_2; O_2; HF; LiH; OH^-$ / ал. кс., 1974
 $CO; BN; BF; LiF; CH_4; C_2H_6$ / те. / 8812
расчет.

Caralp L, Cavalier J.C.,

J. Mol. Struct., 1974, 23, N1, 153-160
(англ.)

Determination de geometries
d'equilibre et des constantes de forces
par une methode de type CNDO.
10

41018.6813

Ph, Ch, TC

F₂X-8812
96615

02

1974

2593

Caralp Louis, Cavalier Jean-Claude.

Détermination des géométries d'équilibre
et des constantes de forces par une
méthode de type CNDO. "J. Mol. Struct.",
1974, 23, N 1, 153-160

(англ.)

0215 пик

186 187 0207

ВИНИТИ

4 0510.8701

TE, Ch

40771

F₂

02

1974

2113

(cur. Xe-F)
Carroll T.X., Shaw R.W., Jr, Thomas T.D.,
Kindle C., Bartlett N.

Electron distribution in the xenon fluo-
rides and xenon oxide tetrafluoride by
ESCA and evidence for "Orbital
Independence" in the xenon-fluorine
bonding.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 7,
1989-1996 (англ.)

0100 0001

085 086

003

ВНИТИ

F₂

Энергия
связи

ф. 1974
N 10

10 Д211. Распределение электронной плотности в CIF, определенное по энергиям связи остовных электронов. Carroll T. X., Thomas T. D. Charge distribution in CIF from core-electron binding energies. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 5, 2186—2187 (англ.)

С помощью рентгеноэлектронной спектроскопии измерены энергии связи остовных электронов в F₂ (I), CIF (II) и Cl₂ (III). Обнаружено, что в II остовные 1s-электроны атома F связаны на $2,16 \pm 0,05$ эв менее прочно, чем в I, а остовные 2s-электроны атомов Cl в III — на $0,57 \pm 0,15$ эв менее прочно, чем в II, что привело авторов к выводу, что Cl в II заряжен положительно. По эмпирич. соотношению между величинами сдвигов указанных энергий связи, межатомными расстояниями и зарядами величины зарядов оценены в 0,05—0,15. Хотя найденная полярность противоположна по знаку полученной из дипольного момента, измеренного с помощью эффекта Зеемана, отмечено, что это несогласие может быть обусловлено тем фактором, что сдвиги энергий связи наиболее чувствительны к распределению электронной плотности вблизи атомных центров, а дипольный момент — к таковому на периферии молекулы.

В. Л. Лебедев.

1974

(+2)

☒

XI 4076

1974

F₂

N₂

(7)

Ф. 1974

N 10

10 Д208. Простое объяснение невыполнения теоремы Купманса для F₂ и N₂. Cederbaum L. S. A simple explanation of the breakdown of Koopmans' theorem for F₂ and N₂. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 4, 562—563 (англ.)

Отмечается, что наблюдаемый на опыте порядок роста ионизац. потенциалов валентных электронов (1 π_g , 1 π_u , 3 σ_g) в F₂ не согласуется с теоремой Купманса (1 π_g , 3 σ_g , 1 π_u); аналогично, эксперим. последовательность роста потенциалов ионизации (3 σ_g , 1 π_u , 2 σ_u) в N₂ также противоречит предсказаниям теоремы Купманса (1 π_u , 3 σ_g , 2 σ_u). Показано, что расчет поправки к «вертикальному» потенциалу ионизации, соответствующему теореме Купманса, выполненный во втором порядке теории возмущений по энергии, приводит к согласию с экспериментом для последовательностей потенциалов ионизации обеих молекул.

Т. К. Ребане

(41)

F_2

N_2

(y)

XI-4076

1974

29864 Simple explanation of the breakdown of Koopmans' theorem for fluorine and nitrogen molecules. Cederbaum, L. S. (Phys. Dep., Tech. Univ. Muenchen, Garching/Munich, Ger.). *Chem. Phys. Lett.*, 1974, 25(4), 562-3 (Eng). A simple symmetry consideration explains why the Koopmans theorem fails to explain the assignment of the ionization potentials of F_2 and N_2 (C., et al., 1973).

(+1)

C.A. 1974. 81. N4

F₂

Chong D. P., et al.

1974.

(7)

*us-7695

J. Chem. Phys., 1974, 61,
3567-70.

● (corr. HCl; III)

F₂

Douglas A. d.

1974

коибат.
вразам.
спектр.

"Chem Spectroscopy and
Photochem Vacuum-Ultra-
violet" Dordrecht-Boston,
1974, 113-128 (англ)

(англ; III)

sumner 3995 1974

F₂

(Aē)

Harland P. W.
Franklin L. L.

Y. Chem. Phys.
1974, 61 25, 1621-35

F₂

Hirshfeld F. L.
et al.

1974.

расцен
малень

Mol. Phys. 1974, 27
N 5, 931'9 - 43' —

Электростатическое связы-
вание в 2х ат. молек. галл.

II периода.

● АН и А₂

(см. LiH; III)

I_2

спектр
в макс.

Howard Wilmont F, 1974
Fr, Andrews Yester.

"J. Raman Spectrosc" 1974,
2, N5, 447-462 (a.u.)

(cm I_2 ; $\overline{III}$)

1974

 F_2 H_2 Cl_2

квадруп.

момент

97107y Molecular polarizability estimates for vibrational spectral interpretation. Jao, T. C.; Beebe, N. H. F.; Person, W. B.; Sabin, J. R. (Dep. Chem., Univ. Florida, Gainesville, Fla.). *Chem. Phys. Lett.* 1974, 26(4), 474-8 (Eng). A scheme is outlined for obtaining ests. of mol. polarizabilities, quadrupole moments, and their derivs. from restricted Hartree-Fock calcs. Results are presented for H_2 , F_2 and Cl_2 , and are compared with expt. The results are lower limits to these quantities and are expected to be of use in the interpretation of Raman and of collision-induced ir absorption spectra.

(72)



C.A. 1974. 81. N16

F₂

* 3-7643-

XI 4276

1974

✓ 36748g Excited states of the fluorine molecule. Kasseckert, E.; Wirsam, B. (Inst. Theor. Phys., Justus-Liebig-Univ. Giessen, Giessen, Ger.). *Z. Naturforsch., Teil A* 1974, 29(10), 1425-30

(Ger). The lower-lying excited states of F₂ were calcd. by 3s and 3p at. orbitals. The calens. lead to mol. levels changing for large nuclear distances into the correct states of the sep. atoms. From the potential curves of some higher excited stable states it was concluded that the exptl. obsd. orange band system may belong to the 2 transitions ${}^1\Sigma_g^+ - {}^1\Pi_u$ and ${}^1\Sigma_u^- - {}^1\Pi_g$.

М. П.

кв. сек.

факт

C.A. 1975, 22, 16

40508.6013

TE, Ph, Ch

40892 02

1979

F₂ IX 4635

2118

k p.N 40508.6012

Lie George C., Clementi Enrico.

Study of the electronic structure of
molecules. XXII. Correlation energy
corrections as a functional of the
Hartree-Fock type density and см. прод.

086 087 098

0100 4111 ВИНТИ

40508.6013

40892

12

TE, Ph, Ch

прод.

its application to the homonuclear diatomic molecules of the second row atoms.

"J.Chem.Phys.", 1974, 60, N4, 1288-1296

(англ.)

0106 экз 1

ВИНИТИ

086

087-098

F₂

ommuek 3005

1974

Mc Creery J.H., Hall G.G.

" J. Amer. Chem. Soc."
1974, 96, (26), 7875-78.

packem megrue

C_2 ; N_2 ; F_2 ; CO ; BF (и. н., pacem) 1974

Peel J. B., VI 4/75
Austral. J. Chem., 1974, 27, N5, 923-931
(англ.)

Non-empirical valence electron
molecular orbital calculations.
The NEVE method for first-row
diatomic molecules.

Bye Liu, 1975, 1516

10

(9)

LiH, BH, FH, Be₂, Li₂, $\bar{X}$ -9249 1974.
C₂, F₂, CO, CH₄, C₂H₂
(кв. мех. расчет) 10, 11, 14, 15²

Терезовских В.И., Трубецкой Л.А.

Ис. структур. химии, 1974,
15(5), 958-60.

Программа ABINITO расчета
электронной структуры молекул и
кристаллов (взятая из архива)
с 1975 г. 82 и 2. 7803 и. 10 (Ф) 15

T_2

1974

отр. заряды
на атоме
в молекуле

Roby Holth D.
"Col. Phys.", 1974,
27, (1), 81-104

(см T_2 ; III)

F₂

*13-8000

XI-4586 1974

Cl₂

Br₂

I₂

(u.n.)

✓ 36741z Systematics of Feshbach resonances in the molecular halogens. Spence, David (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *Phys. Rev. A* 1974, 10(4), 1045-52 (Eng). Using an electron transmission spectrometer the energetically lowest-lying Feshbach resonances in the mol. halogens F₂, Cl₂, Br₂, and I₂ are located. These resonances are assocd. with Rydberg states and have symmetry $(X^2\Pi_g)(n\sigma)^2 [^2\Pi_{1/2,3/2}]$, where $n = 3, 4, 5$, and 6 for F₂, Cl₂, Br₂, and I₂, resp. The binding energy of the lowest pair of $n\sigma$ electrons to the ground-state pos. ion core decreases monotonically as the size of the mols. increases from 4.45 ± 0.05 eV in F to 3.57 ± 0.05 eV in I. A simple qual. theor. argument, based on an at. model, satisfactorily describes the decrease in the binding energy.

(+3) IX

C.A. 1975, 22, 116

*3 - 8000

1974

5 Д525. Систематика фешбаховских резонансов в молекулярных галогенах. Spence David. Systematics of Feshbach resonances in the molecular halogens. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1974, 10, № 4, 1045—1052 (англ.)

Для обнаружения и изучения фешбаховских резонансов в области малых энергий в молекулярных галогенах использована техника скрещенных молекулярного и электронного пучков; взаимодействие регистрировалось по проходящей компоненте модулированного электронного пучка. Показано, что резонансы обусловлены ридберговскими состояниями, образующими состояния отрицательного молекулярного иона симметрии $(ns\sigma)^2[{}^2\Pi_{1/2,3/2}]$ с $n=3, 4, 5$ и 6 соответственно для F_2 , Cl_2 , Br_2 и I_2 . С увеличением размера молекул энергия связи нижней пары электронов $ns\sigma$ относительно основного состояния молекулярного иона уменьшается от $4,45 \pm 0,05$ эв (F_2) до $3,57 \pm 0,05$ эв (I_2). Для объяснения вариации энергии связи привлечены теоретич. результаты, полученные на упрощенной атомной модели.

Библ. 24.

В. А.

F_2

Cl_2, Br_2

I_2

Энергия
связи

ф. 1975
N 5

9856-4586

XI

(43)

☑

HF, HCl, HBr, HI, H₂, F₂, Cl₂, Br₂, ¹⁹⁷⁴XI 4072
I₂, FCl, FBr, FI, ClBr, ClI, BrI (2e, 80, I).

Straub P.A., McLean A.D.,

Theor. Chim. acta, 1974, 32 (3),

227-42.

Electronic structure of linear halogen
compounds. I. Diatomic halides, inter-
halogens, and halogen hydrides.

C.A. 1974. 80. N22. 1262194. 10

⊕

1974

FH

197

Accoly C.S.R. et al

J. Phys. B: Atoms and
Mol. Phys., 1975, 8,
N18, 2987-94.

(kb. acc
increas
in. curvatur.)

(cell 13M) III

XI-640
60109.1304

Ch. Ph. TC

Кв. мех. расч.
40892 F₂
геометр. изм.

1975

X-45-11170

Ahlrichs R., Lischka H., Zurawski B.,
Kutzelnigg W. PNO-CI(pair-natural-orbital
configuration interaction)and CEPA-PNO
(coupled electron pair approximation with
pair natural orbitals)calculations of
molecular systems. IV. The molecules
 N_2 , F_2 , C_2H_2 , C_2H_4 , and C_2H_6 .

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N11, 4685-4694

(англ.)

1975

 F_2 расчет
потенц.
кривой

15 Б23. Вывод расширенного метода Хюккеля с поправками. Одноэлектронная теория молекулярных орбиталей для [расчета] энергетических уровней и структурных определений. Anderson Alfred B. Derivation of the extended Hückel method with corrections: one electron molecular orbital theory for energy level and structure determinations. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 3, 1187—1188 (англ.)

Предложена модификация расширенного метода Хюккеля путем включения в матричные элементы членов, учитывающих несвязанные взаимодействия. Сообщается об успешном применении метода к расчету потенциальной кривой молекулы F_2 и геометрии формальдегида.

А. Багатурьянц

Х. 1975 № 15



⊕

 H_2CO (геометрия)

F₂

Bader R. F. W.

1975

Кв. мех.
расчет

"J. Amer Chem Soc"

1975, 97, N 26, 7391-7399

(англ)

(см LiH; 114)

F₂

common 3725

1975

84: 81997q Change in the absorption spectrum of molecular fluorine in the 300-1000°K temperature range. Batovskii, O. M.; Gur'ev, V. I. (USSR). Zh. Prikl. Spektrosk. 1975, 23(6), 1092-4 (Russ). The relative variation of the absorption coeff. was detd. between 240 and 400 nm at 360, 500, and 690°K during the reaction of F₂ with O₂. At 326 nm, the absorption coeff. of F₂ is independent from the temp. ... G. Thiot

one temp.
no change.

C. A. 1976-84 WID

papers 7 (H_2O , H_2CO , N_2 , HF , CO , 1975
 F_2) XI-4559

Biskupič S., Valko L., Kvasnička V.,
Theor. chim. acta, 1975, 38, 149-
11,13,146 157 (aun),
Application of one-particle Green
functions technique for calculations of
vertical ionization potentials of closed-
shell molecules described by CDNO/2
semiempirical ha- (molecular orbital)
10

50411.3750
Ph, Ch, MGU

30063

F₂

4975

3164

Cederbaum L.S.

One-body Green's function for atoms and molecules: theory and application.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.",
1975; 8, N 2, 290-303 (англ.)

034.1 пик

312 316 03 3 3

ВИНИТИ

50324.9091

96201

1975

Ph, Ch, TC

F₂

4-8333

Clark David T., Muller Jiri.

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

(англ.) 0324 пик

307 307 0316

ВИНИТИ

F₂

*4-9503

1975

Coccon J. A.

Do; M.N.

Chem. Phys. Lett,
1975, 33 n1, 136-140.

1975

F₂

8 Б22. Метод псевдопотенциалов и эффективных потенциалов в теории самосогласованного поля и его приложения для соединений тяжелых элементов. Ewig Carl S., Van Wazer John R. On pseudopotential and effective—potential SCF theory and its application to compounds of heavy elements. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 9, 4035, 4041 (англ.)

расчет
Э. строение

Исследована возможность использования атомного псевдопотенциала типа Филипса—Клеймана (Phys. Rev., 1959, 116, 287) для расчета электронного строения атомов и молекул методом МО ЛКАО ССП в валентном приближении. Проведен расчет длин связи, колебательных частот и вертикальных ионизационных потенциалов двухатомных молекул галогенов и интергалогенов F₂, FCl, FBr, FJ, Cl₂, ClBr, ClJ, Br₂, BrJ, J₂ в миним. базисе сгруппированных гауссовых АО с использованием атомного эффективного потенциала, включающего в себя проектор на остовные функции и модельный потенциал электростатич. взаимодействия остовных и валентных электронов. Параметры модельного потенциала выбраны так, чтобы воспроизвести энергии валентных

(79)



X/1976 N 8

сч. 111

АО, полученные неэмпирич. методом МО ЛКАО ССП в миним. базисе слейтеровских АО. Для системы Br_2 расчет с использованием псевдопотенциала проведен также и в двухэкспонентном базисе. Полученные результаты сопоставлены с результатами расчетов неэмпирич. методом МО ЛКАО ССП в миним. и двухэкспонентном базисах. Отмечено, что приближение «замороженного» остова дает удовлетворительное описание электронного строения рассмотренных соединений.

О. Гриценко

50807.3805
Ch, Ph, TC

40771

1975

F₂ (masses)
(E' masses)

3236

Keil Frerich, Kutzelnigg Werner.

The chemical bond in phosphoranes. Comparative ab-initio study of PH_3F_2 and the hypothetical molecules NH_3F_2 and PH_5 .

"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 97, N 13,
3623-3632

(англ.)

0428 ПБК

395 397

4 2 0

ВИНИТИ

F-7

DTT 4824

1975

Kerr J. A., et al.

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

(D.)

F₂

1975

Кислоты, образующиеся

при гидролизе, 1975, 1976

1977

О преимуществах колебательной
экспериментальной в диссертации. 24.07.1975.

(ссыл. H₂, III)

HF

1975

Kutzelnigg W.

Localiz. and Delocaliz.
Quantum Chem. Vol. 1.
D.-B. 1975, 143-53.

(weidg X-P)

(Kopelidz)
Z.H. Ec

(all BM3) III

F₂

Do, Y, KB.

Mex. parrot

Leroy G., et al

1975

Bull. Soc. Chim. Belg.,
1975, 84(11), 1105-18

all H₂O; III

F₂

Макиев Т. Н.

1975

„Докл. АН СССР“

1975, 222, N1, 151-154

спектры
поглощ
f mn

(см Kr F₂; III)

X-9160

1975

Li_2 , F_2 , HF , HF_2^- , C_2 и др.
(кв. мех. расчет)

Нижниканен А.В., Терезовников В.И.,
Грибов А.А.

М. Ирикис. спектроск., 1975, 22, 1082-1085



10

1975

 F_2 F_2^+ F_2^-

160349s Energy deposition mechanisms for electrons colliding with fluorine and fluorine mixtures. Peek, J. M. (Sandia Labs, Albuquerque, N. Mex.). Report 1974, SAND-74-0274, 39 pp. (Eng). Avail. Dep. NTIS. From *Nucl. Sci. Abstr.* 1975, 31(2), Abstr. No. 4491. The potentially important mechanisms and the available data for energy deposition by electrons colliding with targets consisting of F_2 and F_2 mixts. are reviewed. The electronic structure of the F_2^+ , F_2 , and F_2^- systems is discussed. Available electron scattering data and some new inferences based on photon scattering information are presented.

(3d. copy)

C. H. 1975, 82 x 24



(+2)



F₂

отпуск А 2948 1975

Рагуин А.А.

(м.п. До,
Т, см.пос)

В. сб. "Хищная природа"
1975, вып 2 3-61,
М, "Атомиздат".

F₂

Sambe H; et al.

1975

J. Chem. Phys.

и. н. ест. нар.
реш. ст. р. н.

1975, 62 N 3,

1122-26

(сст CO; III)

61115.1944

Ch, Ph, TC

IX-5452
F₂ 34469

1975

*4-15287

Sannigrahi A.B., Mohammad S. Noor.

Contracted basis set extended Hückel calculations on the first-row homonuclear diatomics.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1975,
13, N 12, 811-815 (англ.) 0746 лнк

(coll. Lit. III)

713 713

738

ВИНИТИ

ommuch 3838

1975

F₂

Schlegel H.B., et al.

(do)

Can J. Chem., 1975,
53, v23, 3599-601



(en. H₂; III)

299 300
50312.2406

Ch, Ph, TC, Ex-C

41197

F₂

(мерз
сблн)

1975

#4 8276

Smardzewski Richard R., Fox W.B.

An infrared study of the photolysis of
trifluoromethyl hypofluorite and hypo-
chlorite in argon matrices at 8°K.

"J. Phys. Chem.", 1975, 79, N 3, 219-222

(англ.)

0315 пик

ВИНИТИ

F_2

1975

в.сек.
пачет.

Gerner M.,
J. Chem. Phys.,
1975, 62, 17, 2788-2799.



(CuH_2 ; III)

paper un., J. chem. emp (H₂⁺, Li₂, N₂,
F₂, H₂O) BI-83 1976

Antoci S., Barino L.,

J. Chem. Phys, 1976, 65, w1, 257-260 (corr).

An asymptotically exact form of
the interesting spheres model of mo-
lecules; computation of the total energy
and the ESCA spectra of H₂⁺, Li₂, N₂, F₂
and H₂O.

Phys. 1976, 12 D 111

10

(p)

F2

1976

Arce F., et al.

An. quin. Real. Soc.

esp. fis. y quin. 1976.

F2, NG, 505-8.

(paerem
cuel. uoen)



(Cell. Diz ; III)

1976

F₂

1 Д350. Исследование температурной зависимости сплошного УФ-спектра поглощения молекулярного фтора. Батовский О. М., Гурьев В. И. «Оптика и спектроскопия», 1976, 41, № 2, 326—329

Исследована температурная зависимость $T=300-1000^\circ\text{K}$ коэф. поглощения молекулярного фтора в диапазоне длин волн 240—400 нм. С целью предотвращения химич. взаимодействия горячего фтора со стенками и окнами измерит. кюветы использована методика импульсного разогрева фтора в сильно экзотермичной фотохимич. реакции F_2 и H_2 в присутствии O_2 . Коэф. поглощения измерялся с использованием в импульсной лампе. Выполнены теоретич. расчеты температурной зависимости коэф. поглощения фтора. Сравнение результатов расчета с экспериментом показывает некоторые различия, отнесенные авторами за счет неучтенного в расчетах вращательного движения молекул. Полученные данные могут быть использованы при спектроскопич. измерениях т-ры фтора, нагретого в результате химич. реакций, или при фотолизе. Библ. 9. В. С. Иванов

у. гр. спект

Ф. 1974. №1

1976

F₂

y. op.

not a cis.

85: 169104c Study of the temperature dependence of the continuous uv absorption spectrums of molecular fluorine. Batovskii, O. M.; Gur'ev, V. I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1976, 41(2), 326-9 (Russ). The temp. dependence of the absorption spectrum (240-400 nm) of mol. F at 300-1000°K was studied exptl. and theor. A pulsed lamp with an emission duration of $\sim 0.8 \times 10^{-3}$ sec was the source. The spectrum of mol. F was calcd. for the $111_u \rightarrow 1\sigma_g^+$ transition. The rapid pulsed heating of F, as compared with a static heating of the gas in a measuring cell, excluded the interaction of heated F with the cell walls during the measurement. To F, O was added in an amt. lower by a factor of 2 than the F amt. and the mixt. was dild. with a 1:10 He:H mixt. (1.7-6.4%, relative to F). The temp. dependence of abs. changes of the spectral cross section of mol. F absorption ($\Delta\sigma\lambda$) is discussed. The calcd. and exptl. data agreed well near the absorption max. of F.

V. L. Sarova

C. A. 1976 85 u22

1976

F₂

1 Б149. Исследование температурной зависимости сплошного УФ-спектра поглощения молекулярного фтора. Батовский О. М., Гурьев В. И. «Оптика и спектроскопия», 1976, 41, № 2, 326—329

Проведено эксперим. и теор. исследование т-рной зависимости спектра поглощения молек. фтора при т-рах 300—1000° К в диапазоне 240—400 нм. В кач-ве зондирующего источника использовалась импульсная лампа. Нагрев фтора осуществляли в импульсном режиме с помощью экзотермич. р-ции его с водородом. Приводятся значения исходных молек. параметров, использованных при расчете спектрального сечения поглощения. Результаты расчета согласуются с эксперим. данными вблизи максимума поглощения (250—350 нм).

В. М. Ковба

У. гр. спектр

№ 1977 № 1

F₂

№ 4 - 14253 в архиве 1976

1 Д351. Электронный спектр F₂. Colbourn E. A., Dagenais M., Douglas A. E., Raymonda J. W. The electronic spectrum of F₂. «Can. J. Phys.», 1976, 54, № 13, 1343—1359 (англ.; рез. франц.)

Спектрограммы поглощения и испускания молекулярного фтора получены фотографически при разрешении, достаточном для вращательного анализа большинства полос (обратная дисперсия 0,24 и 0,18 Å/мм). Для большого числа колебательных уровней трех ионных состояний фтора, наблюдающихся в спектре поглощения (780—1020 Å), определены вращательные постоянные. Проанализированы возмущения вращательной структуры, обусловленные взаимодействием этих состояний, и определены энергии взаимодействия. Выполнен анализ колебательной и вращательной структуры нескольких

Электр.
спектр

оттиски 7634

в архиве
№ 4 - 14253

Ф. 1977 № 1

ридберговских переходов, однако серии Ридберга не идентифицированы. Обсуждены трудности отнесения наблюдаемых состояний. В спектре испускания в области 1100 Å обнаружена система полос перехода $1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$. Анализ полос этой системы позволил определить значения термов и вращательные постоянные всех колебательных уровней основного электронного состояния молекулы F_2 до $v=22$, включительно. Для энергии диссоциации основного состояния F_2 получено значение $D_0(F_2) = 12920 \pm 50 \text{ см}^{-1}$. Библ. 24. В. С. Иванов

F₂

~~85-114028a~~ Ottawa 7634 1976

85: 114028a The electronic spectrum of molecular fluorine. Colbourn, E. A.; Dagenais, M.; Douglas, A. E.; Raymond, J. W. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Coun. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Phys.* 1976, 54(13), 1343-59 (Engl.). The absorption spectrum of F₂ in the 780-1020 Å range was photographed at sufficient resolu. to allow a rotational anal. of many bands. A large no. of vibrational levels of 3 ionic states were obsd. and their rotational consts. detd. Many perturbations in the rotational structure caused by the interaction between the 3 states were investigated and the interaction energies detd. The rotational and vibrational structures of a few Rydberg states were also analyzed in detail, but no Rydberg series were identified. The difficulties in assigning the obsd. states are discussed. The A ¹Σ_u⁺-X ¹Σ_g⁺ emission band system was obsd. at 1100 Å. An anal. of the bands of this system has allowed detg. the term values and rotational consts. of all the vibrational levels of the ground state with v ≤ 22. The dissoen. energy, D₀(F₂), is >12,830 and is estd. to be 12,920 ± 50 cm⁻¹.

(min, 80)

85-14252
E. Herzberg

C. A. 1976, 85 N16

* 13 - 16508

1976

F₂

2 Д320. Электронные состояния молекулы фтора с широкой внешней орбиталью. Demoulin D., Jungen M. Expanded electronic states of the fluorine molecule. «Chem. Phys.», 1976, 16, № 3, 311—318 (англ.)

Потенц. кривые возбужденных состояний молекулы F₂ с широкой внешней орбиталью рассчитаны с помощью модифицированного метода замороженного остова. Ионный остов описывался двухтерминантной волн. ф-цией, а возбужденные состояния — смесью конфигураций с различными остовами. Исследованы валентные состояния молекулы. Потенц. кривые рассчитаны для однократно и дважды возбужденных состояний V симметрии ${}^1\Sigma_u^+$. Предсказаны низколежащие двухконфигурационные состояния, являющиеся результатом одновременного возбуждения валентной и ридберговской орбиталей. Библ. 31.

(M, n; E)

Р. 1977. N2

F₂

#4 - 16508

1976

nomerus.
Kfubree

85:168987F Expanded electronic states of the fluorine molecule. Demoulin, D.; Jungen, M. (Phys.-Chem. Inst., Univ. Basel, Basel, Switz.). *Chem. Phys.* 1976, 16(3), 311-18 (Eng). Potential curves of electronically excited states of F₂ with an expanded outer orbital were calcd. using a modified frozen core technique: the ionic core was described with a 2 determinant wave function and for the excited states a mixing of configurations with different cores was employed. An investigation of the valence shell states of F₂ is presented and potential curves for a singly excited as well as a doubly excited V-state of Σ^+ symmetry was calcd. Further, a low lying 2-configuration state resulting from simultaneous excitation to a valence and a Rydberg orbital is predicted.

C.A. 1976 85 N 22

F₂

1976

Douady J; et al.

recepteur. Bull. Soc. chim. Belg.
circuit. 1976, 85 (12), 1009-1012

(see. CH₄; III)

F₂

1976

Durand Ph., et al.

Localiz. and. Delocaliz.

Quant. Chem. Vol. 2.

D-B. 1976, 91-124.

(reused)
(not used)

(all H₂O; III)

1976

 F_2 F_2^+

4 Б21. Диффузные электронные состояния молекулы фтора. Demoulin D., Qungen M. Expanded electronic states of the fluorine molecule. «Chem. Phys.», 1976, 16, № 3, 311—318 (англ.)

В приближении двухконфигурац. метода ССП Даса, и Уола для основного состояния молекулы F_2 получены волновая функция, энергия диссоциации (0,73 эв) и равновесное межъядерное расстояние (2,85 ат. ед). Базис включал сгруппированные гауссовы функции (5s3p1d). На основе теоремы Кушменса построены две потенциальные кривые иона F_2^+ , отвечающие состояниям $^2\Pi_g$ и $^2\Pi_u$. Проведен также расчет энергий ридберговских состояний F_2 в приближении конфигурац. взаимодействия. При этом одноэлектронный базис состоял из МО основного состояния F_2 и гауссовых функций с малыми экспонентами (от 0,1 до 0,0006),

min; ϵ ,
до

х. 1977. N4.

(+1) ☒

необходимых при описании различных ридберговских состояний. Аналогичным методом рассчитан ряд валентных состояний молекулы F_2 , характеризующихся диффузным характером волновой функции. Использованные при расчете конфигурации соответствовали модели замороженного остова с произвольным распределением 10 электронов среди орбиталей $3\sigma_g$, $1\pi_u$, $1\pi_g$ и $3\sigma_u$. Приведены потенциальные кривые двух валентных состояний симметрии ${}^1\Sigma_u^+$. Предсказано существование низколежащего двухконфигурац. состояния молекулы F_2 , образующегося при одновременном возбуждении электрона на валентную и ридбергову орбитали.

А. Дементьев

react Ze , O_2 (Li_2 , C_2 , N_2 , F_2 , CH_4 , C_2H_2 ,¹⁹⁷⁶
 C_2H_4 , C_2H_6 , CO , H_2O , CH_2) BX-555

Driessler F, Kutzelnigg W,

Theor. chim. acta, 1976, 43, vi, 1-27 (aug)

Analysis of the chemical bond. I The binding energy of the MO-LCAO scheme with an approximate correction for left-right correlation and its physical fragmentation.

In Guai, 1974, 14525

10

(90)

16

F₂

Вср-5127-XI

1976

12 Д322. Чисто вращательный спектр комбинационного рассеяния фтора. Edwards H. G. M., Good E. A. M., Long D. A. Pure rotational Raman spectrum of fluorine. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 5, 984—987 (англ.)

(м.н.)
Получен вращательный спектр комб. рас. ($J=0\div 25$) газообразного фтора (I) при возбуждении лазерной линией 488,0 нм мощностью 1,5 Вт и давл. паров I, равном 550 мм рт. ст. Определены вращательные константы I $B_0=0,88331\pm 0,00004$ см⁻¹, $10^6\times D_0=3,48\pm 0,06$ см⁻¹, а также значение равновесной длины связи $r_0=1,41744\pm 0,00006$ Å. Вычислены константы $B_e=0,889\pm 0,001$ см⁻¹ и $r_e=1,4131\pm 0,0008$ Å. Отмечено хорошее совпадение экспериментальных и вычисленных через B_0 и ω_0 значений D_0 в I. И. В. А.

ср 1976 N 12

F₂

BP-5127-XI

1976

85: 53963c Pure rotational Raman spectrum of fluorine. Edwards, H. G. M.; Good, E. A. M.; Long, D. A. (Sch. Chem., Univ. Bradford, Bradford, Engl.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1976, 72(5), 984-7 (Eng). The pure rotational Raman spectrum of ¹⁹F₂ was recorded photog. with a reciprocal dispersion of 1.4 cm⁻¹mm⁻¹ and analyzed to give a more precise rotational const., centrifugal distortion const., and bond length than previously obtained. $B_0 = 0.88331$ Cm⁻¹, $D_0 = 3.48$ cm⁻¹, and $r_0 = 1.41744$ Å. The value of D_0 agrees with that calcd. from B_0 and the fundamental vibrational waveno.

M, N.

L.A. 1976. 85. N8

F₂

ВФР-5127-XI

1976

23 Б154. Чисто вращательный спектр комбинационного рассеяния фтора. Edwards H. G. M., Good E. A. M., Long D. A. Pure rotational Raman spectrum of fluorine. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 5, 984—987 (англ.)

Получен чисто вращательный спектр КР (λ 4880А) газ. F_2^{19} (давл. ~ 550 мм). Спектр регистрировался фотографически на решеточном спектрографе высокого разрешения (дисперсия $\sim 1,4$ см⁻²/мм) точность определения частот составляла $\sim 0,004$ см⁻¹. В спектре наблюдались линии со значениями J от 1 до 25 (S-ветвь). Это дало возможность с высокой точностью рассчитать значения вращательных постоянных: $B_0 = 0,88331 \pm \pm 0,00004$ см⁻¹, $10^5 D_0 = 3,48 \pm 0,06$ см⁻¹, $r_0 = 1,41744 \pm \pm 0,00006$ А, $B_e = 0,889 \pm 0,001$ см⁻¹ и $r_e = 1,4131 \pm \pm 0,0008$ А. А. Бобров

X. 1976. № 23

T_2

1976

Gopinathan M. S.

кв. мех.
расчет

"J. Chem Phys" 1976, 65(1)
196-200 (eng)

(cu N_2 ; π)

F₂

1976

Guyon P.M., et al.

J. Chem. Phys., 1976,
65, 1650.

Threshold photoelectron
spectra ... ●

(New's Lett, Nov 1976)

1976

 F_2 Ar_2

5Б23. Эффект выбора базисных функций в молекулярных расчетах с использованием псевдопотенциала. Harker A. H. The effect of choice of basis set in molecular pseudopotential calculations. «Mol. Phys.», 1976, 32, № 2, 583—586 (англ.)

Методом МО ЛКАО ССП в валентном приближении с использованием атомного псевдопотенциала (АП) [J. Chem. Phys, 1975, 62, 1509] представленного в виде взвешенного проектора на основные состояния, проведен расчет электронного строения систем F_2 (для ряда значений R_{F-F}) и Ar_2 ($R_{Ar-Ar} = 5$ ат. ед.). Кулоновский и обменный потенциалы остова аппроксимированы локальным модельным потенциалом простого аналитич. вида. Веса проекторов и параметры модельного потенциала подобраны так, чтобы воспроизвести результаты атомного расчета методом МО ЛКАО ССП с учетом

Электр.
строение

Ж. 1977 № 5



(+1) X

всех электронов. Рассчитанные (в базисе сгруппированных гауссовых АО) энергии МО и энергии связи F_2 удовлетворительно согласуются с результатами полного расчета (энергии связи занижены по абс. величине на 3%). Энергия связи Ag_2 , рассчитанная в базисе $6s5p$ с соотв-щим АП отличается на 5% от энергии, полученной с учетом всех электронов. Расчет электронного строения Ag_2 проведен также в двух др. базисах, сгруппированных гауссовых АО двухэкспонентного типа с АП, параметры к-рых подобраны для базисных наборов $12s8p$ и $6s5p$, и с учетом всех электронов. Отмечено неудовлетворительное воспроизведение результатов полного расчета, что указывает на сильную зависимость параметров АП от выбранного базиса. О. Гриценко

X-8-14422

1976

1 Д116. Ридберговские, ионные и валентные взаимодействия в возбужденных состояниях F_2 . Hay P. Jeffrey, Cartwright David C. Rydberg, ionic, and valence interactions in the excited states of F_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 1, 80—83 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия проведены расчеты возбужденных состояний молекулы F_2 . Одноэлектронные ф-ции получены в многоконфигурац. приближении метода ССП. Использовался базисный набор гауссовых ф-ций ($9s5p1d$), сжатых до $[3s2p1d]$. В расчетах ридберговских состояний добавлялись диффузные ф-ции $3s$ ($\zeta=0,036$) и $3p$ ($\zeta=0,032$). Межатомные расстояния варьировались в пределах 0,9—4,0 Å. Проанализированы потенц. кривые валентных и ионных (F^+F^-) возбужденных состояний, а также состояний ридберговского типа ($3s$ и $3p$). Найдены многочисленные пересечения указанных кривых для диабатич. состояний. Рассчитаны моменты разрешенных в дипольном приближении переходов из основного состояния в низшие ридберговские.

О. Сизова

расчет
возбужд.
состояния

Р. 1877 N1

F_2

#4-14422

1976

1 Б31. Ридберговские, ионные и валентные взаимодействия в возбужденных состояниях F_2 . Hay P. Jeffrey, Cartwright David C. Rydberg, ionic, and valence interactions in the excited states of F_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 1, 80—83 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия при межъядерных расстояниях 0,9—4 А. рассчитаны термы основного и ряда возбужденных состояний молекулы F_2 . Рассмотрены синглетные состояния, коррелирующие со след. состояниями разъединенных атомов: $F(2P) + F(2p^4 3s, ^2P)$; $F(2P) + F(2p^4 3s, ^2D)$; $F(^1D) + F(^1S)$; $F(^1S) + F(^1S)$. Кривые потенциальной энергии возбужденных состояний характеризуются след. общими чертами: а) адиабатич. термы ридберговских состояний являются плоскими с широким и неглубоким минимумом близ 2 А; б) ионные адиабатич. термы при больших расстоя-

E_i, D_0
1

Х. 1977 №1

ниях отвечают притяжению (закон $1/R$); они обладают глубоким минимумом также при $2A$; в) взаимодействие между ридберговскими и ионными термами приводит к ряду псевдопересечений. Особенно сильное взаимодействие имеет место между нижними $1\Sigma_u^+$ -состояниями. Рассчитаны также дипольные моменты, зависимость которых от расстояния имеет немонотонный характер, вследствие изменения характера связи в точке пересечения адиабатич. термов. Проведено сравнение с имеющимися в лит-ре теор. и эксперим. данными о возбужденных состояниях F_2 . Рассчитанная энергия диссоциации основного состояния оказалась на 0,25 эв выше экспериментальной.

А. Зембеков



F₂

(sub. rec. received. logd.
com.)

1976

X-9-14422

85: 99480w Rydberg, ionic, and valence interactions in the excited states of molecular fluorine. Hay, P. Jeffrey; Cartwright, David C. (Los Alamos Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, N. Mex.). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 41(1), 80-3 (Eng). The excited states of F₂ were investigated as functions of

the internuclear distance in a series of CI calcs. Numerous avoided curve-crossings between valence, Rydberg (3s and 3p), and ionic (F⁺F⁻) electronic states were found. Transition moments from the ground state to the lowest dipole-allowed-Rydberg states are presented.

1976

M.H. van der, D.O., van H. (partly $H_2, N_2, O_2, CO,$
 $F_2, LiH, HF, LiF, CO, NO, CH_4, H_2O, H_2CO,$
 NH_3)

Heijser W., Kessel A-T. van,
Baerends E.J., B.I-216

Chem. Phys, 1976, 16, v.4, 371-379 (auru)

Self-constant molecular Hartree-Fock-
glater calculations. IV. One electron den-
sities, spectroscopic constants and proton
affinities of some small molecules.

Paxson, 1974, 5522

10 (P) 9 p. 10. C.C. 2

F₂

ClF

BrF

IF

ICl, IBr,
IF

XU-12815

1976

9) 81: 140902e Nonempirical valence-electron calculations on the diatomic halogens and interhalogens. Hyde, Robert G.; Peel, J. Barrie (Dep. Phys. Chem., La Trobe Univ., Bundoora, Aust.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1974, 72(3), 571-8 (Eng). The nonempirical valence-electron method for MO calcs. on heavy-atom mols. was extended to include 4th-row atoms in a min. STO basis calcn., using the approach of M. Horn and J. N. Murrell (1974). Calcd. eigenvalues, orbital energies, orbital populations, and quadrupole moments of halogens and interhalogens and dipole moments of the interhalogens agreed with those of published ab initio calcs. The Koopmans defect was significant only for F⁻ contg. mols. and the resulting orbital sequence agreed with the exptl. photoelectron spectroscopy data in all cases. Spin-orbit splittings also correlated with the obsd. values.

(+9) N

C.A. 1976 84 N20

F_2

18 Б26. Неэмпирические расчеты двухатомных молекул галогенов и интергалогенов в валентном приближении. Hyde Robert G., Peel J. Barrie. Non-empirical valence-electron calculations on the diatomic halogens and interhalogens. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 3, 571—578 (англ.)

Предложенный ранее авторами (см. РЖХим, 1975, 1Б16) неэмпирич. метод с учетом только валентных электронов (НЭВЭ) в рамках схемы МО ЛКАО СССР для молекул, содержащих многоэлектронные атомы, распространен на системы, включающие атомы 5-го периода, с использованием миним. наборов ФСТ. В рамках этого метода из атомных данных определяются атомные эффективные заряды для валентных электронов. Все молек. интегралы вычисляются точно, за исключением двухэлектронных гибридных и обменных интегралов, к-рые рассчитываются по приближенной ф-ле Рюденберга с весовыми множителями. Полученные результаты для двухатомных молекул галогенов F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 и интергалогенов ClF , BrF , $BrCl$, JF , JCl и JBr находятся в удовлетворительном соответствии с данны-

м. п.,
кв. мех.
расчет

Х. 1976, 18

1976

у* -

12815

18

(79)

ми имеющихся неэмпирич. расчетов МО ЛКАО ССП с учетом всех электронов с аналогичными базисными наборами АО. Расчеты корреляционных поправок Δ_i к потенциалам ионизации (ПИ), найденным по теореме Купменса, показали, что Δ_i наиболее велики для соединений фтора и что с учетом поправок Δ_i найденные в расчете и опытные последовательности ПИ совпадают, хотя абс. значения значительно отличаются, особенно для соединений, состоящих из атомов верхних периодов. Рассчитанные энергии спин-орбитального расщепления также удовлетворительно коррелируют с опытными значениями.

Н. М. Клименко



702 11.7205
Ch, Ph, TC, MGU

40892

F₂

1976

X 43-16667

Kahn Luis R., Baybutt Paul,
Truhlar Donald G.

Ab initio effective core potentials:
reduction of all-electron molecular
structure calculations to calculations
involving only valence electrons.

"J. Chem. Phys.", 1976, 65, N 10, 3826-3853
(англ.)

0811

ВИНИТИ

761 770 8 0 3

1976

3 д121. ЛКАО-подход к методу ССПХ α . Koller J., Zauser M., Azman A. LCAO approach to SCF-X α method. «Z. Naturforsch.», 1976, 31a, № 8, 1022—1033 (англ.)

Предложен новый вариант метода ССП Х α для расчета электронной структуры низкосимметричных молекул, не использующий разбиение пространства на области и не вводящий явочное приближение. Пробная волн. ф-ция представляется в виде линейной комбинации слэйтеровских атомных ф-ций s - и p -типа, каждая из которых в свою очередь разлагается на три гауссовых орбитали. Обменный потенциал выбран аддитивным по отношению ко вкладам отдельных ф-ций. Выполнены вычисления полных энергий, равновесных расстояний и сил Гельмана — Фейнмана для F_2 , FH , CO и N_2 . Результаты находятся в неплохом согласии как с экспериментом так и с ССП ЛКАО расчетом. «Ошибочные» силы Гельмана — Фейнмана в равновесной конфигурации в данном варианте ближе к истинному нулевому значению, чем результаты ССП ЛКАО.

И. И. Гегузин

(73)

H

I
2

FH

CO

N₂расчет
E, равнов.
расчет.
ф. 1977

N3

F₂

1946

Рамук Н. Ондор

Чим. актa турe. 1946.

4, N3, 227-6(ам),

паринс
коррал.
энергии

см. В Н - III

$H_2, LiF, N_2, B_2, HF, BH, C_2, NH, F_2$ 1976
(сил. пост; расчет) ВХ-106

Перевозчиков В.И., Грибов Л.А.,

Опт. спектроск., 1976, 41(2), 332-4.

Неэмпирический расчет силовых постоянных
двухатомных молекул методом Хартри-Фока-
Роотана с дифференциальной оценкой интегралов.



С.А. 1976, 85, N22, 1689734

Ю, рег. № - ссн

70120.8803
B,Ch,Ph,TC

40604

1976

F₂

* 45-16289

K p.N 70120.8799

Popkie Herbert E., Kaufman Joyce

J.
Molecular calculations with the MODPOT,
VRDDO, and MODPOT/VRDDO procedures. I.
HF, F₂, HCl, Cl₂, formamide, pyrrole, pyri-
dine, and nitrobenzene. (ср. МП, III)
"Int. J. Quantum Chem. Symp.", 1976, N 10,
47-57 (англ.)

750 760

0795 ПКК

ВИНИТИ

61129.3347
Ch, Ph, TC, MGU

F₂ 30526GR

1976

* 4-15543

K p.N 61129.3346
Powles J.G., Rickayzen G.

Slow-neutron scattering by molecules. II.
Vibrating homonuclear diatomic molecules.
"Mol. Phys.", 1976, 32, N 2, 323-342

(англ.)

0756 пнк

709 722

7 4 8

ВИНИТИ

4 Б22. Стабильность иона F_2^- ; модель диссоциативного прилипания. Rescigno T. N., Bender C. F. The stability of the F_2^- ion: a model for dissociative attachment. «J. Phys. B: Atom and Mol. Phys.», 1976, 9, № 11, L329—L332 (англ.)

В гауссовом базисе с учетом конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенциальные кривые молекулы F_2 и иона F_2^- в основных состояниях. Заполненные орбитали рассчитывались методом ССП, орбиталь $3\sigma_u$ — многоконфигурац. методом ССП, а не заполненные МО были взяты из расчета (РЖХим, 1973, 3Б6). Исследованы 20 различных значений межъядерного расстояния R в диапазоне $R=2-20$ ат. ед. Для энергии диссоциации и равновесного межъядерного расстояния получены значения $D=1,63$ эв, $R_e=2,72$ ат. ед. для F_2 и $D=1,22$ эв и $R_e=3,70$ ат. ед. для F_2^- соотв. Показано, что потенциальные кривые F_2 и F_2^- пересекаются при $R \approx 2,6-2,9$ ат. ед. Сделан вывод о нестабильности F_2^- при R , близких к R_e для F_2 . Рассчитан франк-кондоновский фактор перехода из состояния с нулевым квантовым числом F_2 в колебательный континуум F_2^- . Показано, что резонансное возбуждение в

1976

Уг-

15275

Уг; До,
поменял,
кривые

Х. 1977
N4

(+1)



несвязывающую часть потенциальной кривой F_2^- при
расстоянии тепловых электронов молекулами F_2 долж-
но приводить с большой вероятностью к диссоциатив-
ному прилипанию электронов к F_2 Е. Николаев



61119.8797
Ph, TC, MGU

30063
F₂

1976
4-15275

Rescigno T.N., Bender C.F., McCurdy
C.W., McKoy V.

Cross sections for the elastic scattering
of low-energy electrons by molecular flu-
orine: an approximate theoretical tre-
atment using discrete basis functions.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1976,
9, N 12, 2141-2146
(англ.)

0750 пик

7.11 727 422

ВИНИТИ

F₂

сдзр

1976

Rosenstock H. L.

Int. J. Mass. Spectrom.
and Ion Phys.

1976, 20, N 2-3.

139'-90.

(A. P. J.)

(all H₂) III

60405.1924

TC, MGU, Ch, Ph

F₂ (7)
30526

1976

x4-12259

Salahub D.R., Messmer R.P., Johnson K.H. Ionization potentials and bond lengths for CO, N₂, and F₂ using the SCF-X α -SW method: A study of the effect of overlapping spheres.

"Mol. Phys.", 1976, 31, N 2, 529-534
(англ.)

(см. CD; 14)

0593 тек

569. 572

ВИНИТИ

1976

F₂

1 Д206. Упругое рассеяние электронов на F₂.
 Schneider Barry I., Hay P. Jeffrey. Elastic
 scattering of electrons from F₂. «J. Phys. B: Atom. and
 Mol. Phys.», 1976, 9, № 6, L165—L167 (англ.)

В статическом приближении с обменом рассчитаны
 полные сечения упругого рассеяния электронов на мо-
 лекуле F₂. Использован R-матричный метод Берке,
 обобщенный недавно авторами для случая несферич.
 потенциалов (РЖФиз, 1975, 8Д254, 12Д147). При кон-
 струировании кулоновского и обменного потенциалов
 электрона в поле F₂ было использовано 2 набора орби-
 талей, полученных в результате самосогласованных
 расчетов для молекул F₂ и F₂⁻ соответственно. Резуль-
 таты показывают, что при использовании орбиталей
 остова F₂ в сечении имеется резонанс симметрии p_σ
 при энергии 1,8 эв, а при использовании орбиталей
 остова F₂⁻ резонанса нет. Отсюда сделан вывод, что
 измерение сечения упругого рассеяния e + F₂ позволит,
 в частности, установить, существует ли связанный
 ион F₂⁻.

упругое
 рассеяние

Ф. 1977. № 1

В. Г. Левин

F₂

Slavina Z.

1976

"Collect Creek Chem Commu-8"

1976, 41, N7, 1864-1874 (curr)

(curr NF₂; III)



1976

F₂

10 Д84.) Теорема Купменса и учет релаксации МО в ab-initio расчетах полигалогенидов. Смоляр А. Е., Болдырев А. И., Чаркин О. П., Клименко Н. М., Авдеев В. И. «Ж. структур. химии», 1976, 17, № 2, 214—219

расчет
электр.
структ

В рамках метода Хартри—Фока—Рутана рассчитаны электронные структуры молекул F_2 , Cl_2 , ClF , ClF_2 , ClF_3 в их основных и ионизированных состояниях, когда электроны удаляются с различных молекулярных уровней. Показано, что в расчетах фото- и рентгено-электронных спектров соединений непереходных элементов, где наблюдаются случаи нарушения теоремы Купменса, основной причиной несоответствий между экспериментальными найденными и рассчитанными последовательностями уровней является не релаксация МО (как у комплексных соединений d -элементов), а различия в энергиях корреляции электронов на разных уровнях.

Резюме

Ф. 1976

№ 10

1976

 F_2 Cl_2 ClF ClF_2^- ClF_3

85:68570w Koopmans theorem and calculation of MO relaxation in ab initio calculations of polyhalides. Smolyar, A. E.; Boldyrev, A. I.; Charkin, O. P.; Klimenko, N. M.; Avdeev, V. I. (Inst. Nov. Khim. Probl., Moscow, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1976, 17(2), 214-19 (Russ). Electronic structure and ionization potentials of F_2 , Cl_2 , ClF , ClF_2^- , and ClF_3 in their ground and ionized states were calcd. by the Hartree-Fock-Roothaan method. The main cause for the obsd. deviation from the Koopmans' theorem is not MO relaxation (as is the case of transition-metal complexes) but a difference in correlation energy of electrons on different levels.

(γ, kb. corr. factor)

⊕4

⊗

C.A. 1976-85 N 10

F₂

1974.

Arce F., et al.

curr. no. 5.

Rev. Roum. Chim.
1974, 22 (3), 335-43

(see. H₂; III)

F₂

1974

3 Б32. Метод расчета параметров связи в методе ППДП—МО. 2. Предварительные приложения. Bhat-
tacharya S. P., Chowdhury M. A method for
calculating CNDO—MO bonding parameters. 2. Preli-
minary applications. «J. Phys. Chem.», 1977, 81, № 16,
1602—1604 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП, с использованием теор. ф-лы для оценки па-
раметров β в резонансных интегралах из сообщ. 1 (см.
пред. реф.) и приближение ППДП/2 для оценки всех
остальных метричных элементов рассчитаны потенци-
алы ионизации (ПИ) и константы ядерного квадруполь-
ного взаимодействия (ЯКВ) двухатомных молекул га-
логенов и интергалогенов (F₂, Cl₂, Br₂, I₂, JCl, JBr,
BrCl, BrF, ClF) и гидридов (NH₃, PH₃, AsH₃,
NH₄⁺, PH₄⁺, CH₄, SiH₄, GeH₄). Для констант ЯКВ со-
гласие с экспериментом очень хорошее, для ПИ в
нек-рых случаях бывают расхождения, превышающие

Г. М. 17.

+15



Cl₂ ест.

22, 1978, 113

1 эв (в скобках приведены эксперим. величины): кон-
станты ЯКВ (МГц) Cl_2 —105,95 (—109,74), Br_2 751,28
(769,75), J_2 —2285,5 (—2292,71), ПИ (эв) F_2 15,87
(15,63), 16,32 (17,35), 18,26 (18,46), Cl_2 11,08 (11,50),
13,93 (14,11), 14,05 (15,94), Br_2 10,22 (10,71), 12,52
(12,52), 12,74 (14,44), J_2 9,38 (9,65), 11,39 (11,28),
11,65 (12,79). К. Я. Бурштейн

F₂

1974

87: 46341m Dissociation of fluorine by electron impact. Chen, Hao-Lin; Center, R. E.; Trainor, W.; Fyfe, W. I. (Avco Everett Res. Lab., Inc., Everett, Mass.). *J. Appl. Phys.* 1977, 48(6), 2297-305 (Eng). By using a previously developed F-atom diagnostic technique, the efficiency of F₂ dissociation by an electron beam or an electron-sustained discharge was systematically studied. By monitoring the transient concentration of ions generated during the electron-beam-sustained discharge, F⁻ + F₂⁺ ion-ion recombination and F₂ dissociation attachment rate constants at various E/P conditions were determined. The dissociative attachment rate constant of F₂ at an average electron energy of 1 eV was about $(2.3 \pm 0.3) \times 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{mol. s}^{-1}$ and increased with decreasing electron energy. The F⁻ + F₂⁺ → 3F recombination rate constant at an E/P of 18 kV/cm/atm was about $(1.5 \pm 0.2) \times 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{mol. s}^{-1}$ and also increases with decreasing E/P values. The sustained-discharge enhancement of F-atom production from these experiments in F₂ is small, ~1.7.

C.A. 1977. 87 n 6

70421.3756
Ch, Ph, TC

F_2 49587

1977
#45-18055

Driessler Frank, Kutzelnigg Werner. Analysis of the chemical bond.

II. Examination of some-empirical methods. "Theor. chim. acta", 1977, 43, N 4, 307-328 (англ.)

0858 пмк

824 829

ВИНИТИ

F₂

(7)

Ф. 1974
л 11

1974

11 Д163. Обобщение теоремы Купманса. IV. Использование коррелированных волновых функций для вычисления потенциалов ионизации молекулы фтора. Ellenbogen James C., Day Orville W., Smith Darwin W., Morrison Robert C. Extension of Koopmans' theorem. IV. Ionization potentials from correlated wavefunctions for molecular fluorine. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 11, 4795—4801 (англ.)

Методом МК ССП проведены расчеты потенциалов ионизации (ПИ) молекулы фтора. При этом для вычисления ПИ использован аналог теоремы Купманса (ТК), расширенной на случай описания системы многоконфигурационной волн. ф-цией (МКВФ). Расчет ПИ молекулы фтора представлял интерес по той причине, что предсказанный согласно обычной ТК порядок следования ПИ электронов с орбиталей $3\sigma_g$ и $1\pi_u$ не совпадал с экспериментальным, что приписывалось не учету электронной корреляции в рамках одноконфигурационного приближения. Использование МКВФ и расширенной ТК позволило авторам учесть влияние корреляционных эффектов на величину ПИ и получить значения ПИ, близкие к экспериментальным. Ч. 3 РЖФиз, 1976, 6Д20.

А. Обухов

Финн 749

F₂

1974

(y)

20 Б17. Обобщение теоремы Купманса. IV. Потенциалы ионизации молекулы фтора, полученные с помощью коррелированных волновых функций. Ellenbogen James C., Day Orville W., Smith Darwin W., Morrison Robert C. Extension of Koopman's theorem. IV. Ionization potentials from correlated wavefunctions for molecular fluorine. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 11, 4795—4801 (англ.)

Рассмотрен вопрос о расчете потенциалов ионизации (ПИ) в рамках многоконфигурац. подхода Даса — Вола. Отмечено, что техника натуральных орбиталей перехода (НОП) позволяет построить вариационный метод определения волновой функции иона как свертки точной или приближенной волновой функции молекулы с НОП (см. пред. сообщ., Int. J. Quant. Chem. Symp., 1975, 9, 229). Определение ПИ в рамках этого подхода сводится к реше-

Х. 1974
N 21

нию вековой задачи для обобщенного хартри-фоковского нелокального потенциала с весом, равным матрице плотности 1-го порядка для молекулы. Метод применен для анализа причин неудач применения теоремы Купманса в ее стандартном варианте для определения ПИ молекулы фтора в равновесной конфигурации основного состояния. Исследована зависимость результата расчета валентных и остовных ПИ от числа конфигураций в волновой функции молекулы. Указано, что метод позволяет получить удовлетворительное согласие с эксперим.

данными. Анализируются возможные источники ошибок метода.

В. И. Пупышев

(ИВН
ВГ)

T₂

[num 53/5]

1977

Fontal B, et al.

Spectrochim. Acta, 1977,

33A, 507-15.

(написан.
Роман-скуп)

F₂

номер 9476

1974

Gunnarsson O., et al.

J. Chem. Phys., 1977,
67 N9, 3970- 3979.

расчет
основн.
ф состоян.

●
(см. B₂; III)

F₂

1977

Gunnarsson O., et al.

Int. J. Quantum Chem.,
1977, Quantum chem. Symp.,
NII, 71-74.

парет
интер
евро

(cur. B₂; III)

F_2

1977

Gunnarsson O, et al.

(m.n.)
re

Phys. Rev B: Solid
State, 1977, 15, (6),
3027-38

●
(cm. H_2 ; III)

I_2

ommuck 5757

1977

($\vec{Ae}, \gamma$)

Lowe J.P.

J. Amer. Chem. Soc.
1977, 22, (17), 5557-70.

F₂

1977

Von Niessen W. et al.

кв. мех.
расея.

J Chem. Phys. 1977, 67(9),
4124-31.

см. №-III

F₂

ЖУ-17498

1977

13 Б30. Метод уравнений движения для F₂: энергии переходов, силы осцилляторов и борновские сечения. Rescigno T. N., Bender C. F., McKoy B. V. The equations—of—motion method for F₂: transition energies, oscillator strengths and Born cross sections. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 45, № 2, 307—310 (англ.)

СММ. ПОСТ. Методом ур-ний движения рассчитаны энергии переходов, силы осцилляторов и дифференциальные борновские сечения для молекулы F₂ при эксперим. равновесном расстоянии 2,68 ат. ед. основного состояния. Волновая функция основного состояния найдена либо в приближении Хартри—Фока, либо в приближении конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом однократно возбужденных конфигураций. Базис включал сгруп-

ж. 1977. 1/13

пированные гауссовы функции $[3s\ 2p]$, а также дополнительные диффузные орбитали s - и p -типа и поляризац. функции d -типа. Оператор возбуждения составлен как линейная комбинация простых операторов «1 частица—1 дырка». Введение КВ приводит к завышенным (на несколько электрон-вольт) значениям энергий переходов по сравнению с лучшими расчетными результатами, имеющимися для синглетных переходов. Для достаточно точного расчета моментов перехода и для устранения в ряде случаев триплетной неустойчивости введение КВ оказывается необходимым. Для ряда переходов приведены графики изменения обобщенной силы осциллятора как функции переноса импульса.

М. Е. Ерлыкина

F_2

- 7 Д161. Метод уравнений движения для F_2 : энергии переходов, силы осцилляторов и борновские сечения.
) Rescigno T. N., Bender C. F., McKoy B. V. The equations-of-motion method for F_2 : transition energies, oscillator strengths and Born cross sections. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 45, № 2, 307—310 (англ.)

1977

расчет
методом
уравнений
движения

Методом ур-ний движения проведен расчет энергий переходов, сил осцилляторов и диффер. борновских сечений для молекулы F_2 при эксперим. равновесном расстоянии $R_e = 2,68$ ат. ед. основного состояния. Оператор возбуждения записан как линейная комбинация простых частично-дырочных компонент, тогда как волн. ф-ция основного состояния определена либо в приближении Хартри — Фока, либо в приближении конфигурац. взаимодействия с учетом однократно возбужденных конфигураций. Найдено, что при введении конфигурац. взаимодействия расчетные значения энергий переходов увеличиваются и для переходов в синглетные состояния становятся на несколько электрон-вольт выше лучших теоретич. значений, определенных для молекулы F_2 прямым методом конфигурац. взаимодействия, что объясняется отсутствием учета операторов возбуждений типа «2 частицы — 2 дырки». Для различных переходов приведены графики зависимости обобщенной силы осциллятора от величины переноса импульса. Н. Ф. Степанов

86171-58

ф. 1977. № 7

F₂

Omura 6051 1977

Rosenkrantz M.E.
et al.

KB Mex.

factor

Int. J. Quant. Chem.

1977, 12, 707-19.

* 45-18035

1977

16 Б20. Неэмпирические псевдопотенциалы для молекулярных расчетов. II. Расширение базисной системы и корреляционные эффекты для молекул X_2 ($X=F, Cl, Br, J$). Teichteil Ch., Malrieu J. P., Barthelat J. C. Non-empirical pseudopotentials for molecular calculation. II. Basis set extension and correlation effects on the X_2 molecules ($X=F, Cl, Br, J$). «Mol. Phys.», 1977, 33, № 1, 181—197 (англ.)

На примере расчетов св-в молекул F_2, Cl_2, Br_2 и J_2 методом неэмпирич. атомных псевдопотенциалов (Собр. I, см. пред. реф.) исследовано влияние базиса на получаемые результаты и возможности учета корреляц. эффектов в приближении псевдопотенциалов. Расчеты проведены в миним. базисе орбиталей слейтеровского типа, двухэкспонентном базисе слейтеровских орбиталей и двухэкспонентном базисе с включением поляризац. ф-ций. Показано, что расширение базисной системы сильно влияет на одноэлектронные энергии, напр., уровни $5\sigma_g$ и $2\pi_u$ молекулы Cl_2 меняются местами при пере-

 F_2 Cl_2 Br_2 J_2

сн; у

+3



X. 1977. N16

ходе от миним. к двухэкспонентному базису. Корреляц. поправки рассчитаны методом конфигурац. взаимодействия. При этом получаемые в приближении атомных псевдопотенциалов коэф. перед функциями конфигураций в волновых ф-циях весьма близки к соотв-щим коэф., вычисл. методом конфигурац. взаимодействия при учете всех электронов. Корреляц. энергия приближения псевдопотенциалов превышает точную на $\sim 10\%$; потенциалы ионизации и энергия диссоциации молекулы J_2 лучше согласуется с экспериментом, чем значения, полученные в расчетах с учетом всех электронов. Найдено, что энергии диссоциации рассмотренных молекул увеличиваются в ряду F_2, J_2, Br_2, Cl_2 , что согласуется с эксперим. данными.

А. Дементьев

45-18035

1977

F₂

Cl₂

Br₂

I₂

(nb, max.
factor)

87: 29389r Nonempirical pseudopotentials for molecular calculations. II. Basis set extension and correlation effects on the fluorine, chlorine, bromine, and iodine molecules. Teichteil, Ch.; Malrieu, J. P.; Barthelat, J. C. (Lab. Phys. Quant., Univ. Paul Sabatier, Toulouse, Fr.). *Mol. Phys.* 1977, 33(1), 181-97 (Eng). The ability of the at. pseudopotential of B. et al. (1977) to reproduce all-electron basis-set extension and correlated effects in mols. is tested on Cl₂ and F₂ by comparing pseudopotential and all-electron calcs. at the CI and SCF levels using 3 basis sets. The pseudopotential-derived monoelectronic energy levels, bond lengths, and force consts. have a perfect basis-set dependence. The coeffs. of the excited determinants in the ground-state wave function resulting from limited CIs agree well. The pseudopotential calcn. reproduces correlation effects on bond lengths and force consts. but overests. the total correlation energy by 10%. Basis-set effects on the total energy are smaller in the pseudopotential than in the all-electron calcs. Pseudopotential extended double- ζ + d basis set calcs. including CI were performed on Br₂ and I₂, the mean agreement with expt. for I₂ being better than that for all-electron calcs. The calcd. dissocn. energies of the halogens are in the order Cl₂ > Br₂ > I₂ > F₂.

(+3)

⊗

C. A. 1977

87 n 4.

4-18035

1977

F₂

Cl₂

9 Д155. Неэмпирические псевдопотенциалы для молекулярных расчетов. II. Расширения базисных наборов и корреляционные эффекты для молекул X₂ (X=F, Cl, Br, J). Teichteil Ch., Malrieu J. P., Barthelat J. C. Non-empirical pseudopotentials for molecular calculation. II. Basis set extension and correlation effects on the X₂ molecules (X=F, Cl, Br, J). «Mol. Phys.», 1977, 33, № 1, 181—197 (англ.)

кр. мех.
расчет

Ограниченным методом Хартри — Фока и методом конфигурац. взаимодействия проведены расчеты молекул F₂ и Cl₂ в основных состояниях как при учете всех электронов, так и в приближении псевдопотенциала (ПП) с параметрами ПП, приведенными в ч. I (см. реф. 2Д154). Для каждой молекулы использовано 3 типа базисов: минимальный, оптимизированный по молекулярным расчетам, минимальный и атомный двух-

(+1)



Ф 1977. №9

экспонентный базисы для F_2 и минимальный атомный, двухэкспонентный атомный для $3s$ - и $3p$ -орбиталей, а также расширенный $3d$ -орбиталями атомный базис для O_2 . Сравнение результатов приближения ПП и расчетов с учетом всех электронов проведено по орбитальным энергиям валентной оболочки, по изменениям в полной энергии при переходе от одного базиса к другому, а также по равновесным расстояниям и силовым постоянным. При расчетах методом конфигурац. взаимодействия сопоставлялись также коэф. перед соответствующими наиболее важными конфигурациями. Приведена сводка результатов расчетов в том же приближении ПП молекул Bg_2 и J_2 . Отмечено хорошее согласие полученных данных с данными прямых расчетов, не использующих приближения ПП.

Н. Степанов

F₂

Commun 8415 | 1978

Asundi R.K., et al.

Обзор.

Вспышек.
Сенсор. Вспышек
Разрешения

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

F₂

1948

Гурьев Т. А., и др.

Учен. зап. кн.-б. Учен. зап. кн.-б.
структ. "13 Всес. Турк. совещ. по жмш.
кооперат. соедин., 1948" М.,
1948, 113

см. О₂ - II

F_2

O_2

HF

H_2O

CH_4

(7)

(+4) ☒

ж. 1948 N 4

7 Б8. Исследование электронной структуры молекул самосогласованным дискретным вариационным X_α -методом в базисе численных хартри-фоковских функций. I. Общее описание процедуры. Гуцев Г. Л., Левин А. А. «Ж. структур. химии», 1978, 19, № 6, 976—981

Предложен вариант дискретного вариационного (ДВ) метода, допускающий применение произвольных базисных ф-ций, заданных в табличной форме. Выбор «репрезентативных» точек, взвешенные суммы по которым заменяют в методе ДВ молек. интегралы, осуществляется не стохастически, как в оригинальном варианте метода (Phys. Rev., 1970, B2, 2887; Chem. Phys., 1973, 2, 41, 52), а регулярным способом, что позволяет устранить «перекос», возникающий при вычислении матричных элементов, электронной плотности и др. св-в. В многоцентровом массиве точек сохраняются только те точки одноцентровых массивов, которые ближе к «своему» атому (с учетом реальных атомных радиусов). Самосогласованный вариант предложенной процедуры апробирован путем вычисления в рамках концепции переходного состояния первых потенциалов ионизации молекул F_2 , O_2 , HF , H_2O и CH_4 . Е. Розенберг

BX-1314

1978

HF, F₂, HCl, LiCl, Cl₂
(Kb. sec. pacem)

Hay P.J. Wadt W.R., Kahn L.R.,

J. Chem. Phys. 1978, 68(7), 2059-66.

Ab initio effective core potential
for molecular calculations.

C.A. 1978, 23, N26, 198109a.

10



52

1948

paenpeger.
zapaga

Kollman, Peter A.
J. Am. Chem. Soc. 1948,
100(10), 2974-84



col. HF - III

F_2 Iuvia M., Iudena E. V. 1978.

Int. J. Quant. Chem., 1978,
14, n1, 1-11.

распред.
записок.



(see. Li'2) III

BX-1369

1978

$\text{Li}_2, \text{Be}_2, \text{Ba}, \text{Ca}, \text{Na}, \text{O}_2, \text{F}_2,$
 P_2, Cl_2 (re, kb. sect. pacific)

Mehandru S.P., Ray N.K.,

Indian J. Chem., Sect. A 1978, 16A(3)
247-9.

Use of a Frostian potential based model no-
within FStO formation.

C.A. 1978, 89, N4, 31146u

10

⊕

1579 24m 130

1978

Perevozchikov V. Y. et al

F_2

Opt. Spectrosc. 1978

Спектр. пост.

45(2), 401-2



(Cu M_2^+ ; III)

BX-1821

1978

LiH, FM, BH, H₂, NH,
F₂, CH⁺ (см. пост.)

Перевозчиков В.И., Грибов Л.А.,

И. прикл. спектроск. 1978, 29(5),
927-8.

Использование аппар
кривой ф-ии Морзе

С.А. 1979, 90, N8, 63697m

оксим. потерия.
в расчёте см. пост.

10



F₂

number 6498 1978

Ramakrishna et
al.

Chem. Phys. Lett.
1978, 54 (4), 554-60.

Chem. Phys. Lett.
1978, 54 (4), 554-60.

F_2

$3\Pi_g - 3\Pi_u$

переход

1978

3 Д294. Вакуумные УФ-спектры испускания искрового разряда в смесях фтора и некоторых многоатомных фторидов с инертными газами. Scheps R., Ryan F. M. Vacuum ultraviolet spark emission spectra of fluorine and some polyatomic fluorides in noble gases. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 58, № 3, 417—420 (англ.)

Вакуумные УФ-спектры испускания искрового разряда в смесях (F_2 , SF_6 , SO_2F_2 , NF_3 , CH_3F , N_2F_4 и BF_3)/He/Ar исследованы с точки зрения определения опти-

мальных условий образования эксимеров ArF . Обнаруженное в ходе экспериментов излучение $\lambda=158$ нм в смесях F_2/He , F_2/Ne и в чистом F_2 приписано переходу $F_2(3\Pi_g - 3\Pi_u)$.

В. С. Иванов

Ф. 1979, N 3

1978

F₂

7 Б1503. Возбуждаемые в искровом разряде спектры испускания в вакуумной ультрафиолетовой области фтора и некоторых многоатомных фторидов в смесях с благородными газами. Scheps R., Ryan F. M. Vacuum ultraviolet spark emission spectra of fluorine and some polyatomic fluorides in noble gases. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 58, № 3, 417—420 (англ.)

Vi

В области 120—200 нм при разрешении 0,01—0,15 нм исследованы спектры испускания, возбуждаемые искровым разрядом в ряде фторсодержащих газов (F_2 , SF_6 , SO_2F_2 , NF_3 , CH_3F , N_2F_4 , BF_3) в смесях с 700 мм He и 2—20 мм Ag. Кроме того, исследовали излучение при 158 нм в смесях F_2+He , F_2+Ne и в чистом F_2 . Интенсивность этого излучения измеряли в зависимости от плотностей F_2 и благородных газов с целью выяснения механизма заселения соотв-щего возбужденного уровня F_2 . Искровой разряд (длительность импульса 150 нсек, сила тока 200 а) происходил в зазоре 1 мм между Ni-электродами с частотой 20 гц. Для большинства тройных смесей наблюдали эксимерное излучение AgF , к-рое было наиболее интенсивным в смесях, со-

2.1978, N7

держ... обнаруживается в смесях фреонами... интенсивность, по крайней мере, в 100 раз... чем для смесей с F_2 . Зависимость интенсивности эксимерной флуоресценции ArF от типа донора фтора коррелирует с известными из лит-ры данными по аналогичным зависимостям, полученным для эксимерных лазеров на KrF и XeF . Это показывает, что методика возбуждения спектров испускания ArF в искровом разряде может использоваться для отбора фторсодержащих молекул, перспективных с точки зрения их использования в эксимерных лазерах. В чистом F_2 и его смесях с He и Ne (но не с Ar) наблюдали полосу испускания 158 нм, к-рая предположительно приписана переходу $F_2(^3\Pi_g \rightarrow ^3\Pi_u)$. Подобный переход $^3\Pi_{2u} \rightarrow ^3\Pi_{2g}$ при 301,5 нм предположительно был обнаружен ранее для молекулы J_2 .

В. Е. Скурат

ают
чаще

F₂

оттиск 6695

1978

1 Д121. Потенциальные кривые и электронные фотопереходы молекулы F₂. Шляпников Г. В., Шматов И. П. «Оптика и спектроскопия», 1978, 45, № 3, 487—492

Исследованы потенц. кривые различных электронных состояний молекулы F₂. Показано, что возбужденные термы ³P_{0+u}, ³P_{1u} и ¹P_{1u} имеют «ямы» с глубиной ~200° К. Обсуждается возможность эксперим. подтверждения полученных результатов.

Резюме

потенц.
кривые



ф. 1979, N 1

1948

F₂

18 Б16. Теория молекулярных орбиталей для комптоновского профиля молекулы F₂. Snyder L. C., Weber T. A. Molecular orbital theory of the Compton profile of F₂. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 6, 2974—2979 (англ.)

теория
молекулярных
орбиталей

Для молекулы F₂ с использованием волновых функций метода Хартри—Фока рассчитаны зависящие от направления и сферически усредненные комптоновские профили (КП). С целью облегчения физ. интерпретации теор. КП представлены в виде суммы вкладов от а) валентных и остовных электронов, б) σ - и π -электронов, в) атомных и дифракц. частей. Отмечена большая анизотропия КП молекулы F₂, достигающая 10% от величины всего профиля. Вклад в анизотропию КП вносят как атомные, так и дифракц. части, причем эти вклады одного порядка. Показано, что дифракц. эффект в сферически усредненном КП составляет $\sim 1/6$ от величины КП в направлении, параллельном оси молекулы, что несколько выше уровня шума в современных экспериментах по комптоновскому рас-

2, 1948, N 18

сеянию. Дифракц. эффект использован для определ
ния длины связи F—F. Найденное т. обр. значе
превышает эксперим. величину на $\sim 5\%$.

В. Б. Павлов-Вереvани

F₂

1979

3 Б16 Деп. Аномальное поведение потенциальной кривых молекулы $F_2(X^1\Sigma_g^+)$ в методе МО. Абба-сов Р. М. Б. «Материалы конф. молод. ученых, посвящ. 60-летию ВЛКСМ. Москва, 1978 г. Ч. 2». МГУ. М., 1979, 329. (Рукопись деп. в ВИНТИ 5 ноября 1979 г., № 3783—79 Деп.)

Показано, что аномальный характер потенциальной кривой состояния $X^1\Sigma_g^+$ молекулы F_2 в рамках метода ССП МО ЛКАО тесно связан с триплетной неустойчивостью решений ур-ний Хартри—Фока и ограничениями на вид волновых функций метода ССП.

Автореферат

*потенц.
кривые*

Р. 1980. №3

F₂

Linnmen 918D1 1979

packet
nomens.
клубок,
γ; δ₀; ε_e

Brescansin L. M.
et al.

J. Chem. Phys., 1979,
71 (12), 4923-30

see H₂, III

F₂

потенц.
кривые

7945
21 Б31. Теоретические исследования валентных электронных состояний и спектра поглощения ${}^1\Pi_u \leftarrow {}^1\Sigma_g^+$ молекулы F₂. Cartwright David C., Hay P. Jeffrey. Theoretical studies of the valence electronic states and the ${}^1\Pi_u \leftarrow {}^1\Sigma_g^+$ absorption spectrum of the F₂ molecule. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 7, 3191—3203 (англ.)

Методами обобщенных валентных схем (ОВС) и конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны потенциальные кривые 12 синглетных и триплетных состояний молекулы F₂, коррелирующие с диссоциац. пределом F(²P) + R(²P). Использован базисный набор (9s5p1d)/[3s2p1d], который в случае Π -состояний был дополнен диффузными s- и p-орбиталями. Рассмотрены два способа построения молек. волновых ф-ций на основе орбиталей, полученных в двухконфигурац. приближении метода ОВС. В 1-м случае учитывалось полное КВ в пространстве орбиталей ОВС с размещением 14 электронов по 8 внешним МО (1 σ_g - и 1 σ_u -орбитали F₂ сохранялись дважды занятыми). Во 2-м случае до-

Х-1979, №21

полнительно учитывались конфигурации, содержащие 1 электрон вне подпространства валентных орбиталей (метод поляризац. КВ). Для всех состояний энергии 2-го подхода оказались ниже, поэтому предпочтение отдано результатам метода поляризац. КВ. Из рассмотренных состояний связными оказываются только два. Для основного состояния $X'\Sigma_g^+$ получены след. спектроскопич. постоянные: $R_e=1,427$ А (эксперим. величина 1,412), $D_e=1,85$ эв (1,66), $\omega_e=946$ см⁻¹ (924), $\omega_e x_e=-10,6$ см⁻¹ (-22,2). Завышение энергии связи на 0,2 эв объясняется недостаточным учетом корреляц. эффектов в рамках метода поляризац. КВ. Другое (слабо) связанное состояние $^3\Pi_u$ характеризуется след. постоянными: $R_e=1,881$ А, $D_e=0,15$ эв. Отмечено, что именно валентное состояние $^3\Pi_u$ является низшим состоянием для F₂-лазера с излучением при 156—158 нм. Приведены результаты вычислений квадрупольного момента и градиента электрич. поля на ядрах в зависимости от межъядерного расстояния. Подробно обсуждены особенности спектра поглощения F₂, связанного с оптически разрешенным переходом $^1X\Sigma_g \rightarrow ^1\Pi_u$. Вычислена зависимость момента перехода от межъядерного расстояния, результаты сопоставлены с эксперим. данными и сделано заключение, что при фотопоглощении в области 2800 А состояние $^3\Pi_u$ не участвует, как это допускалось ранее.

А. В. Немухин

F₂

(M.N.)

1979

91:11446e Theoretical studies of the valence electronic states and the ${}^1\Pi_u \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ absorption spectrum of the fluorine molecule. Cartwright, David C.; Hay, P. Jeffrey (Los Alamos Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, NM 87545 USA). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(7), 3191-203 (Eng). The 12 electronic states of F₂ dissociate into ground state F(2P) atoms were investigated with ab initio polarization configuration interaction wave functions. Using a [3s2p1d] contracted Gaussian basis, the theor. spectroscopic consts. (with exptl. values in parentheses) for the ${}^1\Sigma_g^+$ ground state are: $R_e = 1.427$ Å (1.412 Å), $D_e = 1.85$ eV (1.66 eV), $\omega_e = 946$ cm⁻¹ (924 cm⁻¹), and $\omega_e X_e = -10.6$ cm⁻¹ (-22.2 cm⁻¹). The ${}^3\Pi_u$ state is very weakly bound ($R_e = 1.881$ Å, $D_e = 0.15$ eV), while the remaining 9 electronic states are strictly repulsive (aside from van der Waals min.). Mol. properties are reported for the ${}^1\Sigma_g^+$ state and a detailed anal. of the ${}^1\Pi_u \leftarrow {}^1\Sigma_g^+$ absorption is carried out. The ${}^3\Pi_u$ state appears to be the lower state in the 157 nm laser emission obsd. recently, which would correspond to the ${}^2{}^3\Pi_g \rightarrow {}^1{}^3\Pi_u$ electronic transition.

C.A., 1979, 91, N2

1949

F₂

10 Д180. Теоретическое изучение валентных электронных состояний и спектра поглощения ${}^1\Pi_u \leftarrow X{}^1\Sigma_g^+$ молекулы F_2 . Cartwright David C., Hay Jeffrey P. Theoretical studies of the valence electronic states and the ${}^1\Pi_u \leftarrow X{}^1\Sigma_g^+$ absorption spectrum of the F_2 molecule. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 7, 3191—3203 (англ.)

расчет
потенц.
кривых

Рассчитаны основное и 11 возбужденных состояний молекулы F_2 , получающихся при взаимодействии двух атомов F в состояниях 2P . Расчеты проводились двумя методами: 1) обобщенным методом валентных связей, на который накладывалось КВ, в котором учитывались все возбуждения в валентной области, и 2) методом КВ, в котором к возбуждениям, рассматриваемым в (1), добавлялись конфигурации, содержащие по одному электрону вне валентной оболочки. Использовался базис гауссовых ф-ций ($9s5p1d$), сжатый до $[3s2p1d]$. Для правильного описания ридберговских состояний во втором случае добавлено по одной диффузной $3s$ - и $3p$ ф-ции на каждом центре. Рассчитанные потенц. кривые основного состояния ${}^1\Sigma_g^+$ и вычислен-

Ф.1949/110

ные на их основе спектроскопич. постоянные сопоставлены с данными эксперимента и результатами других авторов. Лучшее согласие отмечается в сл. чие расчетов КВ. Проанализирован характер потенц. кривых возбужденных состояний и найдено, что состояние $^1\Pi_u$ является слабо связанным ($R_e=1,881 \text{ \AA}$, $D_e \approx 0,15 \text{ эв}$), остальные возбужденные состояния отталкивательные. Рассчитаны положения колебательных уровней основного состояния, квадрупольный момент и градиент электр. поля на ядрах. Детально проанализировано поглощение, обусловленное электронным переходом $^1\Pi_u \leftarrow ^1\Sigma_g^+$.

В. И. Барановский

F₂

Lammuch 8327 1979

Кб. пух.
пачет
Е.

Castro E.A.

Int. J. Quant. Chem.,
1979, 15, 355-358.

оттиск 9153

1979

от: 37914

F₂

Cl₂

LiCl

потенц.
кривые

(7.2) ☒

ф. 1980 N.5

Д135. Улучшенные неэмпирические остовные потенциалы для молекулярных расчетов. Improved ab initio effective core potentials for molecular calculations. Christiansen Philip A., Lee Yoon S., Pitzer Kenneth S. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 11, 4445—4450 (англ.)

Исследованы методы расчета молекулярных свойств при использовании эффективных потенциалов для остовных электронов. Показано, что хорошее согласие модельных расчетов с неэмпирическими учитывающими все электроны может быть достигнуто только, если атомные псевдоорбитали приводят к распределению зарядов в области валентных электронов, согласующимся с полным расчетом. Предложена простая процедура построе-

ния псевдоорбиталей, основанная на расчетах атомов в хартри-фоковском приближении. Развитый подход проиллюстрирован на примере расчета потенц. кривых для основных состояний молекул F_2 , Cl_2 , $LiCl$. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с результатами неэмпирич. расчетов, учитывающих все электроны. В отличие от ранее использованных методов, использующих псевдопотенциалы, хорошее согласие с полным неэмпирич. расчетом достигнуто и в области малых межъядерных расстояний, соответствующей отталкивательной части потенц. кривой.

Е. А. Жилинская

Отмечено 9153, OM 37914 1979

13 Б9. Улучшенные неэмпирические эффективные
основные потенциалы для молекулярных расчетов.
Christiansen Phillip A., Lee Yoon S., Pitzer
Kenneth S. Improved ab initio effective core potenti-
als for molecular calculations. «J. Chem. Phys.», 1979,
71, № 11, 4445—4450 (англ.)

Обсуждено использование атомных псевдопотенциалов
(АП) типа Филлипса-Клейнмана в молек. расчетах. От-
мечено, что полученные в ряде расчетов двухатомных
молекул заниженные значения межъядерных расстояний
и завышенные энергии диссоциации обусловлены частич-
ным «коллапсом» в основной области псевдоорбиталей
(ПО), построенных по станд. схеме (в виде линейной
комбинации подходящих по симметрии основных орби-
талей и соотв-щей валентной орбитали). Предложена
альтернативная схема построения ПО: в валентной об-
ласти ПО в точности совпадают с валентными орбита-
лями: в основной области ПО выбраны (с помощью по-

F₂
Cl₂
LiCl

мб. мех.
расчет

☆

(42)

2 1980 N13

линомиального представления) так, чтобы первые три пр-ные были непрерывными в «переходной» области и ПО $\chi(v)/p^l \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Параметры АП выбраны так, чтобы ПО соответствовали хартри-фоковские значения орбитальных энергий. Неэмпирич. МО ЛКАО ССП методом с использованием АП проведен расчет потенциальных кривых для основного состояния F_2 , Cl_2 , $LiCl$. ПО аппроксимированы 4 гауссовыми ф-циями (с добавлением в молек. базис поляризац. ф-ций). Отмечено хорошее согласие с результатами неэмпирич. МО ЛКАО ССП расчета с учетом всех электронов. Проведено также сопоставление с расчетами, в к-рых использованы другие АП. Предложенный АП особенно хорошо (по сравнению с другими АП) передает форму потенциальных кривых при малых межъядерных расстояниях.

О. Гриценко

F₂

Common 8514

1979

DeFrees S. J. et al.

fract
paleobeen.
unaffected

J. Amer. Chem. Soc.
1979, 101(15) 4085-89

(cell. H₂; 10)

F₂

1949-XI-6249 1979
Dunlap B.J. et al

с.п.
кв. сех.
раарет
у, No

J. Chem. Phys., 1949, 11, 12,
4993-9.

Cu H₂ ; III

F-X
F₂

1979

Engelbre F.

envelop

document.

Chem. Phys. Lett., 1979,

65 (3), 564-568

(see. Nat^{*}, 11)

F₂

1979

Fantucci P.

(u.n)

Mol. Phys, 1979
37 (3) 831-41

(eu. CH₄ ; III)

199-1
4 Б30. Исследование электронной структуры моле-

кул самосогласованных дискретным вариационным X_α -методом в базисе численных хартри-фоковских функций. III. Расчет потенциалов ионизации малых молекул. Гуцев Г. Л., Левин А. А. «Ж. структур. химии», 1979, 20, № 5, 771—780

Дискретным вариационным методом в базисе численных хартри-фоковских функций с аппроксимацией электронной плотности суммой сферически симм. «атомных» распределений рассчитаны потенциалы ионизации (ПИ) молекул F_2 , O_2 , N_2 , CO , HF , H_2O , NH_3 , CH_4 и CF_4 . Рассчитанные значения ПИ сопоставлены с эксперим. данными, а также с расчетами, проведенными др. методами. Отклонение вычисленных ПИ от эксперим. значений в основном не превосходит 1 эВ. Исследована зависимость вычисленных ПИ от характера базиса. Сообщ. II см. «Ж. структур. химии», 1978, 19, 982. Резюме

F_2

(14)
Эл. структура
ВР XI-6332

(48) ☒

х. 1980. N4

ВР-Х1-6332

1949

2 Д122. Исследование электронной структуры молекул самосогласованным дискретным вариационным X_α -методом в базе численных хартри-фоковских функций. III. Расчет потенциалов ионизации малых молекул. Гуцев Г. Л., Левин А. А. «Ж. структур. химии», 1979, 20, № 5, 771—780

Дискретным вариационным методом в базе численных хартри-фоковских функций с аппроксимацией электронной плотности суммой сферически-симметричных «атомных» распределений рассчитаны потенциалы ионизации (ПИ) молекул F_2 , O_2 , N_2 , CO , HF , H_2O , NH_3 , CH_4 и CF_4 . Ч. II см. Гуцев Г. Л., Левин А. А. «Ж. структур. химии». 1978. 19. 982.

F_2
(+)
(7)

(18)

ор. 1980. №2

BP-XI-6332 1978

F₂

7698 Study of the electron structure of molecules by a self-consistent discrete variational X(alpha) method as the basis of numerical Hartree-Fock functions. III. Calculation of ionization potentials of small molecules. Gutsev, G. I.; Levin, A. A. (Inst. Khim. Fiz., Chernogolovka, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1979, 20(5), 771-80 (Russ). The calcn. method of G. and L. (1978) is used. Results are reported for F₂, O₂, N₂, CO, HF, H₂O, NH₃, CH₄, and CF₄.

(7)

кв. мех.
расчет.

(+8)



C.A. 1980.92.112

F₂

1979

Ghohla K. et al.

exemp
grayscale.

Opt. and Laser Technol.,
1979, 11, n 6, 305-310 (amer.)



(cur. CEF; III)

F₂

Lomnick 8459 1/1979

Kitaeva K., et al.

u.n.

Chem. Phys. Lett
1979, 65 (2), 206-211.

F₂

Литература 84801

1979

Kornwalow-Daniel D.
et al.

Chem. Phys. Lett. 1979, 65,
N3, 494-99.

расчет
потенц.
кривых

ссыл. B₂-III

F₂

12 Д113. Приближение ППДП для расчета вертикальных потенциалов ионизации методом функции Грина. The CNDO approximation in the Green's function method for VIP calculation. Liegener Christoph-Maria, Scherz Udo. «Theor. Chim. acta», 1979, 52, № 2, 103—111 (англ.)

Разработана методика расчета вертикальных потенциалов ионизации (ВИП) молекул методом ф-ции Грина с использованием приближения ППДП. Особое внимание обращено на то, чтобы вносимые приближения не изменяли аналитич. поведения собственной энергетич. части M , которая предполагается почти диагональной. При переходе к приближению ППДП перенормировка не производилась (во входящих в M диаграммах все двойные линии просто заменялись простыми). Электрон-электронное отталкивание описывалось с помощью единого усредненного параметра γ . Описана итерационная процедура расчета ВИП. В качестве примеров рассчитаны ВИП F_2 , HF , C_2F_4 , CH_2F_2 , BF_3 , CH_3F и CF_4 . Введение многочастичных поправок заметно уменьшает рассчитанные в приближении ППДП ВИП по абсолютной величине, причем согласно с экспериментом заметно улучшается.

О. В. Сизова

расчет
(у)

(+6) ☒

9/1979, N12

F₂

1949

91:129328w The CNDO approximation in the Green's function method for VIP calculation. Liegener, Christoph Maria; Scherz, Udo (Inst. Theor. Phys., Tech. Univ. Berlin, 1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.). *Theor. Chim. Acta* 1973, 52(2), 103-11 (Eng). By introducing a CNDO adapted approximation into an appropriate irreducible interaction part, a simple formula for calculation of vertical ionization potentials is derived. The method is applied to the molecules F₂, HF, C₂F₄, CH₂F₂, BF₃, CHF₃, CF₄.

(7)

(+6) [X]



P.A. 1949, 9, N/6

F₂

— 23 Б79. Приближение ППДП в методе функций Грина для расчета ВПИ. Liegener Christoph-Maria, Scherz Udo: The CNDO approximation in the Green's function method for VIP calculation. «Theor. Chim. acta», 1979, 52, № 2, 103—111 (англ.)

(y)

С использованием валентного приближения ППДП в методе функций Грина, разработан простой способ расчета поправок к теореме Купменса для вертикальных потенциалов ионизации (ВПИ). Показано, что в приближении ППДП ряд теории возмущений для поправки к ВПИ может быть просуммирован с помощью функций Грина, в результате чего получена ф-ла очень простого вида, к-рая пригодна для практич. расчетов. Предложенный метод применен к расчету ВПИ молекул (F₂) HF, C₂F₄, CH₂F₂, BF₃, CH₃F и CF₄. Получено хорошее согласие с экспериментом (эв, в скобках приведены эксперим. величины): В F₃ 1e'' 16,05 (16,68), 3e' 16,55 (17,13), 1a₂' 15,98 (15,95), 2e' 19,89 (20,14), 2a₁' 20,94 (21,4), 2a₂'' 21,34 (19,06), CF₄ 4t₂ 16,99 (17,40), 1t₁ 17,32 (16,20), 1e 18,21 (18,50), 3t₂ 23,38 (22,12), 4a₁ 25,58 (25,12). Показано, что учет поправок при расчете ВПИ улучшает согласие с экспериментом.

(+6) ☒

X-1979/123

К. Я. Бурштейн

F₂

Lommuca 9746 | 1979

Mehandru S.P.
et al.

павловерт,
уааааааа,
Гѐ

Proc. Indian Nat.
Sci. Acad., 1979,
A45 (5), 367-71.

1979

 F_2

помечен,
кривая,
М.П.

15 Б19. Методы ЛКАО в X_α -формализме: сравнение результатов для молекулы F_2 . Mintmire J. W. LCAO methods in the X_α formalism: comparison of results for the F_2 molecule. Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics, and computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 11—17, 1979. «Int. J. Quantum Chem.», Quantum Chem Symp. № 13, 162—168 (англ.)

Методом ЛКАО- X_α с использованием базиса гауссовых функций (ЛКАО- X_α -ГФ) рассчитана потенциальная кривая и спектроскопич. постоянные молекулы F_2 . Электронная плотность молекулы аппроксимирована разл. по одноцентровым гауссовым ф-циями, центрированным на ядрах и на середине длины связи. Коэф. разл. определены из условия минимума разности электростатич. энергий отталкивания, рассчитанных с исполь-

X 1980 N 15

зованием точной и аппроксимированной электронной плотности. Вычисл. значения равновесного расстояния, энергии диссоциации и частоты колебаний составили 2,75 ат. ед., 3,3 эВ и 1100 см^{-1} соотв. Полученные результаты сопоставлены с данными расчетов молекулы F_2 методом ЛКАО- X_α в базисе слейтеровских ф-ций с использованием дискретного вариац. метода для расчета матричных элементов гамильтониана (ЛКАО- X_α -СТО) и метода линейной комбинации «маффин — тин» орбиталей (ЛКМТО). Показано, что результаты расчетов методом ЛКАО- X_α -СТО близки к результатам расчетов методом ЛКАО- X_α -ГФ, причем оба метода близки к пределу, достижимому при решении Х-ур-ний. Отмечено, что в силу использования базиса СТО и эффективности численной процедуры расчеты молекул методом ЛКАО- X_α -СТО более предпочтительны.

И. А. Тополь

F_2

1979

7 Д129. Методы ЛКАО в формализме $X\alpha$: сравнение результатов для молекулы F_2 . LCAO methods in the $X\alpha$ formalism. A comparison of results for the F_2 molecule. Mintmire J. W. — Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics, and Computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 11—17, 1979. — «Int. J. Quantum Chem.», Quantum Chem. Symp. № 13, 163—168 (англ.)

Методом ЛКАО $X\alpha$ в базисе орбиталей гауссовского типа $11s7p$ исследовано электронное строение F_2 . Полученные результаты сопоставлены с данными расчетов методом ЛКАО Хартри — Фока — Слэтера в базисе орбиталей слэтеровского типа и в приближении линейной комбинации ячеечных орбиталей. Приведены равновесные межъядерные расстояния (2,75, 2,67; 2,91, эксперим. значение 2,68 ат. ед.), энергии диссоциации (3,3, 2,9; 0,3 и 1,7 эв) и колебательные частоты (1100, 1070, 840 и 892 см^{-1}). Кратко обсуждены возможные причины отличия результатов, полученных в ячеечном приближении, от остальных. Сделан вывод, что метод ЛКАО $X\alpha$ позволяет получить результаты, близкие к предельно возможным для приближения $X\alpha$.

В. Л. Лебедев

М. П. 80
21

Ф. 1980. N7

F₂

1979

(r_e, D_e
factor)

92: 116905c LCAO methods in the $X\alpha$ formalism: a comparison of results for the fluorine molecule. Mintmire, J. W. (Quantum Theory Project, Univ. Florida, Gainesville, FL 32611 USA). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1979, 13, 163-8 (Eng). For F₂, the bond length ($r_e = 2.75$ at. unit), dissocn. energy ($D_e = 3.3$ eV), and mol. vibration const. ($\omega_e = 116$ cm⁻¹) were calcd. by using the LCAO- $X\alpha$ -GTO method of B. I. Dunlap, et al., (1977). Comparisons are made with the existing exptl. data and with published calcs. done by using other methods with the $X\alpha$ local-d. exchange potential for F₂. The LCAO- $X\alpha$ -GTO method gave results close to the $X\alpha$ limit.

C.A. 1980. 92 N 14

F₂

спектр
в мол.
пучке

13 Б124. Спектры энергетических потерь электронов молекулярного фтора. Nishimura Hiroyuki, Cartwright David C., Trajmar Sandor. Electron energy-loss spectra in molecular fluorine. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 12, 5039—5041. (англ.)

Измерены спектры энергетич. потерь электронов молек. фтора в молек. пучке в области энергии 0—17,0 эв при начальных энергиях электронов 30, 50 и 90 эв и углах рассеяния 5—140°. Отнесение полос в области энергетич. потерь выше 11,5 эв к электронным состояниям проводилось в соответствии с имеющимися квантовыми, расчетами и данными оптич. спектроскопии. Наблюдено 11 отталкивательных валентных возбужденных электронных состояний, положения к-рых хорошо коррелируют с теор. предсказаниями. Полосы в области 11,8 и 12,8 эв наблюдаются впервые и отнесены к прямому возбуждению электронных состояний $f^3\Pi_g$ и $F^1\Pi_g$ молекулы F₂. Резкие пики 14,9 и 15,25 эв предварительно отнесены к ридберговским или ионным состояниям $^1\Pi_u$ либо $^1\Sigma_u^+$. С. Б. Осин

1979

549-11-6243

№ 1980 N13

F_2

December 8901

1979

Ohwada K.

Spectrochim. acta,
1979, 135, 1353-57.

Am. Inst.

F₂

Common 9276

1979

Urban M., Kello O.

paper
Kubovx
nomeres.
Zeyner

Mot. Phys., 1979,

38 (5), 1621-33.

M.H.



coll BH-III

F₂

1980

Hoyama T., et al.

J. Chem. Phys., 1980, 73, N3
1329-33.

кв. см.
расчет
м.п.

сущ. H₂ - II

F₂

1980

Hufderheide R.M.,
et al.

paouū Ei, 179th ACS Nat. Meet.
u. n. Houston, Tex., 1980. Abstr.
Pap. Washington, D.C.,
S. a., 76.

(see. LiM; III).

F₂

(number 10481)

1980

Aufderheide K.H., et al.

Кв. сек.
пачет

J. Chem. Phys., 1980, 73 (4),
1789-1804

F_2

1980

C_2HF

C_2F_2

12 Д334. HeII-фотоэлектронная спектроскопия фтора и фторпроизводных ацетилена и диацетилена. Fluorine and the fluoroderivatives of acetylene and diacetylene studied by 30.4 nm He(II) photoelectron spectroscopy. Bieri Gerhard, Schmelzer Andreas,

(7) ☒

(+2)



ф. 1980 № 12

Asbrink Leif, Jonsson Mats. «Chem. Phys.», 1980, 49, № 2, 213—224 (англ.)

Исследованы HeII-фотоэлектронные спектры фтора (F_2) (I), C_2HF (II), C_2F_2 (III), C_4HF (IV), C_4F_2 (V). Вертикальные потенциалы ионизации I—V равны (в эв): I — 15,87; 18,8; 21,1; II — 11,50; 18,0; 21,2; 24,3; III — 11,60; 17,7; 18,5; 20,6; 21,7; 25; IV — 10,25; 12,76; 17,7; 19,5; 21,2; 23,5; V — 10,35; 12,9; 17,9; 18,1; 19,3; 20,7; 21,6; 24. Фотоэлектронные спектры интерпретированы при помощи ряда как неэмпирических, так и полуэмпирич. расчетов энергий МО I—V, анализа колебательной структуры фотоэлектронных полос. Библ. 44. Ю. В. Чижев

F_2

Cl_2

сверх-
гигиены.

(+1) ☒

E. H. 1930. 93, N 24

93: 228262t Studies of molecular halogen lasers: fluorescence spectroscopy, reaction kinetics and laser experiments. Diegelmann, M. (Max-Planck-Ges., D-8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Max-Planck-Ges. Foerd. Wiss., Projektgruppe Laserforsch.*, 1980.

[Ber.] PLF 1980, PLF 33, 124 pp. (Ger). Exptl. and theor. investigations were carried out on $D^1 \rightarrow A^1$ transitions from an ionically bound upper level to a covalent lower state in diat. homonuclear and heteronuclear halogen mols. Fluorescence spectra were recorded for the $D^1(^3\pi_{g,x}) \rightarrow A^1(^3\pi_{u})$ transitions in F_2 and Cl_2 as well as for the analogous transitions in all heteronuclear halogen mols. The kinetic processes relevant to the upper level population of halogen laser mols. were investigated. An exchange reaction of an electronically excited halogen atom with a ground state halogen donor mol. was identified as the key step in the kinetic scheme encompassing the most important processes in electron beam excited rare gas-halogen mixts. ClF , BrF , and IF showed lasing at 284, 354, and 491 nm, resp., both with electron beam pumping (except BrF) as well as for transversely excited atm. discharge excitation.

F₂

1980

Douady J. et al

unrec.
vol.

Int. J. Quantum Chem.,
1980, 17, N2, 211-233.



see CH₄, III

F_2

1980

92: 206222g Accuracy of calculating potential curves and spectroscopic constants in the SCF- X_α -SW method. Geguzin, I. I.; Topol, I. A. (Nauchno-Issled. Inst. Fiz., Rostov-on-Don, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1980, 21(1), 155-6; (Rus.). The difference between the potential curve for F_2 calcd. by the X_α -PB method with that calcd. by P. Weinberger and D. D. Konorvalon (1973) is related to the inaccuracy of the detn. of the energy and radial functions of the 1s and 2s F orbitals during change in the interat. distances and also to the inaccuracy of the establishing of the valence electron energies as to root of the secular equation of the X_α -PB method. The spectroscopic consts. were calcd. for the potential curve of F_2 according to the SCF- X_α -SW method and compared with the values calcd. according to the method of P. W. and D. D. K. (1973). The results are explained by the inadequacy of the muffin-tin approxn. for 2-at. mols.

Ref. accx.
facts

CA 1980 92 N24

1980

 F_2

6 Д117. О точности вычисления потенциальных кривых и спектроскопических постоянных в методе ССП. X_α рассеянных волн. Гегузин И. И., Тополь И. А. «Ж. структур. химии», 1980, 21, № 1, 155—156

С помощью программы метода X_α —РВ для ЭВМ БЭСМ-6, составленной авторами, рассчитана потенциальная кривая F_2 при тех же параметрах, что и в работе (Weinberg P., Konowalow P. P. «Int. J. Quant. Chem.», 1973, 7, 353).

потенциальные
кривые

Ф 1980 №6

F₂

1980

15 Б22. О точности вычисления потенциальных кривых и спектроскопических постоянных в методе ССП- X_α рассеянных волн. Гегузин И. И., Тополь И. А. «Ж. структур. химии», 1980, 21, № 1, 155—156

Обсуждаются причины неточностей в расчетах потенциальных кривых методом X_α -РВ в рамках «мафин-тин» приближения. В качестве примера рассмотрены расчеты молекулы F_2 . Отмечены две наиболее важные причины. Первая — неточность определения энергий и радиальных функций $1s$ - и $2s$ -АО F при изменении R. Вторая — неточность отыскания энергий валентных электронов, как корней векового уравнения. Последний эффект особенно важен на больших расстояниях, поскольку он приводит к увеличению электронной плотности вблизи поверхности атомных сфер, что сказывается на величине полной энергии. Отмечено, что разработанная авторами программа позволяет устранить эти трудности. По резюме

*потенц.
кривые*

№ 1980 N 15

F-F

1980

Hinde Alan L, et al.

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

sb. max.
pach.

coll. Li-NH₂-111

1980

$(F)_2$

кв. мех расст.
попеч. Жерин

Hobza P., et al.,

Collect. Czech. Chem.
Commun., 1980, 45, N5,
1323-1330



(см. $(HF)_2$; III)

F₂

1981

Joensson Bo, et al.

J. Chem. Phys., 1981,
74 (8), 4566, - 4575.

кв. мех.
раскр. и
поиску.
функции

●
(сел. LiH; iii)

F₂

1980

Jug R, et al.

KB. max.
trach; J; M.
сваж

Theor. chim. acta, 1980,
57, N 2, 131-44.

ссл FH-11

F₂

1980

Katsuki Shirachi
et al.

(9)

Int. J. Quantum. Chem.,
1980, 12, N1, 259



coll. N₂-16

F₂

[Dumuck 11245]

1980.

Klimov, et al.

Кв. мех.
расчет,
гуссова.
срещет.

Mol. Phys., 1980, 41(3)
474-81.

● (an NH) III

F₂

1980

Kollmar H.

W. pappea Theor. chim. acta, 1980,
ebaea 58, N4, 19-30

см. H₂-III

1980

F₂

4 Д9. Теорема о «центре тяжести» для полюсов одночастичной функции Грина. А «center of gravity» theorem for the poles of the one-particle Green's function. Liegener Christoph-Maria. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 75, № 1, 169—172 (англ.)

Для полюсов ω_k, μ одночастичной ф-ции Грина $G_{ij}(\omega)$ многоэлектронной системы и ее вычетов $a_{ij}, k\mu$ в этих полюсах доказано соотношение

$$\sum_{k, \mu} a_{ijk}, \mu \omega_k, \mu = \varepsilon_i \delta_{ij} + M_{ij}^{(c)},$$

где ε_i — невозмущенные орбитальные энергии, $M_{ij}^{(c)}$ — постоянная (не зависящая от ω) часть неприводимого собственно-энергетич. оператора. Приведено обобщение указанного соотношения на случай высших степеней ω_k, μ . В качестве иллюстрации проанализированы полю-

са и вычеты в них для $G_{ij}(\omega)$ молекулы F₂, рассчитанные в приближении CNDO.

С. В. Христенко

кв. мех,
расст

Ф. 1981 N 4

1980

Paxiari A. H., et al.,
Int. J. Quantum Chem.,
1980, 18 (3), 661-73.

F₂
Lv. lex.
paciem

(all. H₂; III)

F₂

[ommuch 9652] 1980

пакет
молескы
н.н.

Pelissier M., et al.

Theor. chim. acta,
1980, 55, 43-54.

•
coll HF; III

F_2

1980.

Sakai Yoshiko, et al.

Int. J. Quantum Chem.

1980, Quantum Chem.

Symp. N4, 107-112.

расчёт
равновес.
геометрии.

●
(см. NaF; III)

F₂

1980

10 Д101. Компактные сгруппированные базисные наборы гауссового типа для атомов от Li до Ne. Compact contracted gaussian-type basis sets from Li to Ne. Tatewaki Hiroshi, Huzinaga Sigeru. —Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics, and Computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 10—20, 1980.— «Int. J. Quantum Chem.», 1980, Quantum Chem. Symp. № 14, 93—106 (англ.)

М.И.

В рамках описанной ранее процедуры (см. Tatewaki H., Huzinaga S. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, 4339) построены 4 миним. базисных набора сгруппированных гауссовых ф-ций (ГФ). В первом каждая из АО 1s, 2s и 2p представлена группой из 3 примитивных ГФ; он обозначен как (3,3) для атомов от Li до Be и как (3,3/3) для атомов от B до Ne. Кроме этого построены базисы (3,3/4), (4,4/3) и (4,3/4). Эти базисы приводят к энергиям валентных АО атомов, близким к рассчитанным в двухэкспонентном базисе. С этими и рядом

(+g) ☒

см. на обороте

Ф. N10. 1981

(+9)

других аналогичных базисов неэмпирич. методом ССП
МО ЛКАО исследовано электронное строение F_2 , H_2 ,
 Li_2 , C_2 , N_2 , BF , CO , C_2H_2 , ~~C_2H_4~~ и C_3H_6 . Рассчитанные
орбитальные энергии согласуются с данными расчетов
в расширенных базисах. Длины связей CC согласуют-
ся с эксперим. данными лучше, чем полученных в боль-
шем по величине базисе ОСТ-ЗГФ. Рассчитаны и со-
поставлены с имеющимися эксперим. данными спектро-
скопич. постоянные и теплоты атомизации ряда из
перечисленных молекул. В. Л. Лебедев

ГОМ
ИЛАН

F₂

ВР-ХТ-6244

1980

18 Б52. Расчеты электронной структуры малых молекул методом ССП- X_α рассеянных волн. I. Основное электронное состояние молекулы F₂. Тополь И. А., Дементьев А. И. «Ж. структ. химии», 1980, 21, № 2, 3—7

Методом ССП- X_α рассеянных волн в модели перекрывающихся атомных сфер рассчитан ряд характеристик молекулы F₂ и исследована их зависимость от степени перекрывания сфер и расширения системы учитываемых базисных функций. Рассчитанные спектроскопич. постоянные основного электронного состояния и потенциалы ионизации F₂ хорошо согласуются с экспериментом. Обсуждены возможности эмпирич. выбора параметров модели перекрывающихся атомных сфер.

Резюме

М.И.

х 1980 № 18

F₂

ВФ - XI - 6244

1980

8 Д131. Расчеты электронной структуры малых молекул методом ССП-Х α рассеянных волн. I. Основное электронное состояние молекулы F₂. Тополь И. А., Дементьев А. И. «Ж. структ. химии», 1980, 21, № 2, 3—7

М.И. -

Методом ССП-Х α рассеянных волн в модели перекрывающихся атомных сфер рассчитан ряд характеристик молекулы F₂ и исследована их зависимость от степени перекрывания сфер и расширения системы учитываемых базисных ф-ций. Рассчитанные спектроскопич. постоянные основного электронного состояния и потенциалы ионизации F₂ хорошо согласуются с экспериментом.

Резюме

Ф 1980 N 8

F₂

ВФ-ХТ-6245

1980

8 Д132. Расчеты электронной структуры малых молекул методом ССП-Х α рассеянных волн. II. Возбужденные электронные состояния молекулы F₂. Тополь И. А., Дементьев А. И. «Ж. структ. химии», 1980, 21, № 2, 8—12

Электр.
струк.

Методом ССП-Х α рассеянных волн в приближении перекрывающихся сфер проведены расчеты потенц. кривых и спектроскопич. постоянных возбужденных состояний $1,3\Sigma_u^+$, а также энергий ряда вертикальных возбуждений в молекуле фтора. Полученные результаты сопоставлены с экспериментом и с данными неэмпирич. расчетов. Проанализированы возможности метода ССП-Х α рассеянных волн для описания возбужденных состояний молекул. Ч. 1 см. реф. 8Д131. Резюме

Ф 1980 №8

F₂

BN-XI-6245

1980

Кб. мех.
факт

93: 80638x Calculations of the electron structure of small molecules by the self consistent field $x(\alpha)$ scattered wave method. II. Excited electron states of a fluorine molecule. Topol, I. A.; Dement'ev, A. I. (Vses. Nauchno-Issled Inst. Metrol. Sluzhby "Gosstandarta", Moscow, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1980, 21(2), 8-12 (Russ). The potential curve and spectroscopic consts. of the $1,3\Sigma_u^+$ excited states as well as the energies of excitation of F₂ were calcd. by the SCF $X\alpha$ scattered-wave method within the overlapping at. spheres approxn. The results are compared with the exptl. and nonempirical calcd. data. The applicability of the $X\alpha$ scattered-wave method in description of excited states of mols. is analyzed.

Beis

CA 1980 23 ~8

F₂

ВР-Х/1-6245

1980

18 Б53. Расчеты электронной структуры малых молекул методом ССП- X_α рассеянных волн. II. Возбужденные электронные состояния молекулы F₂. Тополь И. А., Дементьев А. И. «Ж. структ. химии», 1980, 21, № 2, 8—12

Методом ССП- X_α рассеянных волн в приближении перекрывающихся сфер проведены расчеты потенциальных кривых и спектроскопич. постоянных возбужденных состояний $1,3\Sigma_u^+$, а также энергий ряда вертикальных возбуждений в молекуле фтора. Полученные результаты сопоставлены с экспериментом и с данными неэмпирич. расчетов. Проанализированы возможности метода ССП- X_α рассеянных волн для описания возбужденных состояний молекул. Сообщ. I см. пред. реферат. Резюме

У; ш.п.

2 1980 №18

F₂

Ommuck 11881 1981

kl. uex.
pauem u.n.,
Dc

1 95: 86724k The ground state potential curve for diatomic fluorine. Blomberg, Margareta R. A.; Siegbahn, Per E. M. (Inst. Theor. Phys., Univ. Stockholm, S-113 46 Stockholm, Swed.). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 81(1), 4-13 (Eng). The ground-state potential curve for F₂ was obtained using large-scale MC SCF and CI methods. MC SCF curves were obtained with the (complete active space) CAS SCF method using a variety of sets of active orbitals. The main conclusion from the CAS SCF calcs. is that the $2\pi_u$ orbital is important. CI curves were obtained using the contracted CI method. The largest calcs. contained 312,000 configurations of proper spin and space (D_{2h}) symmetry. The main conclusions from the CI calcs. are that the configurations $3\sigma_g 1\pi_g \rightarrow 3\sigma_u 2\pi_u$ should be included as ref. states and that f functions are important, otherwise errors in D_e of 0.3 eV and in r_e of 0.02 Å are found. The remaining errors at the CI level are 0.08 eV for D_e , 0.005 Å for r_e and less than 10 cm⁻¹ for the lowest vibrational levels.

C.A. 1981, 95, N10.

Оттиск 11881

1981

F_2
(М.П.)

22 Б38. Потенциальная кривая для основного состояния молекулы F_2 . Blomberg Margareta R. A., Siegbahn Per E. M. The ground-state potential curve for F_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 1, 4—13 (англ.)

Многоконфигурац. ионным методом ССП (МКССП) и методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитана потенциальная кривая основного состояния молекулы F_2 . Волновая ф-ция метода МКССП строилась с учетом всех возможных распределений электронов по активным орбиталям. Рассмотрено применение различных наборов активных орбиталей. Найдено, что для получения точных результатов в число активных орбиталей необходимо включить $2\pi_u$ -орбиталь. В наиболее точном расчете методом КВ учитывались 312156 приведенных по спине и имеющих правильную пространственную симметрию конфигураций, к-рые далее эффективно заменялись 3266 сгруппированными конфигурациями. Найдено, что для получения точных результа-

X.1981 v22, 19 A5

тов в состав исходных конфигураций необходимо включить конфигурации $3\sigma_g 1\pi_g \rightarrow 3\sigma_u 2\pi_u$, а также использовать базис, содержащий f -функции. Приведены таблицы полных значений энергии при различных межъядерных расстояниях R , значения R_e , D_e , ω_e , $\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$, B_e и энергий восьми нижних колебательных уровней, полученные различными вариантами методов МКССП и КВ. По мнению авторов ошибки в лучших рассчитанных значениях составляют: 0,08 для D_e ; 0,005 Å для R_e и меньше 10 см^{-1} для низших колебательных уровней.

В. Б. Павлов-Веревкин

F₂

Вейсманск 12815

1981

обзор,
теорет.
расчет.
исчисления.
орбитали,
полюса,
γ.

Bohm M. P.,
Gleiter R.
Theor. chim. acta,
1981, 59(2), 153-179.

F₂

[Ommuez 18169]

1981

кв. мех.
парем

Brucena A., et al.,
Int. J. Quantum Chem.,
1981, 20, N6, 1285 - 1300

F₂

ommua 10992 | 1981.

Ferreira R., et al.

оценки -
оценкам.

Theor. chim. acta,
1981, 58, 131-36

F₂

1981

Hasanein A. A., et al.

Adv. Mol. Relaxation

γ Interact. Processes 1981,
20(4), 215-231.

●
(exp. H₂ ; III)

F₂ [ommuc 12183] 1981.

(F₂) Hasanein A. A., et al.

Kb. sex.
factor,
nucleus.
Kpubee

Advance. Mol. Relax.
and Interact. Processes
1981, 20, 215-31.

F₂

11

1981

12 Д235. Неэмпирическое изучение диссоциативного прилипания низкоэнергетических электронов к F₂. Ab initio study of dissociative attachment of low-energy electrons to F₂. Hazi A. U., Orel A. E., Rescigno T. N. «Phys. Rev. Lett.», 1981, 46, № 14, 918—922 (англ.)

(Do)

Сообщаются результаты расчетов сечений диссоциативного применения низкоэнергетич. электронов (0—1 эВ) к четырем наиболее низколежащим уровням F₂(e⁻ + F₂ → F + F⁻). Указывается, что это 1-е теоретич. рассмотрение диссоциативного прилипания, которое трактует как электронное, так и ядерное движение неэмпирически и которое не использует никаких эксперим. сечений в качестве отправной точки. Для описания динамики ядер используется резонансная теория рассеяния, сформулированная в рамках приближения Борна—Оппенгеймера, или адиабатич. ядерное приближение. Для упрощения рассмотрения делаются только два до-

~~1~~
(+1)
F₂⁻

Ф1981, 18, N12.

полнительных предположения. Полученные сечения присоединения сравниваются с имеющимися эксперим. данными. Найдены энергии диссоциации $F_2(^1\Sigma_g^+)$ и $F_2(^2\Sigma_u^+)$, которые равны 1,77 и 1,19 эВ соответственно, и удовлетворительно совпадают с эксперим. значениями 1,68 и 1,29 эВ. Библ. 20. А. П. Калинин.



(F₂ in F₂)

number 12213

1981

Hinchliffe A.

Heppes
Zaunog,
noisy-
event.

(noisy-
event)

Advan. Mol. Relax.
and Interact. Processes,
1981, 20, 63-69.

F₂

Lommu 12224 1981.

Fönlsson Bo, et al.

rometiz.
krubee

J. Chem. Phys., 1981,

paare

74 (8), 4568 - 75

4.17; Vi; 20

1981

F₂

22 Б40. Исследование потенциальных кривых методами типа НХФ. Потенциальная кривая молекулы F₂. Klimo Viliam, Tiño Jozef. Study of potential curves by UHF type methods. Potential curve of F₂ molecule. «Collect. Czech. Chem. Commun.», 1981, 46, № 6, 1365—1369 (англ.)

всв. мех.
расчет,
по теории.
справке

Получены и сопоставлены между собой результаты расчетов в различных приближениях потенциальной кривой основного состояния молекулы F₂. При вычислениях использован базисный набор гауссовых орбиталей (7s3p), дополненный 6 орбиталями, центрированными на связи. Рассмотрены след. приближения: ограниченный метод Хартри—Фока (ОХФ), неограниченный метод ХФ (НХФ), спин-спроектированный метод НХФ (ПНХФ) и теория возмущений Мёллера—Плессета во 2-м порядке, построенная на орбиталях ОХФ и НХФ. Отмечено, что результаты приближений ОХФ и НХФ неверны даже качественно вследствие триплетной неустойчивости ур-ний Хартри—Фока вблизи положения равновесия молекулы. Наилучшая потенциальная кривая (с точки зрения качеств. поведения) получается в формализме ПНХФ.

А. В. Немухин

х. 1981
w 22, 19 AB

F₂

1981

номенк.
Кривая

96: 110437n Study of potential curves by UHF type methods. Potential curve of fluorine molecule. Klimo, Viliam; Tino, Jozef (Polymer Inst., Slovak Acad. Sci., 809 34 Bratislava, Czech.). *Collect. Czech. Chem. Commun.* 1981, 46(6), 1365-9 (Eng). The potential curve of the F₂ mol. was described by using the RHF, UHF, restricted and unrestricted Moller-Plesset, and projected UHF methods and compared with the exptl. one. Thus, the peculiarities of the various methods were revealed. The results suggest the direction of a further development of UHF type methods which would ensure a correct description of the given curve.

C. A. 1982, 96, N14.

F₂

1981

Koch S., et al.

итоги
расчета
сложн.

Theor. chem. acta, 1981,
59, N 4, 387 - 411.

( сис. Be₂ ; III)

F₂

1981

константа
скорости
прилипания
электрона

12 Д237. Константы скорости прилипания электро-
на к молекулам галогенов (F₂, Cl₂, Br₂, I₂) для сред-
них энергий от 10^{-2} до 10^2 эВ. Attachment rate coeffi-
cients of halogen molecules (F₂, Cl₂, Br₂, I₂) for mean
electron energies 10^{-2} to 10^2 eV. Курера М. В.,
Babić D. S., Belić D. S. «Chem. Phys.», 1981, 59,
№ 1—2, 125—136 (англ.)

Численные расчеты констант скорости прилипания
электронов со средней энергией 10^{-2} — 10^2 эВ к моле-
кулам галогенов выполнены для различных ф-ций рас-
пределения электронов по энергиям с использованием
эксперим. значений сечения прилипания. В случае F₂
основной вклад в константу скорости вносит прилипа-
ние медленных электронов. Для молекулы Cl₂ срав-

☑
(+3)

Ф. 1981, 18, N12.

нимый вклад в константу дают электроны с энергиями в окрестности 0; 2,80 и 4,84 эВ. Константа скорости для Br_2 медленно меняется в интервале энергий от 0,1 до 8 эВ. Прилипание электронов к J_2 наиболее эффективно при энергиях 1—4 эВ. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с эксперим. данными.

Е. Андреев

F₂

Оттиск 13723

1981

8 Д127. Вариационный метод ячеек в прикладных задачах квантовой механики: расчеты основных и возбужденных состояний молекул F₂ и Ne₂. The variational cellular method for quantum mechanical applications. Calculations of the ground and excited states of F₂ and Ne₂ molecules. Leite José R., Fazzio Adalberto, Lima Marco A. P., Dias A. M., Rosato Abel, Segre E. «Int. J. Quantum. Chem.», 1981, Quantum. Chem. Symp. № 15, 401—408 (англ.)

М.П.

Методом ячеек (вариант приближения Х α) рассчитаны потенц. кривые и спектроскопич. постоянные для основных и ряда возбужденных состояний молекул F₂ и Ne₂. Результаты расчетов находятся в согласии с данными, полученными достаточно строгими квантово-химич. методами и экспериментом. Используемый метод с этой точки зрения заметно превосходит другие варианты метода Х α .

В. И. Барановский

④ Ne₂
ср. 1982, 78, № 8.

F₂

13723

1981

15 Б31. Вариационный метод ячеек для квантовомеханических применений; расчеты основного и возбужденных состояний молекул F₂ и Ne₂. Leite José R., Fazzio Adalberto, Lima Marco A. P., Dias A. M., Rosato Abel, Segre E. The variational cellular method for quantum mechanical applications: calculations of the ground and excited states of F₂ and Ne₂ molecules. «Int. J. Quantum. Chem.», 1981, Quantum. Chem. Symp. № 15, 401—408 (англ.)

расчет м.п.

В рамках вариационного метода ячеек (ВМЯ) рассчитаны потенциальные кривые основного ($^1\Sigma_g^+$) и первых возбужденных ($^1\Pi_u$, $^1\Pi_g$) состояний молекулы F₂, а также основного ($^1\Sigma_g^+$) и первого возбужденного ($^1\Sigma_u^+$) состояний молекулы Ne₂. Метод основан на использовании вариационного принципа в рамках оригинального метода ячеек Вигнера—Зейтца. Вычисленные значения спектроскопических постоянных (в скобках — экспе-

⊗
④

X. 1982, 19, № 15.

прим. значения) для основного состояния F_2 составили:
 $R_e=2,68$ (2,68) ат. ед., $D_e=2,8$ (1,6) эВ, $\omega_e=906$
 (916,64) см^{-1} . Потенциальная кривая основного состоя-
 ния Ne_2 в расчете ВМЯ является полностью отталкива-
 тельной и не имеет вандерваальсового минимума. На
 потенциальной кривой возбужденного состояния $^1\Sigma_u^+$
 в Ne_2 имеется минимум при значении $R=2,47$ А. Вер-
 тикальная энергия возбуждения $T_e(^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1\Sigma_u^+)$ при
 $R=2,47$ А найдена равной 15,09 (16,58) эВ.

И. А. Тополь

F₂

(13723)

1981

meopem-
pacem

' 96: 110290j The variational cellular method for quantum mechanical applications: calculations of the ground and excited states of fluorine and neon molecules. Leite, Jose R.; Fazzio, Adalberto; Lima, Marco A.; Dias, A. M.; Rosato, Abel; Segre, E. (Inst. Fis., Univ. Sao Paulo, 20516 Sao Paulo, Brazil). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1981, 15, 401-8 (Eng). The variational cellular method (VCM) (L. M. Brescansin, et al., 1979; J. R. L., et al., 1979) was used to investigate the ground and excited electronic structures of the F₂ and Ne₂ mols. This work reports the first attempt to apply the VCM to the study of mol. excited states. The VCM gave potential-energy curves for these mols. with a good degree of phys. realism.

(+1) ☒

C. A. 1982, 96, N14.

F₂

[Ommick 13723]

1981

Leite J.R., et al.,

Ab. Mex.
pacificum

Int. J. Quantum. Chem.,
1981, Quantum. Chem.
Symp. N15, 1981., 401-408

F₂

Ommuck 13085

1981

Lievin J., Breulet J.,
et al.

Do;

Theor. chim. acta, 1981,
60, N4, ● 339-353.

F₂

Оттиск 12/92

1981

3 Д70. Теоретическое исследование молекулы F₂ с использованием вариационного метода ячеек. Theoretical study of the F₂ molecule using the variational cellular method. Lima Marco A. P., Leite Jose R., Fazzio Adalberto. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 16, L533—L535 (англ.)

Методом ячеек выполнены расчеты потенц. кривых (ПК) состояний $^1\Sigma_g^+$, $^1\Pi_g$ и $^1\Pi_u$ молекулы F₂. ПК основного состояния ($^1\Sigma_g^+$) характеризуется следующими параметрами (в скобках — эксперим. значения): $R_e = 1; 41 \text{ \AA}$ (1,41193); $D_e = 2,90 \text{ эВ}$ (1,66), $\omega_e = 906 \text{ см}^{-1}$ (916,64). ПК для состояний $^1\Pi_{u,g}$ носят отталкивательный характер.

В. И. Б.

расчет
м.п;

ф. 1982, 18, №3.

F₂

Ommuck 12192

1981

meopem.
pacem

! 95: 226064x Theoretical study of the fluorine molecule using the variational cellular method. Lima, Marco A. P.; Leite, Jose R.; Fazzio, Adalberto (Inst. Atividades Espaciais, Cent. Tec. Aerosp., 12200 Sao Jose, Brazil). *J. Phys. B* 1981, 14(16), L533-L535 (Eng). Variational cellular method (VCM) calcns. for F₂ were carried out at several internuclear distances. The ground- and excited-state potential curves are presented. The overall agreement between the VCM results and ab initio calcns. is fairly good.

C. A. 1981, 95, N26.

F₂

Sumner 11378

1981.

Liška M., et al.

un.

J. Mol. Struct., 1981,

72, 174 - 181.

F₂

Malli G. L.

1981

Relativistic Eff. Atom,
Mol., and Solids. Proc.

kb. uex. NATO Adv. Study Inst.,
Pacrem Vancouver, 10-21 Aug.,
uouekyu 1981. New York; London,
1983, 183-211.

(cr. H₂; III)

F₂

1981

Ae;

7 Б985. Энергетические потери и угловые распределения при столкновениях атомов щелочных металлов с молекулами фтора с образованием продуктов M^+ и F_2^- . Praxedes A. J. F., Moutinho A. M. C., Lachmann K. Energy loss and angular distributions in collisions of alkali atoms with fluorine molecules yielding $M^+ + F_2^-$. «VIII Int. Symp. Mol. Beams, Cannes, June 1—5, 1981». S. l., 1981, 236—238 (англ.)

В интервале энергий 20—120 эВ исследованы энергетич. потери и угловые распределения ионов, возникающих при столкновении атомов щел. металлов M ($M=Li, K, Cs$) с молекулами F_2 . Обсуждаются механизмы столкновения и оценено вертикальное электронное сродство молекул F_2 . — Е. Е. Никитин

Х. 1982, 19, №4.

F₂

[ammick 12099] 1981.

Stevie F.A., et al.

nonferit.
cereal
noncereal
Dit. yger

J. Chem. Phys., 1981,
74 (9), 5106-5110.

F_2

1982

9 Б45. Электронное строение молекулы F_2O_2 . Теоретические предсказания и сопоставление со строением молекул F_2 и F_2O . The structure of F_2O_2 . Theoretical predictions and comparisons with F_2 and F_2O . Ahlrichs R., Taylor P. R. «Chem. Phys.», 1982, 72, № 3, 287—292 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП с учетом и без учета конфигурац. взаимодействия (КВ) выполнены расчеты электронного и геометрич. строения молекул F_2 , F_2O и F_2O_2 . Все скоррелированные волновые функции получены в рамках приближения скоррелированных электронных пар, где учтены все одно- и двукратновозбужденные конфигурации со всех (СЭП-1) или высоколежащих (СЭП-2) валентных МО. Расчеты выполнены с использованием различных контрактированных наборов орбиталей Хузинаги — Даннинга от [4,2,1] до [6,4,2,1], т. е. с учетом не только d -, но и f -орбиталей. Первые две системы рассчитаны также с учетом всех одно- и двукратновозбужденных конфигу-

(+2) ☒

Х. 1983, 19, № 9

расчет геометр.
структур,
E

раций (кроме 1s). Показано, что для воспроизведения геометрич. параметров в F_2 и F_2O достаточно использовать базис [5,3,2,1] или [5,3,2]. Расчеты молекулы F_2O_2 хотя и привели к достаточно хорошему совпадению с эксперим. величинами всех геометрич. параметров, однако не дают простую интерпретацию необычной геометрии этой системы, в частности укороченной связи $O—O$. Отмечено, что более точные результаты как для геометрии, так и для энергетич. характеристик могут быть получены при более точном учете корреляц. энергии, напр., при использовании дэвидсоновских поправок, учитывающих более высокие возбуждения. Отмечена более быстрая сходимость процедуры СЭП-1 по сравнению с СЭП-2.

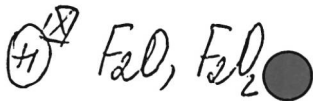
С. Долин

F₂

1982

98: 40957x The structure of dioxygen difluoride (F₂O₂): theoretical predictions and comparisons with molecular fluorine and fluorine oxide (F₂O). Ahlrichs, Reinhart; Taylor, Peter R. (Univ. Karlsruhe, D-7500 Karlsruhe, 1 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1982, 72(3), 287-92 (Eng). High-quality correlated wavefunctions were generated for the mols. F₂, F₂O and F₂O₂ and used to predict equil. structures. F₂ and F₂O serve as stds. for the F₂O₂ calcn., which predicts a geometry much closer to expt. than previous theor. studies. The very complicated correlation effects in these systems are discussed, but no simple explanation for the curious structure of F₂O₂ can be deduced.

вопрос.
Ф-иш,
структура



C. A. 1983, 98, N 6.

F₂

[Ommuck 14299] 1982

U. N.,
XU. N.
06936

Arco R., Robinson E. A.,

J. Phys. Chem., 1982, 86,
N6, 894-899.

F₂

1982

Baerends E. J., Post D.

pacrccii

Quantum Theory Chem.

w. n.,

React. Vol. 3. Dordrecht

Do.

e. e., 1982, 15-33.

(cur. C₄ ; III)

F₂

Ommuck 14270

1982

I.P.,

Ac, Her-
me bay-
by m. m.

Banerjee A, Mukherjee D;
et al.,

J. Chem. Phys., 1982,
76, ● N. 4, 1995-2002

F₂

Ommuck 14999

1982.

Becke A.D.,

Кв. мех.
расчет,
De, We, Ze,
M

J. Chem. Phys., 1982,
76, N12, 6037-6045.

F₂

1982

3 Д138. Энергии связи кластеров элементов в статистическом приближении. I. Гомоатомные кластеры непереходных элементов. Борисов Ю. А., Раевский Н. И. «Ж. структур. химии», 1982, 23, № 5, 10—15

Метод функционала плотности в простейшем статистич. приближении применен к расчету энергий связи гомоатомных молекул. Рассчитаны энергии связи двухатомных гомоатомных молекул I—V периодов таблицы Менделеева, кластеры углерода, серы и малые кластеры фосфора и мышьяка. Наблюдается качественное согласие рассчитанных энергий связи с эксперим. значениями. Резюме

Do

(15) 

сп. 1983, 18, № 3


ст. гин.

$Rb_2, N_2, P_2, As_2, I_2$



F2

[Ommuck 13560]

1982

Carsky P., Hubac J., et al

конеч.,
Кв. Алл.
расчет

Theor. Chim. acta, 1982,
60, N 5, 445 - 450.

F₂

1982

Chong Delario P.,
Langhoff Stephen R.

J;
Chem. Phys., 1982, 67,
N2, 153-159.

●
(cc. N₂; III)

F₂

Оттиск 13442

1982

спектр
флуоресц.

18 Б1208. Двухатомные интергалогидные молекулы для лазеров. Флуоресцентная спектроскопия и кинетика реакций. Diegelmann M., Hohla K., Rebentrost F., Kompa K. L. Diatomic interhalogen laser molecules. Fluorescence spectroscopy and reaction kinetics. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 3, 1233—1247 (англ.)

Исследованы спектры флуоресценции (Фл) двухатомных галогеновых молекул в переходе $D'(^3\Pi_{2g}) \rightarrow A'(^3\Pi_{2u})$, возбуждаемые короткими импульсами (2 нс) быстрых электронов (максим. энергия 600 кэВ) в смесях большого избытка благородного газа с небольшим кол-вом X_2 ($X=F, Cl, Br, I$) или молекул X_2 различных типов (полное давл. до ~ 20 бар). С исполь-

(X)
(79)

X. 1982, 19, N 18



зованием потенциала Риттнера для верхнего состояния $D'(^3\Pi_{2g})$ с ионной связью проведены расчеты молек. параметров молекул галогенов в этом состоянии — энергии диссоциации, равновесного межъядерного расстояния, нулевой колебательной частоты, а также длин волн флуоресцентного излучения. Получено хорошее согласие расчетных и эксперим. длин волн Фл. В экспериментах найдены след. значения длин волн Фл (нм): F_2 157,63; Cl_2 257,73; Br_2 292,0; J_2 342,4; ClF 28,41; $BrCl$ 314,2; BrF 354,33; IBr 385,7; ICl 431,29; IF 490,81. Предложена след. общая схема образования электронно-возбужденных молекул $X_2^*(D'^3\Pi_{2g})$ в смесях. Энергия, поглощенная газовой смесью, сначала локализуется в возбужденных и ионизованных атомах благородного газа $[(R^*(^3P_{0,2}) \text{ или } R^+)]$. Следующая стадия состоит в тройном соударении с образованием эксимера R_2^* или молек. иона R_2^+ . Кроме того, возбужденный атом R^* может непосредственно участвовать в гарпунной р-ции с молекулой — донором галогена типа MX с образованием галогенида благородного газа RX^* . В такой же р-ции могут участвовать и R_2^* , и R_2^+ . Далее происходит преддиссоциация $RX^* \rightarrow R + X^*$, причем благородный газ R может быть подобран так, что преддиссоциация будет протекать быстрее излучательной дезактивации RX^* . Образующийся возбужденный атом X^* может находиться в различных состояниях возбуждения, к-рые быстро переходят в низшие возбужденные состояния систем 2P и 4P . Далее эти атомы вступают в р-цию обмена $X^* + X_2 \rightarrow X_2^* + X$, давая возбужденную молекулу X_2^* , ответственную за наблюдаемую Фл. Эффективное излучательное время жизни атомов $X(^2,^4P)$ в системе повышено из-за эффекта пленения их резонансного излучения (переходы в дублетное основное состояние $^2P_{3/2, 1/2}$), что способствует достижению инверсии населенностей уровней перехода $D' \rightarrow A'$, к-рая поддерживается также быстрой колебательной релаксацией нижнего A' -состояния или же индуцированной столкновениями диссоциацией этого состояния (напр., в случае F_2^* энергия связи нижнего A' -состояния равна всего 0,1 эВ). Для F_2 , Cl_2 и J_2 проведены эксперименты по изучению кинетики изменения Фл, в к-рых определены кинетич. параметры принятой схемы р-ций: $X^* \rightarrow X + h\nu(\tau_1)$; $X^* + MX \rightarrow X_2^* + M(k_1)$; $X_2^* \rightarrow X_2^* + h\nu(\tau_2)$; $X_2 + Q \rightarrow \text{продукты}(k_2)$ при давл. буферного газа He 20 бар. При $X = F, Cl$ и J соотв. получены след. значения τ_1 (нс): 134 ± 5 ; $100 - 200$, —; k_1 (10^{-10} см³/молекула·с) $7,7 \pm 0,7$ (при $M = F$); $6,1$ (давл. He 3,5 бар) или $4,3$; $3,5$ ($M = C_3F_7$) (для смеси $Ag - C_3F_7J$ при давл. 6 бар); τ_2 (нс) $3,7 \pm 0,2$; $120,4$ (5 бар He) или $113,7$ (чистый Cl_2); $14,7 \pm 1,5$ (возбуждение электронным ударом паров J_2 при давл. 0,3 мбар); k_2 (10^{-10} см³/молекула·с) $8,8$; $9,4$ (5 бар He) или $7,6$ (чистый Cl_2); —. Аномально большое значение τ_2 для Cl_2^* объяснено тем, что верхнее состояние расщеплено на несколько уровней различной симметрии и излучательное состояние $^3\Pi_{2g}$ заселяется при столкновениях в переходах из соседних состояний, так что наблюдаемое τ_2 фактически представляет собой время релаксации между этими соседними состояниями. С этим эффектом могут быть связаны трудности с получением лазерной генерации Cl_2 при 258 нм. Обсуждаются особенности лазерных систем на интергалонидных молекулах.

В. Е. Скурат

F₂

отт. 13442

1982

7 Д632. Лазерные молекулы двухатомных интергалогенов. Флуоресцентная спектроскопия и реакционная кинетика. Diatomic interhalogen laser molecules. Fluorescence spectroscopy and reaction kinetics. Diegelmann M., Hohla K., Rebentrost F., Kompa K. L. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 3, 1233—1247 (англ.)

Исследована флуоресценция, возбуждаемая в смесях галогенсодержащих молекул и инертных газов коротким импульсом высокоэнергетич. электронов. В спектрах флуоресценции наблюдались переходы $D'-A'$ молекул F₂, Cl₂, ClF, JCl, JF, JBr, BrCl, BrF. Длины волн излучения, рассчитанные в рамках простейшей модели, хорошо согласуются с экспериментом. Проанализированы процессы, ответственные за возбуждение верхних уровней. Основной реакцией, обуславливающей всю кинетич. схему, является реакция $X^* + RX \rightarrow X_2^* + R$. Кинетика флуоресценции хорошо описывается в рамках предложенной схемы реакций. На базе полученных результатов выполнены успешные лазерные эксперименты с некоторыми молекулами интергалогенов. Библ. 55.

В. С. Иванов

спектр

⊠
(+7)

ф. 1982, 18, № 7

F₂

1982

England Walter. B.
Int. J. Quantum. Chem.,
1983, 23, N3: Proc. 4th Int.
Congr. Quantum Chem.,
Uppsala, 13-20, June 1982.
Contrib. ● Pap., Pt 3, 905-
-914. (cell. H₂; III)

расчёты
потенц.
кривых.

F₂

Оттиск 14329

1982

22 Б189. Уточненные вращательные постоянные фтора $^{19}\text{F}_2$, полученные методом когерентной антистоксовой спектроскопии комбинационного рассеяния колебательной Q-ветви. Gilson T. R., Purnell M. R. Improved rotational constants for fluorine $^{19}\text{F}_2$ using coherent anti-Stokes Raman spectroscopy of the vibrational Q branch. «J. Raman Spectrosc.», 1982, 12, № 3, 222—223 (англ.)

М.П.

Изучена вращательная структура Q-ветви основной колебательной полосы ($v=0-1$, $\nu=890\text{ см}^{-1}$) в спектре КАРС газ. $^{19}\text{F}_2$ (I). Спектры регистрировались при плотностях 0,1—0,25 амага и т-ре 25° и 120°, разрешение на спектрах $\sim 0,15\text{ см}^{-1}$. Уточнено положение центра Q-полосы ($\nu=892,02\text{ см}^{-1}$), а также значения вращательных постоянных B_0 , B_1 , D_0 , D_1 и равновесного расстояния r_e ($r_e=1,41426\pm 0,00004\text{ А}$). Эксперим. спектр КАРС сопоставлен с теоретически рассчитанным.
А. В. Бобров

Х. 1982, 19, N22,

F₂

Ommuck 14329

1982

(CKP)

M.N.

97: 82017a Improved rotational constants for fluorine $^{19}\text{F}_2$ using coherent anti-Stokes Raman spectroscopy of the vibrational Q branch. Gilson, T. R.; Purnell, M. R. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, UK SO9 5NH). *J. Raman Spectrosc.* 1982, 12(3), 222-3 (Eng). A coherent anti-Stokes Raman spectroscopy spectrum of the resolved Q branch of the fundamental $\nu = 0-1$ vibration for $^{19}\text{F}_2$ was obtained. The Q branch spectroscopic consts. are $(-\alpha_0) = -0.012972 \pm 0.000007 \text{ cm}^{-1}$ and $(\pm\beta_0) = -(8 \pm 1) \times 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$. These are used to derive new values for the equil. and the $\nu = 1$ rotational consts., and lead to an improved est. for $r_e = 1.41426 \pm 0.00004 \text{ \AA}$.

C.A. 1982, 97, N10

F₂

Оттиск 14329

1982

12 Д1759. Уточнение вращательных констант фтора ¹⁹F₂ с использованием когерентной антистоксовой спектроскопии комбинационного рассеяния в области колебательной ветви Q. Improved rotational constants for fluorine ¹⁹F₂ using coherent anti-Stokes Raman spectroscopy of the vibrational Q branch. Gilson T. R., Purnell M. R. «J. Raman Spectrosc.», 1982, 12, № 3, 222—223 (англ.)

М. П.

Получены спектры когерентного антистоксовского комб. рас. газообразного фтора при комнатной т-ре и 20°С при плотностях 0,25—1 амага в области ветви Q основной колебательно-вращательной полосы F₂ с разрешением 0,15 см⁻¹. Начиная с линии Q(7) наблюдается дискретная вращательная структура. Измерены частоты линий и определены постоянные колебательно-вращательного взаимодействия α_0 и β_0 . Уточнены значения вращательных постоянных B_0 и B_1 и равновесного расстояния r_e молекулы F₂.

М. В. Т.

сп. 1982, 18, № 12

F₂

1982

Gleghorn John Tyler
McConkey Frederick
William.

pacrue vi,

re

Theor. chim. acta,
1982, 61, N3, 283-293.

(see. BF; III)

F₂

1982

Gropen O., Wisloff-Nils-
sen E.

номмер,
ссылка,
4 Н.

J. Mol. Struct., 1982,
88, N 3-4, Suppl.:
Theochem, 5, N 3-4.
● 243-248.
(ср. ClF₃; III)

F₂

1982

Кв. мех.
рогачей

Тусеев У. У., Усенов
Э. М. и др.

Азерб. ун-т. Баку, 1982,
15с. Библиогр. 6 л. экз. (Рук.
ден. в ВИНТИ 19 июля 1982;
N 3855 - 82 Den).

(см. Ли 2; III)

F₂

[о.н. 13721]

1982

Vi

Спектр,
Ридберга.

Ср. 1982, 18, №8.

8 Д527. Экспериментальное и теоретическое изучение дипольных спектров возбуждения валентных оболочек молекулярного фтора. Experimental and theoretical studies of the valence-shell dipole excitation spectrum of molecular fluorine. Hitchcock A. P., Brion C. E., Williams G. R. J., Langhoff P. W. «Chem. Phys.», 1982, 66, № 3, 435—442 (англ.)

В области 10—42 эВ с энергетич. разрешением 60 МэВ исследованы спектры энергетич. потерь электронов в парах F₂ (I) при возбуждении электронами с энергией 2,5 кВ. В области 12—16 эВ зарегистрирован ряд интенсивных полос. При помощи расчетов в приближении случайных фаз с обменом показано, что наблюдаемые полосы соответствуют ридберговским переходам $1\pi_g \rightarrow n\pi_u$. Установлено, что нерегулярность в серии малоинтенсивных переходов $X \rightarrow {}^1\Pi_u$ связана с конфигурационным взаимодействием состояний, возникающих при переходах $1\pi_g \rightarrow n\pi_u$ и $1\pi_u \rightarrow n\sigma_g$. Проведено сравнение полученных данных с ВУФ-спектром I, полученным в работе (Colbourn E. A. et al. «Can. J. Phys.», 1976, 54, 1343). Библ. 30.

Ю. В. Чижов

F₂

05. 13721

1982

CNEKmp

96: 190138d Experimental and theoretical studies of the valence-shell dipole excitation spectrum of molecular fluorine. Hitchcock, A. P.; Brion, C. E.; Williams, G. R. J.; Langhoff, P. W. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, ON Can. L8S 4M1). *Chem. Phys.* 1982, 66(3), 435-42 (Eng). Electron energy-loss measurements and concomitant RPA=with-exchange (RPAE) calcns. are reported of the valence-shell dipole excitation spectrum of mol. F. The measured spectrum is dominated by a series of strong features in the 12-16 eV interval which are in accord with $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1\Sigma_u^+$ bands assigned in a previously reported high-resoln. optical study. These features are attributed on basis of the present RPAE calcns. to configuration mixing between $1\pi_g \rightarrow np\pi_u$ Rydberg and $3\sigma_g \rightarrow 3\sigma_u$ intravalence excitations. A depleted $X \rightarrow V_\sigma$ charge-transfer excitation is correspondingly obsd. at ≈ 17 eV, in good accord with the calcd. values. The appearance of the $\sigma \rightarrow \sigma^*$ transition in F₂ below the $3\sigma_g^{-1}$ threshold is in marked contrast to the situation in other light diat. mols., in which cases $\sigma \rightarrow \sigma^*$ transitions appear as

C.A. 1982, 96, 22

intravalence shape resonances in photoionization continua. Assignments are also provided of weak, irregularly spaced $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1\Pi_u$ excitations the origins of which are attributed to configuration mixing between $1\pi_g \rightarrow np\sigma_u$ and $1\pi_u \rightarrow ns\sigma_g$ Rydberg series.

F₂

1982

Prerem

Vi

Hout Robert F., Levi
Beverly A., et al.

J. Comput. Chem.,
1982, 3, 12, 234-250.

(ex. H₂; III)

F₂

[Om. 16287]

1982

Kello V.,

кривые

потенц.

энергии,

спектроск.

константы

Chem. zvesti 1982, 36(3),
289-299.



F₂

Malli G. L.

1982

pacien
E;

Curr. Aspects Quantum
chem., 1981. Proc. Int. Conf.
and Workshop, Barcelona,
28 Sept. - 3 Oct., 1981. Amster-
dam e.a., 1982, 199-218.

(Cur. Li₂; III)

F₂

[Dmmuck 13985]

1982

March N.H., Mucci J. F.,

Жерние
свела,
кб. мех-
раств

Phys. Lett., 1982, A 88,
N 7, 348-349.

F_2, F_2^+

1982

Mc Lear A.D., Lin B.,
et al.

lv. mex.
pacrim

Moment Wale Funct, 2
Meet, Adelaide, 18-24
Febr., 1982. New York,
1982, 90-100.



(ex. B2)

F₂

1982

McC Master Blair N.,

расчёт Smith Vedene H., et al.

электрон. Mol. Phys., 1982, 46,

плотностей. N3, 449-463.

●
(сер. C₂, III)

F₂

1982

Ohwada Ken.

расшир.
сер. ноев
и т.

J. Chem. Phys., 1982,
77, N 1, 424-428.

(сер. BeB; III)

F2

Ommuck 16283

1982

Painter G. S., Averill F.W.,

2 Hepzib
06834

Phys. Rev. B. Condens.
Matter, 1982, 26, N4,
781-790.

F₂

1982

Robb M. A.

Mol. Struct. and

структурн.
параметры.

Conform. Amsterdam
e. a., 1982,
156-189.

(см. H₂; III)