

CF CF⁺

CF⁻

CF²⁺

980-IV

1950

CF (non. noctuognite)

Andrews E.B., Barrows R.F.

Mature, 1950, 165, 890.

Ultra violet band systems of
CF.

W

CA, 1950, 44, 9798h ✓

CF (ω , B)

981-IV

1951

Andrews E.B., Barrow R.F.

Proc. Phys. Soc. (London) 1951, 64A, 481-92

"The band spectrum of carbon monofluoride, CF"

C.A., 1952, 99816

CP

Durie R.A.,

1952

Proc. Phys. Soc., L, A, 65, 125, 1952

X

Shut
system

CF

1955

Mann D. B. beside H. F.
Squires C. E.

J. Chem. Phys. 21, 1952.

CF_4 в $CF_4 + H_2 + O_2$ плазме

В центре излучения плазмы
Рядом с ней — рисунок точек
(1,0) (0,0) ($\frac{1}{2}$) (0,2) и (0,3)

[illegible]

Pabnohe

~~ca~~ c yae-
then CF u
CF₂

Margrave Y.L., Wieland K. Yell Ph, 21, 1952 | 1953

Кебог Бѣмъ

CF₄ в

H₂+O₂ и

2H₂+O₂

пламякор.

J.E. Mann, H.P. Broida, B.E. Squires (1954)

J. Ch. Ph., 22, 348-9. 1954.

Разложение CF₄ в пламякор.

Испыз. смесь C₂H₂-O₂ и H₂-O₂
пламен в присутствии CF₄.

В C₂H₂+O₂ пламени находят
в H₂+O₂ пламени по
наличию CF₄ ; а также SiO, SiH₄ и C₂F₆

Гурвич IV, 18

Край горсти - нормировать после
несколько часов работы с
добавками.

BBr

CF

S.S. Miron

1954

J. Ch. Ph. 22, 2097-8.

Слов. посг. галогенидов I и V г.

BBr - $2.044 \cdot 10^5$ гун/см

BBr₂ - $2.666 \cdot 10^5$

AlJ - 1,310

GaJ - 1,232

InJ - 1,114

CF - 9,268

CF₂ - 3,349

SiJ - 1,707

GeJ - 1,605

SuJ - 1,451

CA 49, 35866.

CF

Varshni Y.P.,
Majumdar K.

1955

Секундопропуск. посто-
янное мат-л.

(Cu. SiO) III

интер. хим. прак. № 174. 1958

С.Ф.

промежут. отчет за III кв.

М.П.

по теме Стратегический
исследованиям молекуляр.
поверх. и эн. диссоц.

отв. учен. Руденко А.Ф.

СН

Кузьяков Ю.Я., Татевский В.М. ⁽¹⁹⁵⁸⁾

Изв. и Силезия, 5, в.6., 699, 1958.

До(СН) < 5,826.

Новые данные по молекулам СН

Применяя более точные методы измерения
разряда через зондирование СН, удалось
уменьшить неопределенность. Новые СН₂ и
измерено количество СН₄ новое СН, кабу.
Эксперимент и Баррел, еще 3 новое.
измерено АЧ-ХП Рассчитаны
новые данные новые наблюдения

586-11

колеб. (0,2) (0,3) (0,4) (0,5) (0,6) (1,4) (1,5) (1,6) (1,7)
 Рассг. знач. должно согласоваться с квант. измерениями.
 По колеб. пещ. энерг. ч. Барроу
 до возб. правильного колеб. функции
 Проведение измерения зонной структуры
 (0,2) и (0,3) колеб. даны $B_2'' = 1,36 \text{ см}^{-1}$
 и $B_3'' = 1,34 \text{ см}^{-1}$. Внутренние переходы с $\nu' = 2$
 позволяя предположить наличие предминирующей
 между колеб. уровнями $\nu' = 1$ и $\nu' = 2$ состояний
 $A^2\Sigma$. В зоне Сауге (●) верхняя граница
 энергии диссоциации (ан. состояние мал. CF)
 не вошла превысило 5,8 эВ.

CF⁺

1961

New spectrum of CF⁺. R. D. Verma (Univ. of Chicago).
Can. J. Phys. 39, 1377-83(1961).—A spectrum ($A^1\Pi$
— $X^1\Sigma^+$) of CF⁺ was obtained for the 1st time in the region
2025-1900 Å. The rotational and the vibrational analyses
are given. The principal consts. of the 2 states as evaluated
are given in cm.⁻¹, except for r_e , which is in Å. T_e , ω_e ,
 $\omega_e x_e$, B_e , a_e , and r_e are, resp.: $^1\Sigma^+$, 0, 1402.18, 11.807, 1.5172,
0.01877, 1.2290; $^1\Pi$, 51157.08, 1266.77, 13.3, 1.4239,
0.01945, 1.2686.
P. M. B.

B9-11-982

C.A. 1961.55.25

25461 d

CF⁺

Спектр

[бор - 982-15]

[1961]

4 В99. Новая область спектра CF⁺. Verma R. D.
New spectrum of CF⁺. «Canad. J. Phys.», 1961, 39, № 9,
1377—1383 (англ.)

Спектр перехода ($A^1\Pi - X^1\Sigma^+$) CF⁺ излучения высоко-
частотного разряда в CF₄ с He получен впервые в об-
ласти 2025—1900 Å. Произведены колебательный и вра-
щательный анализы. Приводится краткое обсуждение
электронных конфигураций.

РЖФ 1962

4В99

1962

CF⁺CCl⁺

BF

BCl

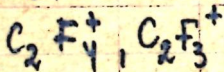
УФ спектр

7 Д169. Замечание по поводу спектров, приписанных CF⁺ и CCl⁺. Verma R. D. Note on the spectra attributed to CF⁺ and CCl⁺. «Canad. J. Phys.», 1962, 40, № 12, 1852 (англ.)

Установлено, что сообщение о спектрах CF⁺ и CCl⁺ (РЖФиз, 1962, 4В99; 5В126) следует считать ошибочным, т. к. наблюдаемый спектр является спектром BF и BCl (источником В мог служить пирекс в разрядной трубке).

ф. 1963-7

1963



(A.P.)

1 Ionization and dissociation of hexafluoropropylene by electrons of various energy. F. N. Chelobov, S. S. Dubov, M. V. Tikhomorov, and M. I. Dobrovitskii. *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 151(3), 631-3(1963). Relative effectiveness of ionization of mol. ions from electron bombardment of hexafluoropropylene were studied at 10-170 e.v. by a mass spectrometer (2500 v., 0.8 ma.). Appearance potentials of each ion ($C_3F_8^+$ 10.3 $\pm$ 0.2 e.v., $C_3F_8^+$ 14.8 $\pm$ 0.3 e.v., $C_2F_4^+$ 12.5 $\pm$ 0.1 e.v., $C_2F_3^+$ 16.1 $\pm$ 0.2 e.v., CF_3^+ 15.0 $\pm$ 0.1 e.v.) and activation energies ($C_3F_8^+$ 4.5 e.v., $C_2F_4^+$ 2.2 e.v., CF_3^+ 7.7 e.v.) were obtained. Mechanism of formation of $C_2F_4^+$ at such a low activation energy was discussed. Metastable ionic transition was investigated. Toyo Tanaka

C.A. 1963. 59. 13

14682g

1963

Bq - 9117-IV

CF

CF₂(D₀)

Wegman

} Predissociation in the absorption spectra of CF and CF₂.
 B. A. Thrush and J. J. Zwolenik (Univ. Cambridge, Engl.).
Trans. Faraday Soc. 59, 582-7(1963). Strong transient absorption spectra of CF and CF₂ were observed after passage of a d.c. pulse discharge through fluorocarbon vapors. The $A^2\Sigma^+ - X^2\pi$ system of CF seen in absorption reached a max. in about 20 μ sec., and the decay was observed for 50 μ sec.; then the spectral region was covered by continuous absorption. Very intense absorption spectra of CF₂ were observed, decaying over a period of about 4-10 msec., depending on the parent and its pressure. No absorption attributable to CF₂ was detected, 2100-5200 Å. Predissocns. in these spectra give $D(C-F) \leq 132$ and $D(CF-F) \leq 120$ kcal./mole; thermochem. and other spectroscopic data suggested that $D(C-F) \sim 110$ and $D(CF-F) \sim 120$ kcal./mole
 Victor R. Deitz

C.A. 1963.59.6

5950 d

20 Б40. Предиссоциация в спектрах поглощения CF и CF₂. Thrush B. A., Zwolenik J. J. Predissociation in the absorption spectra of CF and CF₂. «Trans. Faraday Soc.», 1963, 59, № 3, 582—587 (англ.)

В спектре молекулы CF, возбужденной мощным импульсным разрядом в парах перфторметилциклогексана, наряду с полосами 0—0 и 1—0 обнаружена полоса 2—0, что свидетельствует о наличии предиссоциации на $v' = 2$ в спектре испускания CF. Это приводит к верхнему пределу энергии диссоциации $D(C-F) \leq 132$ ккал/моль. Найдены следующие значения постоянных в состоянии $A^2\Sigma^+$ (в см⁻¹): $v_e = 42693$, $\omega_e' = 1779$ и $\omega_e x_e' = 29,8$. При использовании $n-C_5F_{12}$ в аналогичных условиях получена система полос, относящаяся к электронному переходу CF₂. Наличие предиссоциации в спектре CF₂ свидетельствует о том, что $D(CF-F) \leq 120$ ккал/моль. Найдены значения основной частоты ν_2 молекулы CF₂ в нижнем (672 ± 10 см⁻¹) и верхнем (495 ± 7 см⁻¹) состояниях. Полученные данные дают согласованную систему значений (в ккал/моль) $D(C-F) = 110$, $D(CF-F) = 120$ и $\Delta H_f(CF_2, \text{газ}) = -24$, а также $D(CF_2-F) = 110$ при условии $D(CF_3-F) = 122$.

В. Юнгман

x. 1963. 20

1963

71-7116-68

(+1) I



1964

CF

(20)

Кузнецов Ю.Я. Овражен

Шуря, Дусеппа Гем

(CF) CF₂

CH₂F

CF₂H

CF₃

+4

2.1966.12

12 Б64. Потенциалы появления и масс-спектры фторированных этиленов. II. Теплоты образования фторидов и их положительных ионов. Lifshitz Chava, Long F. A. Appearance potentials and mass spectra of fluorinated ethylenes. II. Heats of formation of fluorinated species and their positive ions. «J. Phys. Chem.», 1965, 69, № 11, 3731—3736 (англ.)

Зарегистрированы масс-спектры фторированных этиленов, а также спектры фторированных метана и этана. Определены потенциалы появления (ПП) осколочных ионов. По ПП с использованием известных термодим. данных рассчитаны теплоты образования радикалов и ионов, образующихся при диссоциативной ионизации. Произведена оценка макс. значений потенциалов ионизации нек-рых радикалов: CF —9,6, CF₂ —11,7, CH₂F —9,4, CF₂H —8,9, CF₃ —9,1 эв. Сообщение I см. РЖХим, 1964. 24Б54. М. Митцев

1965

11-2927a-17
Bp-2927a-17
Bp



CF

Вср - м 319 - IV

1965

спектр

5 Д254. Спектр излучения CF. Porter T. L., Mann D. E., Acquista N. Emission spectrum of CF. «J. Molec. Spectrosc.», 1965, 16, № 2, 228—263 (англ.)

В области 2190—2965 Å исследована при высоком разрешении система $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ в спектре испускания CF и проанализирована вращательная структура 18 полос системы. Определены колебательные и вращательные константы для уровней вплоть до $v'=1$ и $v''=9$. Спектр CF возбуждался с помощью безэлектродного разряда в потоке смеси C_4F_8/Ar и регистрировался спектрографом с дисперсией 0,75 Å/мм. Энергия диссоциации состояния $X^2\Pi$, найденная экстраполяцией, составляет $5,50 \pm 0,10$ эв.

В. Лодин

н. 1966.5

Emission spectrum of CF. T. L. Porter, D. E. Mann, and N. Acquista (Nat. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Mol. Spectry.* 16(2), 228-63(1965)(Eng). The $A^2\Sigma^+-X^2\Pi$ system of CF was investigated with high dispersion, 2190-2965 Å., and the rotational structure of 18 bands analyzed. Vibrational and rotational consts. were detd. for levels up to $v' = 1$ and $v'' = 9$. The rotational analysis was carried out in part with the help of a digital computer program which searched wave-no. lists for rotational branches. A consideration of potential curves and dissoch. energies indicates that, in the 1st approxn., the potential curve of the stable A state is crossed by a repulsive curve of the same symmetry. However, application of the noncrossing rule results in the formation of 2 stable excited states. The lower state, which is the $A^2\Sigma^+$ state, must, therefore, have a potential max. which can be located just above $v' = 2$ and must undergo rotational predissocn. The other state can be identified as the previously known B state, also with $^2\Sigma^+$ character. The ground-state dissoch. energy is found by extrapolation to be 5.50 ± 0.10 ev.; this, in turn, leads to an estimate of 2.06 ± 0.10 ev. for the $B^2\Sigma^+$ state.

RCKP

1965

Ref - 4319-11

CF

Chen

20

Ref - 4319-11

C. A. 1965.63.3

25396

CF

Porter T.L.

1965

Mann D.E., Dequista N.,

J. Mol. Spectry, 1965, 16, 228-263

Emission Spectrum of CF.

2190-2965. $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$

18 wave-lengths
brans. sp.

$v' \leq 1$, $v'' \leq 9$.

Brans. long. 
manus.

Brans. - M 319 - IV

Brans. - M 319 - IV

B9-17 - 11-219

C.F.

Parber T.L. & sp. (2.) 1965
J. Mol. Sp. 1965, 16, 228-263.

CF.	$A^2 \Sigma^+$	$\chi^2 \Pi$
коэф. упрощения	2	10
Be	$1,22486 \pm 0,00010$	$1,41720 \pm 0,00010$
de	$0,02445 \pm 0,00010$	$0,01840 \pm 0,00010$
ge	—	$0,00011 \pm 0,00009$
$A_2(\text{red})$	$\sim 6,65 \cdot 10^{-6}$	$\sim 6,5 \cdot 10^{-6}$
Be	$\sim 0,30 \cdot 10^{-6}$	6) $\cdot 6$
$D_2(\text{red} + \text{calc.})$	—	$6,65 \cdot 10^{-6}$
Ze(A)	$1,1482 \pm 0,0001$	$1,2667 \pm 0,0002$
$\Delta G_{1/2}$	$1718,99 \pm 0,01$	$1286,20 \pm 0,07$
we	—	$1308,1 \pm 0,1$
wex	—	$11,10 \pm 0,05$
wcy	—	$0,093 \pm 0,005$
wze	—	$-0,0011 \pm 0,0002$
As	—	$77,11 \pm 0,01$
De(diss)	—	44400 ± 1000
		$5,5026 \pm 0,1026$

CF ~~Kessel~~ James E. Kessel Kurt. 1966
J. Chem. Phys., 25, No. 3, 3149.

Работа выполнена в соответствии
с программой исследований
ВУЗ-Одесского.

1000 III

CF

Marsigny L.,

1966

Ferran Z.

CF⁺

C. r. Acad. sci., C 263,
N 2, 109.

Исследование спектров фтор-
производных углеводородов
в электрическом разряде

де высокого напряжения.
и снм.

(снм. HF)

CF +

Marsigny L.,
Ferran J.

1966

C. r. Acad. sci., C263, n 2,
109.

Исследование свойств
фтор-производных углеводо-
родов в электричес-

Кем разряде высоко-
го напряжения.

(см. НТ)

1967

CF

XIV
177-81-89

(м.и.)

1 Д258. Вращательные постоянные «В»-состояния молекулы CF. Узиков А. Н., Кузьяков Ю. Я. «Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1967, № 3, 22—26.

Выполнен анализ вращательной структуры колебательных полос 1—0 и 2—1 электронного перехода $B-X^2\Pi$ (a) молекулы CF. Анализ проведен при предположении, что состояние В является $^2\Sigma$ -состоянием, хотя не исключено, что оно может быть $^2\Delta$ (b). Определены значения вращательной постоянной колебательных уровней $v=1$ и $v=2$ верхнего электронного уровня $B_1' = 1,28810 \pm 0,00007 \text{ см}^{-1}$, $B_2' = 1,25937 \pm 0,00026 \text{ см}^{-1}$ и равновесные значения $B_e = 1,33118 \pm 0,00040 \text{ см}^{-1}$, $\alpha_e = 0,02873 \pm 0,00033 \text{ см}^{-1}$ и $r_e = 1,3124 \text{ \AA}$. Для получения исследуемой системы полос применялся импульсный разряд через пары CF_4 в трубке Шюллера. Спектры фотографировались с помощью спектрографа ДФС-5.

09. 1968. 12

CF

Bp-8177-XIV

1967

Curep

(Bpauz. nēg)

100367x Rotational constants of the B state of the carbon-fluorine molecule. A. N. Uzikov and Yu. Ya. Kuzyakov. *Vestn. Mosk. Univ., Ser. II.* 22(3), 22-6(1967)(Russ). The rotational structure was analyzed of the 1-0 and 2-1 bands of $B-X^2\Pi$ (a) transition of the CF mol. The mol. const. of the B state are (in cm^{-1}): $B_e' = 1.28810 \pm 0.00007$, $B'_{v-2} = 1.25937 \pm 0.00026$, $B_e = 1.33118 \pm 0.00040$, $\alpha_e = 0.02873 \pm 0.00032$, and $r_e = 1.3124 \text{ \AA}$.
D. Papousek

C.A. 1968-68.22

70303.2638

Ph, Ch

 $\{CF, CF_2\}$ s. Hf
40882

4478a) XIV

Wentink Tunis, Jr, Isaacson Louis. Oscillator strengths of CF and comments on heats of formation of CF and CF₂. "J.Chem.Phys.", 1967, 46, N 2, 603-605 (англ.)

CF

BQ - A 1158

1968

Empidonax P.

all.

10cm.

Theor. chim Acta 1968,

10(4) 331-6

CF

1968

J. D.

Substance 1001

J.W.Hastie J.B.Margrave

"Dep. of Chem., Rice

University Houston, Texas 77001.

p I-50.

СР

1968

Кузнецов В. Д.

Д.

Вестн. №24, Москва,
№3, 21-24.

Определение термий
диссипации кинетиче-
ских процессов монохроматиче-
ского излучения. (И. С. С. С.) III

$\Delta H_f (F_2, CF, CF_3, CF_4)$

$\Delta_{298}^0 (CF, CF-F; CF_2-F; CF_3-F)$
 $\Delta H (C_2F_4; CF_2)$

Embo ~~W~~ K.F., Uy O.H., Margra-
ve J.L., J. Amer. Chem. Soc.,
1968, 90, N19, 5090-92

C-F

[BP-8361-XIV]

1969

(Do)

Ehlers T.C.

J. Phys. Chem. 1969, 73,
N 4, 949-53

CF

1969

спектр в
матрице

-) 1 Б219. Фотолиз фтористого метила в матрице под действием вакуумного ультрафиолетового света. Инфракрасные спектры свободных радикалов CF, HCF и H₂CF. Jacob Marilyn E., Milligan Dolphus E. Matrix-isolation study of the vacuum-ultraviolet photolysis of methyl fluoride. The infrared spectra of the free radicals CF, HCF, and H₂CF. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 8, 3252—3262 (англ.)

Проведен фотолиз CH₃F в матрицах из Ag и N₂ при 14° K. Наблюдалось образование HCF из продуктов фотолиза и др. р-ции в матрице. Исследованы спектры поглощения матрицы в областях 1800—5800 Å и 400—4000 см⁻¹. Подтверждены предполагавшиеся ранее ос-

+3

2. 1970. 1

X

новные состояния молекул CF и HCF . При нек-рых дополнительных предположениях получен набор силовых постоянных для HCF и вычислены термодинамические свойства HCF от 273 до 1500° К. Выполнено частичное отнесение наблюдаемых колебательных частот H_2CF . Определены основные частоты вал. кол. CF в HCF (1182 см^{-1}) и в H_2CF (1163 см^{-1}). Исследованы образцы в-в, обогащенных дейтерием и изотопом C^{13} .

Д. И. Катаев

С.Ф.

1969

Зуров А.И.

Авторегистрация К.Д.И., 1969

М.И.

М.И.У.

CF

(7)

4 Д239. Масс-спектрометрическое исследование фотоионизации C_2F_4 и CF_4 . Walter T. A., Lifshitz C., Chupka W. A., Berkowitz J. Mass-spectrometric study of the photoionization of C_2F_4 and CF_4 . «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 8, 3531—3536 (англ.)

1969

Получены кривые эффективности образования основного и некоторых осколочных ионов в результате фотоионизации C_2F_4 и CF_4 в области энергий фотонов 9,5—20 эв (с разрешением от 1,6 до 0,25 Å). Эти кривые содержат ряд размытых пиков, обусловленных процессами автоионизации. Для получения более точных значений потенциалов появления (ПП) ионизационная камера охлаждалась до 140° К в случае C_2F_4 и 77° К для CF_4 , что в значительной мере снизило колебательную энергию молекул. Для C_2F_4 измерены ПП (в эв): $C_2F_4^+ — 10,12$; $C_2F_3^+ — 15,84$; $CF_3^+ — 13,70$; $CF_2^+ — 14,60$; $CF^+ — 13,76$. Верхнее значение ПП (CF_3^+) из CF_4 оценивается равным 15,35 эв. Получены потенциалы ионизации (в эв): $CF — 9,23$ и $CF_3 — 9,17$, а также вычислен ряд термодинамич. величин исследовавшихся объектов. Г. А. Вомпе

оп. 1970. 42

(+2) I

(+5) III

X

1969

CF

(9)

+

129948k Mass-spectrometric study of the photoionization of tetrafluoroethylene and tetrafluoromethane. Walter, T. A.; Lifshitz, C.; Chupka, W. A.; Berkowitz, J. (Argonne Nat. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(8), 3531-6 (Eng). Photoionization-efficiency curves for CF_3^+ from CF_4 and for the parent ion and selected fragment ions from C_2F_4 are reported for the energy region from onset of ionization to about 20 ev. The ionization-efficiency curves for both parent and fragment ions from C_2F_4 demonstrate a no. of very pronounced auto-ionization peaks. Appearance potentials are made more reliable by using a cooled ionization chamber to remove most of the thermal vibrational energy of the mols. From the difference between the appearance potentials of CF^+ and CF_3^+ from C_2F_4 , it is concluded that $\text{I.P. (CF)} = \text{I.P. (CF}_3) + 0.06 \text{ ev.}$ Therefore, the $\text{I.P. (ionization potential) (CF)} = 9.23 \pm 0.08 \text{ ev.}$ can be calcd. from the $\text{I.P. (CF}_3) = 9.17 \pm 0.08 \text{ ev.}$ derived in this paper. The onset of CF_3 from CF_4 is asymptotic, and there is no clear threshold. An upper limit for this threshold was set at 15.35 ev.

RCJQ

C.A. 1969: 71.26

+1

X

CF
(с. на с.)

с. ност

Anderson A.B.,
Parr R. F.

1970

J. Chem. Phys., 1970,
53, № 8, 3375.

● (С. Вет) III

CF	$k_e \times 10^{-5}$	$-l_e \times 10^{13}$	$m_e \times 10^{24}$	$k_e m_e / l_e^2$
	5,79 (7,42)	42,1 (53,7)	273 (362)	0,89 (0,93)

CF

м.и.
дип. мом.

ВФ-1206-XV

1970
8 Д789. Спектр электронного резонанса (ЭР) и дипольный момент газообразного CF. Carrington A., Howard B. J. Gas-phase electron resonance spectrum and dipole moment of CF. «Molec. Phys.», 1970, 18, № 2, 225—231 (англ.)

С помощью спектрометра Декка Х-3 на частоте 9270 Мгц исследован спектр ЭР вращательных уровней $J=3/2$ и $5/2$ парамагн. состояния $2\pi_{3/2}$ газообразного радикала CF, полученного путем пропускания CF₄ через микроволн. разряд и смешивания продуктов разряда с рядом органич. молекул. Из анализа спектров определена вращательная константа ($B_0=1,4 \text{ см}^{-1}$), которая хорошо согласуется с величиной, определенной из эмиссионных УФ-спектров, а также аксиальная ($h=662,9 \pm \pm 3 \text{ Мгц}$) и перпендикулярная ($b=190 \pm 50 \text{ Мгц}$) компоненты сверхтонкого взаимодействия ядер F¹⁹. Из измерения эффекта Штарка первого порядка определен электрич. дипольный момент CF ($0,65 \pm 0,05 \text{ ед. Дебая}$).

В. М. Рыжков

Ф. 1970. 89

CF

B9-1206-XIV

1970

105412a Gas phase electron resonance spectrum and dipole moment of CF. Carrington, Alan; Howard, B. J. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *Mol. Phys.* 1970, 18(2), 225-31 (Eng). The gas phase electron resonance spectrum of the CF radical in its $X^2\pi_{3/2}$ electronic state is described. Anal. of the spectrum gives values of the rotational const. B_0 and fine structure const. A which are in good agreement with those previously obtained from the uv emission spectrum. The axial component of the ^{19}F magnetic hyperfine interaction is derived, and significant contributions from the non-axial components are discussed. The elec. dipole moment of CF is obtained from measurements of the 1st-order Stark effect.

RCFS

M. H.

3. 12. 1970. 72. 20.

C. A. 1970. 72. 20.

CF

1970

12 Д117. Система $B-X$ радикала CF. Carroll P. K., Grennan T. P. The $B-X$ system of CF. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1970, 3, № 6, 865—877 (англ.)

Изучен эмиссионный спектр радикала CF, полученного в разряде в газовой смеси $CF_4 + He$. Идентифицирована колебательная структура системы полос при 2200—1970 Å электронного перехода $B^2\Delta-X^2\Pi$. Выполнен анализ вращательной структуры колебательных полос 0—0, 0—1, 0—2 и 1—2 этой системы. Определены значения вращательной постоянной $B_e = 1,320$ (B) и $1,415$ cm^{-1} (X) и постоянной колебательно-вращательного взаимодействия $\alpha_e = 0,022$ (B) и $0,018$ cm^{-1} (X). Показано, что уровень $B^2\Delta$ может быть описан в терминах случая «в» по Гунду. Построены кривые потенц. энергии для наимиз-

м.и.

Вос-68-XIV

оп. 1970.

129

ших электронных уровней $X^2\Pi$, $A^2\Sigma^+$ и $B^2\Delta$ и рассмотрены электронные конфигурации CF , к которым принадлежат уровни X , A и B . Отмечено сильное взаимодействие уровня B с близкорасположенным несвязывающим уровнем типа $^2\Delta$, который коррелирует с уровнями $C(^3P)$, $F(^2P)$ разъединенных атомов, и преддиссоциация из ридбергова состояния $A^2\Sigma^+$ вследствие взаимодействия $A^2\Sigma^+$ с близким квантовым уровнем. М. Р. Алиев

CF

u.n.

y

1970
 (30374z) B-X system of CF. Carroll, P. K.; Grennan, T. P.
 (Phys. Dep., Univ. Coll. Dublin, Dublin, Ireland). *J. Phys. B*
 1970, 3(6), 865-77 (Eng). The B-X system of CF has been
 obsd. in emission under high resolu. and rotational anal. have
 been made of 4 bands. The upper state is a regular $^2\Delta$ state
 with coupling conditions approximating to Hund's case b. The
 spectroscopic consts. derived for the $B^2\Delta$ state are $T_0 = 49341.4/$
 cm^{-1} , $\Delta G_{1/2} = 1153.3$, $B_e = 1.320$, $\alpha_e = 0.022$, $A_0 = 0.76$ or
 4.48, $\gamma_0 = -0.003$. The potential curves for the X, A and B
 states are discussed and it is suggested that the B state mixes
 with a repulsive $^2\Delta$ state from $C(^3P) + F(^2P)$. Interpretation
 of this homogeneous perturbation in terms of potential curves
 leads to the conclusion that the curve for the B state goes to the
 limit $C(^3P) + F(^2P)$ via a potential max. The $A^2\Sigma^+$ state is
 considered as a Rydberg state with the electron configuration
 $(1\pi)^4(5\sigma)^2(\sigma 3s)$. The ionization potential is estimated to be 8.91
 eV. The predissocn. in the $A^2\Sigma^+$ state is discussed and at-
 tributed to a quartet state, probably $^2\Pi$, from $C(^3P) + F(^2P)$.
 RCTT

C.A. 1970. 13. 6

Bqp-68-XIV

С.П.

Кузнецов Ю.А.

1970

м.п.

Авторефер. диссертации
на соискание ученой
степени ДХН.

М., МГУ, 1970.

CH

Tandon S.P., et al. 1970

$$\omega_e = 1590 \text{ cm}^{-1}$$

0171222 A-1671

J. Phys. Chem., DDR,
1970, 245, 13-4, 230.



(Ces. Lit) III

BP-2264-XIV

1970

CF

Thynne John C.J.;
et al.

($\bar{A}e$)

"Int. J. Mass Spectr. Ion. Phys.",
1970, 5, N 3-4, 329-35.

• (cm. C_2F_4 ; III)

$\text{CH}(2\pi)$

Bulfeet C. R., et al. 1971

$\mu(0,65 \pm 0,05)$

Mol. Phys., 1971,
20, ~ 2, 24.



(Cur. SH) III

Puni 358



CF, CF
SiF, SiF
CF, SiF

Исследование молекул CF и SiF и их положительных ионов методом молекулярных
Hare P. A. G., Wahl Arnold C. Molecular investigation of CF and SiF and their positive ions. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 2, 666—
(л.)

1971

Полным методом Хартри—Фока—Рутана проведен расчет МО систем CF, CF⁺ и CF⁻ (в состояниях, соотв. ²Π, ¹Σ и ³Σ) при разных межъядерных расстояниях и систем SiF, SiF⁺ и SiF⁻ (в тех же состояниях) при одном значении расстояния (опытное значение r_e для SiF). Для CF и его ионов приведены значения энергетич. характеристик при разных расстояниях и состав волновых функций в минимуме энергии (при 2,38 ат. ед. для CF), а также вычисленные спектроскопич. параметры (r_e , ω_e , B_e , $\omega_e x_e$ и α_e), хорошо согласующиеся с опытом для CF. Из расчета следует направление дипольного момента в CF вида C-F⁺. В расчетах использовались точные наборы АО в виде ФСТ для C и Si и номинальный набор для F с добав-

и.п.
у, А_г

X.1972.2

13



лением $3d-4p$ у всех атомов (двучленных для C и Si и одночленных для F). Конфигурации основных состояний CF и SiF соответствуют схеме Маллика, в отрицат. ионах добавляется один электрон на верхней МО π -типа, в положит. ионах эта МО пустая. При использовании оцененного значения энергии корреляции в CF (в виде среднего арифметич. из соотв-щих энергий BF и NF), из расчетных данных найдено значение D_0^0 (CF), отличающееся от опытного в пределах 0,03 эв. Такой же результат получается при предположении $E_{\text{корр}}(\text{CF}) = E_{\text{корр}}(\text{P})$. По мнению авторов, величины $E_{\text{корр}}$ для двухатомных молекул подчиняются простым закономерностям и могут быть оценены. Предложены такие оценки для монофторидов элементов II периода. Вычислены потенциалы ионизации и средство к электрону для CF и SiF и на основании этих данных обсуждены эксперим. значения.

М. Дяткина

CF, S. F., (ab-mex fam) 1971
O'Hare P. A. G., Wahl A. C.
J. Chem. Phys., 1971, 55, w2, 666

CA, 1971, 75, w10, 646/0.2

CF

R. A. O'Hare and A. C. Wahl

1971

SiF

CF⁺

CF⁻

SiF⁺

J. Chem. Phys. 1971, 55, N2, 666

Molecular Orbital Investi-
gation of CF and SiF,
CF⁺, CF⁻, SiF⁺, SiF⁻.

CF

Boys - 4013 - XIV

1982

26670h Theoretical study of the spectroscopic states of the CF molecule. Hall, J. A.; Richards, W. G. (Phys. Chem. Lab., Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *Mol. Phys.* 1972, 23(2), 331-43 (Eng). LCAO-MO SCF calcs. on the ground and excited states of CF are described. Close agreement with obsd. term values is obtained. The calcn. of some mol. properties is discussed, and a very good result is obtained for the spin-orbit coupling in the ground state. The pos. spin-orbit coupling in the $^2\Delta$ state is not explained. The obsd. predissocn. in the A state must be attributed to a curve crossing at a smaller internuclear distance than equil., and the $^4\Sigma^-$ state from $5\sigma 2\pi^2$ is responsible. Calcs. show that a 2nd-order treatment of the $A^2\Sigma^+ - ^4\Sigma^-$ interaction is necessary and sufficient to account for the predissocn.

M. H.

C. A. 1982. 17.4

CF

(papers
conf.)

Hall Z. A.,
Richards W. G.,

1972

Mol. Phys, 1972, 23, n2, 331-343 (conv.)

A theoretical study of the spectro-
scopic states of the CF molecules

Per 91, 1972, 120+28

Box - 4013 - XIV

CF [перевод: отсюда 7557] 1972

Hall J. A.; Richards W.
frequences. Mol. Phys., 1972, 23
(2), 331-343

теоретический. мурманский спектр.
состав. молекулы CF.

CF

Hinkley R.K.
et al.

1972

"Mol. Phys"

расчет

1972, 24, N 5, 1095-102.

"Конст. спин-орбит. взаимодей.

● (см. Ветт; III)

AP ($\frac{CF^+ \cdot CF_3^+; C_2F_4^+; C_3F_5^+ \cdot F^-; CF_3^-}{C_2F_4^+; C_3F_5^-}$) 1972

BP XIV ~~1111~~ / 4336

Ap 7 ($C_2F_3^0, C_3F_5^0$)

$CF_4, C_2F_4, C_3F_6, 2-C_4F_8(Do)$

Lifshitz C., Grajower R.

J. Mass Spectrom. and Ion Phys,
1972, 10, N1, 25-37 (anal.)

Dissociative electron capture and
dissociative ionization in per-
fluorocyclobutane.

Proc. Am. Soc., 1973, 5573

10, 11

(9) 18

CF

1972

Wahl A.C.

"Ther. Chem." London

2.9.1972, 41-70

1851

(3)

CP

1973

(c.h.)

Anderson, Alfred E.
J. Chem. Phys.
1973, 58(1), 381-3.

● (c.u. LiH; III)

40201.1216

TE, Ch, Ph

CF (211)

37026

1973

* 25-3270

Goddard William A., III. — Dunning Thom H.,
Jr., Hunt William J., Hay P. Jeffrey. Gene-
ralized valence bond description of
bonding in low-lying states of molecules.
"Accounts Chem. Res.", 1973, 6, N 11, 368-
376 (англ.)

0034 488

019

021

(См. СН; III)

ВИНИТИ

Summer 1978

~ 1973

CE*

D. L. Hildenbrand

(Y)

Chem. Phys. Lett.

(Do)

(Yp)



СФ

оттиск А-2166

1973

Кузнецов Н. Л.

Кузнецова Л. А.

До, м. п.
81.

Сб. "Совр. проблемы физ.

химии" 1973, 7, 142-190,

М. Моск. ун-т.

1974.

CF^+

Brehm B., et al.

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

(E)

1974, 13, N3, 251-60.



(corr. CF_3^+ ; III)

1974

CF +

Cambray Jo seph.

Gasteiger Johann.

pacem
m. muth.

"J. Am. Chem. Soc" 1974, 96(19)
5978-84 (Eng)

(cu CO⁺; III)

C.A. 1974 81. N 22.

41101.6607

TC, MGU, C_h

CF

96615 02

1974

2652

Lefebvre-Brion H. On the calculation
of Rydberg states of some diatomic
molecules. "J. Mol. Struct.", 1973, 19,
N 1, 103-107

(англ.)

0225 пик

198 199

ВИНИТИ

1975

CF

Aberg P. W.

Mol. Phys., 1975, 30,

расчет
сверх-провод.
взаимод.

N2, 579-586

X. 1976. N3

СМ СМ; III

CF

#4-10886

1975

Chong Delano P.

(7)

"J. Electron Spectrosc
and Relat Phenom"
1975, 7, N6, 445-455
(ann)

(cu HNO₃; III)

50703.7561

Ch, Ph, MGU, TC

41125

CF

1975

4123

Čársky P., Kuhn J., Zahradnik R. Semiempirical all-valence-electron MO calculations on the electronic spectra of linear radicals with degenerate ground states. "J. Mol. Spectrosc.", 1975, 55, N 1-3, 120-130

(англ.) (сер. СН, III)

377 378

0393

0401

пмз

ВИНИТИ

1975

Масс-спектрометрически исследовалось равновесие $S + CF_2 \rightleftharpoons CF + SF$ в газовой фазе при t -рах $1851-2232^\circ K$. Равновесие осуществлялось внутри ячейки Кнудсена, выполненной из графита, через которую пропускался поток газообразного SF_6 . Получено изменение энтальпии указанной реакции и определены теплота образования $\Delta H_{298}^{\circ}(CF) = 58,0 \pm 2,4$ ккал/моль и энергия диссоциации $D_0^{\circ}(CF) = 130,8 \pm 2,4$ ккал/моль. Эти уточненные данные свидетельствуют о несколько большей стабильности молекулы CF , чем это предполагалось до сих пор. В результате прямых измерений получен также вертикальный потенциал ионизации $CF: 9,17 \pm 0,10$ эв, что также согласуется с косвенными данными, известными из результатов по фотодиссоциации C_2F_4 . Г. А. Вомпе

Г. А. Вомпе

CF

809-6445-XIV

$$\phi, \gamma, \Delta H_{f_{298}}^{\circ}$$

ф. 1975 № 10

☒ ΔH_f° ; ΔH_c°

104. C.F.I.

CF

CF

(80, 3)

(4Hf298)

*4-9209

1975

BOP-6445-XIV

49149h Dissociation energy and ionization potential of the molecule fluoromethylidyne. Hildenbrand, D. L. (Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 32(3), 523-6. (Eng). The gaseous equil. $S + CF_2 = SF + CF$ was studied at 1851 to 2232°K by mass spectrometry, and the derived enthalpy change was used to evaluate the heat of formation of CF [3889-75-6] $\Delta H_{298}^\circ = 58.0 \pm 2.4$ kcal/mole, and the dissociation energy $D_0^\circ(CF) = 130.8 \pm 2.4$ kcal/mole. The new thermochem. data indicate a slightly higher stability for CF than earlier detns. Direct measurement by electron impact yielded a value of 9.17 ± 0.10 eV for the vertical ionization potential of CF, in agreement with an indirect result obtained from the photodissociative ionization of CF_4 .

⊕ ⊠

annex 14
 Bureau Hildenbrand

C.A. 1975.83 W6

(cur. CF, I)

60129.7322
Ph, Ch, TC

FC 40604
Меринг класс
И. И. Пачер

1975
8744

К р. N 60129.7289

Hall G. G.

Charges and bond energies in the analysis
of quantum chemistry calculations.

"Int. J. Quantum Chem. Symp.", 1975, N 9,
279-284
(англ.)

525 528

50550 ГМК

ВИНИТИ

C-7

num. 4824

1975

Kerr J. A. et al.

(Do)

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

CF

сентябрь А 2948

1975

Радислав А.А.

(с.п. до,
Т. с.и.п.ост)

В.Ф. "Кимиз пазми"
1975, том 2, 3-61, и,
Атомизм.

СН

оттиски 4061

1975

геометрия
жирных
связей (D₂)
считается.

Хетчер М.,
J. Chem. Phys.
1975, 62, N7, 2788-2799

● (с H_2 ; III)

СФ

1976

Бондаренко К. В. и др.

(расчет
эл. смр
важ. гр. и др.)

рук. ген. в. ВЕННИК
N3689-76 DEIT.

жал. бет) III

CF

is 15578

1976

Bischof P.

J. Amer. Chem Soc
1976, 98, N22, 6844-
49.

F-C

1976

Мастрюков В. С.

(амп. коп.)
2.

Ж. Структ, Хилл, 1976,
17, IV 1, 86-91.

(ср. Be-C) III

CF

CSe

CBr

CJ

1946

16 B87. Силовые постоянные поля Юри-Бредли, производные поляризуемостей связей и молекулярные поляризуемости тетрагалогенидов элементов главной подгруппы IV группы. Pandey A. N., Sharma D. K., Kumar V. Urey-bradley force constants, bond-polarizability derivatives and molecular polarizabilities of the tetrahalides of group IVA elements. «Indian J. Phys.», 1976, 50, № 10, 871—875 (англ.)

Сил. пост. В приближении силового поля Юри-Бредли рассчитаны наборы силовых постоянных из эксперим. частот колебаний, перпендикулярные и параллельные компоненты поляризуемости связей и средн. молек. поляризуемости для тетрагалогенидов главной подгруппы IV группы. Полученные силовые постоянные сопоставлены с найденными ранее в приближении валентно-орбитального силового поля. Отмечено хорошее согласие отдельных элементов обоих силовых полей. Показано, что в ряду MF, MCl, MBr, MI (M=C, Si, Ge или Sn) значений валентных силовых

⊗ (+15)

X. 1944. N 16

постоянных взаимодействия несвязанных пар атомов убывают, что объяснено понижением электроотрицательности галогенов в данном ряду. Изменение валентных силовых постоянных связей тетрагалогенидов по сравнению с соотв-щими силовыми постоянными анионов гексагалогенидов объяснено изменением прочности хим. связи. Показано, что производные от поляризуемости связей, рассчитанные разными методами, вполне сопоставимы; они возрастают в рассмотренном выше ряду в

согласии с ростом поляризуемости более тяжелых атомов галогена, увеличением ковалентного характера связи и межъядерного расстояния R . Отмечены независимость полученных значений перпендикулярных компонент поляризуемости связей от R и возможность их переноса из одних молек. систем в другие, а также выполнение известной зависимости параллельных компонент поляризуемости связей от 4-й степени R .

Ю. Н. Панченко

CF

1976

Vermuelin P, et al.

Localiz. and Delocaliz.
Quant. Chem. Vol. 2, D-B.
1976, 365-79.

(paper
M. Choz
Sprawski.)

(see NO; III)

CF +

Bozhenko K.V.,

1977

Charkin D.P.

(Кв. мех.
парци.
То.) "Zh. Strukt. Khim."
1977, 18(2), 219-24.

сумма 6136

С.Д. 1977. 87. N4

(сер. BH)

(11)

CF

Bozhenko K.V.,
Charkin D.P.

1977

(кв. мех.
парей
То)

"Zh. Strukt. Khim.",
1977, 18(2), 219-24.

6/136

C.Д. 1977, 87, N4 ●

(сер. БН) 14

СФ

Ботенко Р.В.

1977

"М. структур. химии"
1977, 18, №2, 235-244,

воен.
ф-ция

● (см. Век) III

1977

CF

Кузнецова А. А., Кузьменко
М. Е., Кузяков Ю. Я. и др.

В сб. "Теоретич. спектро-
скопия", АН СССР, Отд.
общ. физики и астроно-
мии.

Научный Совет по спек-
троскопии, Москва,
1977, стр. 60.

jp m1/2
ke

СФ.

1987
Монякин А.П. Овечникова Н.С.
Свяжин Г.А. Кузнецов Л.А.
Кузнецов Ю.С.

Всероссийский конкурс, сер. I, 18, 36, 1987

Кир. энциклопедический словарь
См. $A^2 \Sigma - X^2 \Gamma$ и другие
СФ.

1977

CF
(+) $(|R_e^{mn}|^2)$

87: 46151z Determination of probability for the $A^2\Sigma-X^2\Pi$ transition of the CF molecule. Monyakin, A. P.; Svyatkin, I. A.; Ovsyannikova, I. G.; Kuznetsova, L. A.; Kuzyakov, Yu. Ya. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1977, 18(1), 38-40 (Russ). The $|R_e^{mn}|^2$ value for the $A^2\Sigma-X^2\Pi$ transition of the CF mol was detd. from measurements of intensities in the absorption spectra. The spectra were obtained behind the front of the shock wave in the system $C_3F_8:O_2:Ar:He = 1:1:49:49$. The measurements were carried out on the group of lines near the band heads. The value $|R_e|^2$ obtained is 0.22 ± 0.05 a.u.

C. A. 1977. 87 N6

Beery

CF

Ryabov M. A.

1977

Zh. Fiz. Khim 1977,

51(3) 770 (Russ)

(see Be Fj III)

кв. меш.

рацем

мектроник.

отсут.

CF⁺

Ортисси 10504

1974

Рв мех.
расчет

☒ (+12)

г. 1974
№ 23

23 Б23. Изоэлектронная 14-электронная серия. Некоторые неэмпирические расчеты серии родственных молекул. Summers Neena L., Tyrrell James. The 14-electron isoelectronic series. Some ab initio calculations on a series of related molecules. «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 12, 3960—3965 (англ.)

Методом МО ЛКАО ССП в базисе 4-31ГФ выполнен расчет серии 14-электронных молекул XY и X₂: CF⁺, BN³⁻, NO⁺, N₂, CO, CN⁻, BO⁻, C₂²⁻, BF, их протонированных и дипротонированных аналогов, а также систем: O₂⁺, HBC²⁻, HCB²⁻ и HBCN⁻. Найдено, что во всех молекулах XY верхней занятой МО (ВЗМО) является σ-орбиталь, причем разница в энергиях между нею и π-МО увеличивается по мере увеличения разницы в электроотрицательностях атомов X и Y (от 0,01 ат.ед. в CN⁻ до 0,309 в BF). В молекулах X₂ ВЗМО является π-орбиталь, причем она лежит выше σ-МО на величину, изменяющуюся в пределах от 0,002 в O₂²⁺ до 0,014 ат.ед. в C₂²⁻. Нижней свободной во всех случаях

является π^* -МО. В молекулах HXU , где U — более электроотриц. атом, за исключением $\text{U}=\text{F}$, ВЗМО является π -, в системах XUN — σ -МО. Все HXU имеют более низкую энергию, чем XUN . В системах, содержащих атом F , две пары p -электронов фактически остаются атомными. Длина связи X—U уменьшается при переходе от XU к HXU , для XUN такая закономерность отсутствует. Связь X—U короче в HXU , чем в XUN , а связь H—X длиннее, чем H—U . В системах HXUN , за исключением HBFH^{2+} , ВЗМО является π -орбиталь, причем разница в энергиях между σ - и π -МО уменьшается по мере увеличения разницы в электроотрицательностях атомов X и U . Для рассматриваемых в работе систем вычислены неизвестные ранее вращательные константы B_e .

А. Клягина

СФ

1978

Бонеевко К. В. и др.

Б-й Всес. свесноз. по химии
неорган. соединений, Днепро-
петровск, 1978, м., 1978, 53,

расчет
жестких
переходов.

(см. ВФ)

Ср +

1978

Боженико К. В. и др.

Б² Всес. свеклор. по химии
неорганич. соединений, Днепро-
петровск, 1978, М., 1978, 53.

раскел
жертвы
переходов,

(сир. BF)

СФ

1979

Богаченко К.В.

Кл...их.
расчет

Авторизован гиссст.
на соискание ученой
степени КХН.

М., ЦОИХ, 1979

CF

1979
22 Б21. Электронные состояния монофторида углерода. Низколежащие валентные состояния. Dunning Thom. H., White William P., Pitzer Russell M., Mathews C. Weldon. The electronic states of carbon monofluoride. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 297—317 (англ.)

Многоконфигурационным методом самосогласованного поля (МК ССП) с включением конфигураций, правильно учитывающих диссоциацию и почти вырождение $2s-2p$ уровней в атоме углерода рассчитаны валентные состояния $X^2\Pi$, $4\Sigma^-$, $B^2\Delta$ и $2\Sigma^\pm$ молекулы CF, коррелирующие с диссоциац. пределами $C(^3P) + F(^2P)$ - $C(^1D) + F(^2P)$. Установлено соответствие между волновыми ф-циями МК ССП и ф-циями обобщенного метода валентных схем (ОВС), допускающих простую интерпретацию электронной структуры молекулы. Базисный набор составлен из орбиталей слейтеровского типа: пяти s -, трех p - и одной d -типа

ель
ий

Е.И. М. П.
Дисконтр.
Составлен.

2.1979, N22

с оптимизацией показателя экспоненты $3d$ -орбитали по хартри-фоковской энергии основного состояния CF в положении равновесия. Найдено, что понижение энергии вследствие учета $2s - 2p$ вырождения почти постоянно при различных межъядерных расстояниях и не влияет на форму потенциальной кривой. В терминах ОВС прослежено изменение орбиталей взаимодействующих атомов C и F при образовании молекулы. Для основного состояния $X^2\Pi$ получены след. характеристики: равновесное расстояние $1,286 \text{ \AA}$ (эксперим. величина $1,2667$), энергия диссоциации $3,93 \text{ эв}$ ($5,5 \pm 0,1$), основная частота колебаний 1292 см^{-1} (1308). Энергия возбуждения в состояние $^4\Sigma^-$, связанное с диссоциациональным пределом $\text{C}(^3P) + \text{F}(^2P)$, равна $2,66 \text{ эв}$. Состояние $B^2\Delta$, коррелирующее с пределом $\text{C}(^1D) + \text{F}(^2P)$, характеризуется потенциальной кривой с максимумом. Адиабатич. энергия возбуждения $X^2\Pi \rightarrow B^2\Delta$ равна $6,59 \text{ эв}$, тогда как эксперим. величина $6,12 \text{ эв}$. Др. состояние симметрии $^2\Delta$, коррелирующее с основными состояниями изолированных атомов, оказывается отталкивательным.

А. В. Немухин

CF

1979

11 Д155. Электронные состояния монофторида углерода. Низколежащие валентные состояния. Dunning Thom H., Jr., White William P., Pitzer Russell M., Mathews C. Weldon. The electronic states of carbon monofluoride. Low-lying valence states. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 297—317 (англ.)

Рассчитаны потенц. кривые (ПК) для основного и ряда низколежащих возбужденных состояний молекулы CF. Расчеты проводились в расширенном слэтеровском базисе типа (5s3p1d) методом ССП с включением конфигураций, позволяющих правильно описать диссоциативный предел и почти вырождение $2s-2p$. Подробно рассмотрены валентные структуры основного $X^2\Pi$ и возбужденных $^4\Sigma^-$, $B^2\Delta$, $^2\Sigma^+$, $^2\Delta$ и $^2\Sigma^-$ -состояний. Волн. ф-ции этих состояний наглядно представлены в рамках метода обобщенных валентных схем. ПК состояний $X^2\Pi$, $^4\Sigma^-$ носят связывающий, а состояний $^2\Delta$ и $^2\Sigma^-$ — отталкивательный характер; ПК терма $B^2\Delta$ проходит через максимум при R (C—F) 3 ат. ед. Получены следующие спектроскопич. характеристики изученных со-

м. п.; E_i

ср. 1979, N 11

стояний (в порядке: T_e (эв), R_e (Å), D_e (эв), ω_e (см⁻¹); в скобках — эксперим. значения): для $X^2\Pi$ 0; 1,286 (1,2667); 3,93 (5,5); 1292 (1308); для $4\Sigma^-$ 2,66; 1,327; 1,28; 1318, для $B^2\Delta$ 6,58 (6,12); 1,322 (1,317); 1287 (1207), для $2\Sigma^+$ 8,03; 1,312; -2,58; 1326.

О. В. Сизова

CF

1979

90: 177257y The electronic states of carbon monofluoride. Low-lying valence states. Dunning, Thomas H., Jr.; White, William P.; Pitzer, Russell M.; Mathews, C. Weldon (Battelle Mem. Inst., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(2), 297-317 (Eng). Multiconfiguration Hartree-Fock calcs. are reported on the low-lying valence states, the $X^2\Pi$, $4\Sigma^-$, $B^2\Delta$, and $2\Sigma^+$ states, of CF. The wave functions describe dissocn. of the mol. to the correct at. limits and take account of the at. $2s-2p$ near-degeneracy effect. For the ground state, the calcs. give (with exptl. values in parentheses): a bond length of 1.286 Å (1.2667 Å), a fundamental frequency of 1292 cm^{-1} (1308 cm^{-1}), and a dissocn. energy of 3.93 eV ($5.5 \pm 0.1\text{ eV}$). A $4\Sigma^-$ state arising from the $C(^3P) + F(^2P)$ manifold lies just 2.66 eV above the ground state. The $B^2\Delta$ state, calcd. adiabatic excitation energy 6.59 eV (6.12 eV), dissocs. to $C(^1D) + F(^2P)$ via a potential max. Calcs. are also reported on a repulsive 2Δ state arising from ground state atoms.

Мизков
Земков,
Семков

C.A. 1979 90 N 22

1979

CF

CH₄

колеб. релакс.

①

7 Б661. Колебательная релаксация CF₄ и CH₄ и передача энергии между этими газами и CO. Jackson J. M., Lewis P. A., Skirrow M. P., Simpson C. J. S. M. Vibrational relaxation of CF₄ and CH₄ and energy transfer between these gases and CO. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, Part 2, 75, № 10, 1341—1350 (англ.)

Методом ударной трубы измерены скорости колебательной релаксации газ. CF₄ и CH₄ в диапазоне т-р 400—700 К. В области т-р 400—450 К, где заселенность 1-го колебательного уровня ($v=1$) CO низка, измерены константы скорости возбуждения молекул CF₄ и CH₄ молекулами CO. В диапазоне т-р 750—1500 К измерены скорости колебательной дезактивации молекул CF₄ и CH₄ молекулами CO. Результаты сопоставлены с данными по колебательной дезактивации молекул CO молекулами CF₄ и CH₄, полученными методом лазерной флуоресценции. В. П. Дмитриев

Л. 1980. N 7

CF

Summer 8'901

1979

Canada M.

Spectrochim. acta,

1979, 35, 1353-57.

Can. Ref

CF

список
названий
матр.
референтов

1978

Saykally R. J.,
Evenson K. M.,

" 34th Symposium on Molecular
Spectroscopy, Columbus, Ohio,
1978", Paper TF4

The Far-Infrared Laser Magne-
tic Resonance Spectrum of CF⁻,

[Chem (12) 8 page Saykally, Evens
Scales and Evenson: J.C.P., 1982,
74, (1), 58 ;] и ссылки [9] в журнале

Saykally and Benson (10) изучили основные
энергетические переходы в ИФ во флуоро-
металлических комплексах для одной серии
 $\Omega = 3/2$ и $\Omega = 1/2$. Как следует из статьи, м.п.
 $\psi(10)$ не приводится.

CF

Оттиск 8955

1979

CF₂

C(¹P₁ - ¹S₀)

спектр
флуоресценции
при фотохимии
CF₂Cl₂

(+2) ☒

Ф. 1980 IV 4

4 Д895. Фотохимия CF₂Cl₂ под действием излучения УФ-лазера. UV laser photochemistry of CF₂Cl₂. Tice J. J., Wampler F. B., Rice W. W. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 68, № 2-3, 403—406 (англ.)

При облучении паров CF₂Cl₂ сфокусированным излучением ArF-лазера наблюдалась флуоресценция CF(A²Σ⁺ - X²Π), CF(B²Δ - X²Π), CF₂(¹B₁ - X¹A). При большом давлении буферного газа в смеси CF₂Cl₂/Ar и том же облучении дополнительно было обнаружено излучение C(¹P₁ - ¹S₀). Высказаны предположения о механизмах, проявляющихся в излучении процессов.

В. С. Иванов

CF

1979

Wampler F.B; et al.

спектр
исследования

J. Chem. Phys., 1979,
71 (10), 3926-30.

(сущ. CF_2 ; III)

1979

CF

CF⁺Электр.
состоян.

④ 17

x. 1979, № 2

22 Б22. Электронные состояния монофторида углерода. Ридберговы состояния. White William P., Pitzer Russell M., Mathews C. Weldon Dunning T. H. The electronic states of carbon monofluoride. Rydberg states. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 318—326 (англ.)

Многоконфигурационным методом самосогласованного поля рассчитаны потенциальные кривые низлежащих ридберговских состояний молекулы CF и основного состояния CF⁺. Использован базис слейтеровских орбиталей (5s3p1d), дополненный ридберговскими ф-циями на углероде в случае CF. Получены след. параметры X'⁺Σ⁺-состояния CF⁺: равновесное расстояние 1,55 Å, энергия диссоциации 6,9 эв, основная частота колебаний 1821 см⁻¹. Отмечено, что не удалось добиться эквивалентного описания валентных (см. пред. реф.) и ридберговских состояний CF и ионного состояния CF⁺. В то время как энергии возбуждения в валентные состояния завышены примерно на 0,5 эв, энергии возбуж-

дения, полученные с потенциальными кривыми CF^+ и $3d\delta$ ридбергова состояния CF оказываются заниженными. Это является результатом большего влияния корреляции в основном состоянии CF , чем у CF^+ . Найденные значения спектроскопич. постоянных ридберговских состояний хорошо согласуются с эксперим. оценками. Отмечено большое число пересечений ридберговских и валентных состояний вблизи области франк-кондоновского поглощения. Для низших ридберговских состояний поэтому вполне вероятна преддиссоциация за счет взаимодействия с валентными состояниями, диссоциац. пределы к-рых ниже, чем у ридберговских состояний.

А. В. Немухин

CF

1949

11 Д156. Электронные состояния монофторида углерода. Ридберговские состояния. White William P., Pitzer Russell M., Mathews C. Weldon, Dunning Thom H., Jr. The electronic states of carbon monofluoride. Rydberg states. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 318—326 (англ.)

м.п.; Ег

В приближении $4s$ и в многоконфигурац. приближении рассчитаны потенц. кривые (ПК) ридберговских состояний молекулы CF и основного состояния иона CF⁺. Базисный набор был расширен за счет включения диффузных базисных ф-ций. Для состояния $^1\Sigma^+$ иона CF⁺ $R_e = 1,55 \text{ \AA}$, $D_e = 6,9 \text{ эв}$, $\omega_e = 1821 \text{ см}^{-1}$. Обнаружено почти вырождение по энергии между состояниями $4s\sigma$ и $3d\sigma$, а также многочисленные пересечения ПК ридберговских и валентных возбужденных состояний.

О. В. Сизова

Ф. 1949/11

1949

CF

CF⁺

2.2 eV.
 Co-magnet.

 γ_e, ω_e

⊕ ⊗

90: 177258z~ The electronic states of carbon monofluoride. Rydberg states. White, William P.; Pitzer, Russell M.; Mathews, C. Weldon; Dunning, Thomas H., Jr. (Dep. Chem., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(2), 318-26 (Eng). Hartree-Fock and multiconfiguration Hartree-Fock calcs. are reported on some low-lying Rydberg states of CF and the ground state of CF⁺. For the CF⁺ ground state, Σ^+ , the calcs. give a bond length of 1.55 Å, a fundamental frequency of 1821 cm⁻¹, and a dissocn. energy of 6.9 eV. Many interactions between the valence and Rydberg state manifolds are revealed. Also a strong mixing of the 3dσ and 4sσ components due to an accidental degeneracy is described.

C.A. 1949.90.N22

CF

1980

Feller David, et al

Chem. Phys. Lett, 1980,
9, 22-26.
D. J. Nisbet.

Cell CNH₂; III

CF

1980

Yug R, et al

св. мих. пав.
Г; 24. еваге

Theor. chim. acta, 1980,
57, N2, 131-44

сш. FH-11

CF

Saito S., Endo Y,

1980

E. Hirota

noct.

" 41st Annual Meeting of the

Trans

crypt.

Chemical Society of Japan,
Osaka, 1980; Paper 1D31.

(Semeni [US] before Kawaguchi et al.,

Z. nat. Spectr., 36, 136-142 (1981) - ex. 11612.

См. также: Saito et al. неопублик.

материалы изданы в 27 1/2 стр. сб.

получены по имени. материалы по ф.

CF

Оттиск 11612

1981

18 Б180. Инфракрасная полупроводниковая лазерная спектроскопия радикала CF. Kawaguchi Kentaro, Yamada Chikashi, Hamada Yoshiaki, Hirota Eizi. Infrared diode laser spectroscopy of the CF radical. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 136—142 (англ.)

С помощью перестраиваемого полупроводникового лазерного спектрометра с зеемановской модуляцией измерены колебательно-вращательные спектры (полоса 1—0) радикала CF в электронных состояниях $X^2\Pi_{1/2}$ и $X^2\Pi_{3/2}$. Молекулы CF образовывались в разрядной оптич. ячейке многократного отражения содержащей, CF_4 или C_2F_4 . Значения полученных молек. постоянных ($X^2\Pi_r$) (в cm^{-1}): $\nu_0=1286, 1281$, $B_e=1,416704$, $\alpha_e=0,018419$, $\gamma_e(\text{фиксир.})=0,00011$, $r_e=1,271977$ А, $D_e=6,68 \cdot 10^{-6}$, $A_{v=1}-A_{v=0}=-0,6500$, $p_0=0,008580$, $p_1=0,00852$ (если пренебречь γ_e , то $B_e=1,416622$, $\alpha_e=0,018199$ cm^{-1}). Полученные данные сопоставляются с результатами исследований электронных спектров радикала (системы $A^2\Sigma^+-X^2\Pi$ и $B^2\Delta-X^2\Pi$). В. М. Ковба,

X 1981 N 18

Оттиск 11612

1981

CF

10 Д390. Спектроскопия радикала CF с диодным ИК-лазером. Infrared diode laser spectroscopy of the CF radical. Kawaguchi Kentarou, Yamada

Chikashi, Hamada Yoshiaki, Hirota Eizi. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 136—142 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения радикалов CF, образованных в электрич. разряде C_2F_4 , с диодным лазером в качестве источника излучения в области $1250—1310\text{ см}^{-1}$. Для регистрации линий CF на фоне расположенной в той же области полосы $\nu_3 C_2F_4$ использована зеемановская модуляция спектра. Зарегистрированные линии отнесены к колебательно-вращательным переходам $v=0 \rightarrow v=1$ в электронных состояниях $X^2\Pi_{3/2}$ и $X^2\Pi_{1/2}$, последнее состояние также регистрируется в зеемановском спектре из-за отклонения радикала от случая связи a по Гунду. Приведены частоты линий, определенные калибровкой по спектру N_2O с точностью $\sim 10^{-3}\text{ см}^{-1}$. Все линии состояния $^2\Pi_{1/2}$ расщеплены на $0,008\text{ см}^{-1}$ за счет Λ -удвоения. Определены колебательная частота, вращательные постоянные B и D и константа спин-орбитального взаимодействия. Библ. 19.

М. В. Т.

Ч. II.

Р. 10. 1981

CF⁺ [Dumuck 11506] 1981.

Laurenzi B.J.

paper
(20)

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

CF

Ommuck 12915

1981

Do;

Ramant K., Ghodgaonkar A.

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

Оттиск 10989 1981

CF

NO

O_2^+

кв. мех.
расчет

(+2) ☒

Ф. 1981. N 6

6 Д106. Расчет спектра кватерных состояний двухатомных систем с учетом спин-орбитального взаимодействия. Calculations of quartet state spectra for diatomic species by INDO CI method including spin-orbit coupling perturbation. Minaev Boris F., Zahradník Rudolf. «Collect. Czech. Chem. Commun.», 1981, 46, № 1, 179—193 (англ.)

Для молекулярных изоэлектронных систем CF, NO, O_2^+ исследуется спектр ~~низлежащих кватерных состояний~~. Рассчитывается положение электронных уровней и вероятности электрических дипольных переходов из основного, дублетного, состояния. При расчете вероятностей интеркомбинационных радиационных переходов учтено спин-орбитальное смешение термов. Расчет проведен упрощенным методом Хартри—Фока с учетом наложения конфигураций. Приведен список смешиваемых конфигураций, энергии валентных орбиталей, коэф. спин-орбитального смешивания термов, вероятности разрешенных и интеркомбинационных переходов. Рассчитана поляризация излучения компонент перехода $a^4\Pi-X^2\Pi$ в NO и O_2^+ и перехода $a^4\Sigma-X^2\Pi$ в CF. Приведены константы тонкого расщепления для состояний $^2\Pi$ и $^4\Pi$.
Л. Н. Иванов

CF⁺

CF(γ)

У, м.п.

ⓧ
(+) CCl⁺

Х. 1982, 19, N 21

1982

21 Б134. Фотоэлектронная спектроскопия при многофотонной ионизации CCl₂F₂ и CCl₃F. Hepburn J. W., Trevor D. J., Pollard J. E., Shirley D. A., Lee Y. T. Multiphoton ionization photoelectron spectroscopy of CCl₂F₂ and CCl₃F. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 8, 4287—4288 (англ.)

Измерены масс-спектры (МС) ионов и фотоэлектронные спектры (ФЭС) фрагментов, образованных при многофотонной ионизации (МФИ) молекул CCl₂F₂ (I) и CCl₃F (II) лазерным излучением с длиной волны 1933 А. В обоих случаях в МС не было обнаружено ионов исходных молекул, а относит. содержание др. ионов составило для I CF⁺ (1,0), CF₂Cl⁺ (0,35), CCl⁺ (0,15), C⁺ (0,05) и для II CF⁺ (1,0), Cl₂⁺ (0,8), CCl⁺ (0,7), CFCl₂⁺ (0,6), C⁺ (0,2). При измерениях ФЭС не обнаружено фотоэлектронов с кинетич. энергиями E > 4 эВ. Оба спектра содержат в области 2—4 эВ колебательную структуру, к-рая отнесена к двухфотон-

ной ионизации молекул CF_4 и CCl_4 . Из измеренных ФЭТ для CF_4 и CCl_4 определены ИП ионизации 9,0 и 8,9 эВ и спектроскопич. константы $\omega_e = 0,223$ и 0,146 эВ, $\omega_e x_e = 0,002$ и 0,001 эВ соотв. На основе полученных результаов сделан вывод, что в процессе МФИ молекул I и II сначала происходит нейтр. фотофрагментация, за к-рой следует двухфотонная ионизация образовавшихся продуктов. О. А. Басченко

CF⁺

1982

12 Д741. Фотоэлектронная спектроскопия с многофотонной ионизацией молекул CCl_2F_2 и CCl_3F . Multiphoton ionization photoelectron spectroscopy of CCl_2F_2 and CCl_3F . Hepburn J. W., Trevor D. J., Pollard J. E., Shirley D. A., Lee Y. T. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 8, 4287—4288 (англ.)

С применением техники сверхзвуковых молекулярных пучков получены энергетич. спектры фотоэлектронов, образующихся в результате многофотонного поглощения газообразными молекулами CCl_2F_2 (I) и CCl_3F , (II)

м.п.



CF(м.п., γ)

CCl(м.п., γ)

сп. 1982, 18, N 12

излучения AgF -лазера ($\lambda = 1933 \pm 4 \text{ \AA}$). Важной особенностью процесса многофотонного поглощения молекулами I и II является их фрагментация при поглощении уже первого кванта. Масс-спектрометрич. анализ ионов, образующихся в исследованном процессе, показал, что основной вклад в фотоэлектронные спектры дают фрагменты $\text{CF}(B^2\Delta)$ и CCl . Анализ колебательной структуры спектров позволил определить молекулярные постоянные иона $\text{CF}^+(X^1\Sigma^+)$: $\omega_e = 1800 \pm 40 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e = 10 \pm 10 \text{ см}^{-1}$. Уточнены также величины потенциалов ионизации молекул CF и CCl (в эВ): $9,0 \pm 0,2$ и $8,9 \pm 0,2$ соответственно.

М. Т.

CF

1982

Millard M. M., et al.

J. Electrochem. Soc.

1982, 129 (1), 160 -

- 165.

(см. CF₂, CF; III)

спектр
испускания
в плазме

Получены посылки

CF (B²D-X 47) в лон. 180-280 мм

и CF (A²E-X 27). Анализ и лон. кб

CF

1982

Резерв
отпуск-
ный

Sauer J., Čárský P.,
Žahradník R.

Collect. Czech. Chem.
Commun., 1982, 47, N4,
1149-1168.

($\text{Cu} \cdot \text{SiH}_2$; III)

CF

Оттиск 14856 1982

24 Б296. Чисто вращательный спектр и сверхтонкая структура CF, изученные методом лазерного магнитного резонанса. Saykally Richard J., Lubic Karen G., Scalabrin Artemio, Evenson Kenneth M. The pure rotational spectrum and hyperfine structure of CF studied by laser magnetic resonance. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 1, 58—67 (англ.)

м.п;

Измерены спектры лазерного магнитного резонанса для четырех вращательных переходов и одного перехода с изменением спина в молекуле CF ($X^2\Pi$) во внутрирезонаторном пламени метан—фтор. Значения молек. постоянных CF: $B_0=42196,35$, $D=0,199$, $P_0=257,22$, $q_0=0,83$, $A_D=-6,36$, $b=253$, $d=782$, $h=665,7$ (МГц); g -факторов ($X^2\Pi_{3/2}$) — $g'_L=0,99989$, $g_s=2,00196$, $g_e=-1,81 \cdot 10^{-3}$, $g_r=2,0 \cdot 10^{-4}$; параметров СТС — $a=698$, $b=253$, $c=-318$, $b_F=147$, $d=782$, $h=665,7$ (МГц). Оценены также параметры магнитной

X. 1982, 19, N 24

$$\text{СТС (см}^{-3}\text{): } \langle 1/r^3 \rangle = 9,40 \cdot 10^{-24}, \quad |\psi^2(0)| = 0,236 \cdot 10^{-24}, \\ \langle 3\cos^2 \theta - 1/r^3 \rangle = -2,85 \cdot 10^{-24}, \quad \langle \sin^2 \theta / r^3 \rangle = 7,02 \cdot 10^{-24}.$$

Сравнение этих интегралов с данными для атома фтора показывает, что неспаренный электрон на 18% локализован на атоме фтора (двойная связь углерод—фтор).

В. М. Ковба

CF

Оттиск 14856

1982.

12 Д549. Исследование сверхтонкой структуры чисто вращательного спектра радикала CF методом лазерно-магнитного резонанса. The pure rotational spectrum and hyperfine structure of CF studied by laser magnetic resonance. Saykally Richard J., Lubic Karen G., Scalabrin Artemio, Evenson Kenneth M. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 1, 58—67 (англ.)

М.П.

Методом лазерно-магнитного резонанса с использованием лазеров с оптич. накачкой (от CO₂-лазера), генерирующих на волнах 556,9, 380,6, 635,4, 304,1 и 117,6 мкм, исследован чисто вращательный спектр радикала CF, образованного в фторометановом пламени. Идентифицирована сверхтонкая структура переходов с $J=9/2-11/2$, $3/2-3/2$ и $5/2-5/2$, $\Omega=3/2$ в основном электронно-колебательном состоянии X²Π. Определены

оп. 1982, 18, № 12

значения вращательной и центробежной постоянных и постоянных тонких и сверхтонких ядерных взаимодействий. Полученные значения этих постоянных вместе с результатами неэмпирич. расчетов использованы для вычисления параметров, характеризующих распределение электронной плотности в CF. Отмечено, что химич. связь в CF имеет заметный π -характер. М. Р. Алиев

CF

1982

97: 14243w The far-infrared rotational spectrum of the CF radical. Van den Heuvel, F. C.; Meerts, W. Leo; Dymanus, A. (Fys. Lab., Kathol. Univ. Nijmegen, 6525 ED Nijmegen, Neth.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 88(1), 59-62 (Eng). The rotational spectrum of CF in its ground electronic state was studied at ~ 1000 GHz by using a tunable far-IR source. Seven transitions were obsd. originating from the $^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ substates. The hyperfine and Λ -type splittings were resolved. The results were combined with gas-phase electron resonance and IR diode laser spectra to det. all pertinent mol. consts.

frausam -
chemp

C.A. 1982, 97, N2.

CF

1982

18 Б243. Вращательный спектр радикала $\text{CF}^\bullet$ в длинноволновой инфракрасной области. Heuvel F. C. van den, Meerts W. Leo, Dumanus A. The far-infrared rotational spectrum of the $\text{CF}^\bullet$ radical. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 88, № 1, 59—62 (англ.)

М.П.

В области 1000 ГГц измерен вращательный спектр радикала $\text{CF}^\bullet$ в основном электронном состоянии. В кач-ве источника использован диод, на к-рый направляли излучение лазера на HCN фиксированной частоты и миллиметровое перестраиваемое излучение клистрона. Наблюдено 4 вращательных перехода из состояния $^2\Pi_{1/2}$ и 3 — из состояния $^2\Pi_{3/2}$. В каждом переходе разрешена СТС, состоящая из 4 линий. Проведен анализ измеренной вращательной структуры. Полученные результаты совместно с данными ЭПР-спектров в газовой фазе и лазерных диодных спектров использованы для расчета молек. постоянных $\text{CF}^\bullet$ в состоянии X^2 ($v=0$): $\nu_0=1286,14639(24)$. $A_{\text{эфф}}=77.11(1)$ см $^{-1}$.

X. 1982, 19, N 18.

$A_{D, \text{эфф}} = -7,94(22)$, $B_{\text{эфф}} = 42197,031(59)$, $D = 0,19870(23)$, $P = 255,60(35)$, $q = 0,760(14)$, $a = 633(29)$, $b = 261(6)$,
 $b + 1/3c = 195(18)$, $d = 772(27)$, $c = -200(61)$, $h = 663,5(3,0)$ МГц и состоянии $X^2\Pi$ ($v=1$): $A_{\text{эфф}} = 76,46(1)$ см $^{-1}$, $A_{D, \text{эфф}} = -7,98(30)$, $B_{\text{эфф}} = 41651,42(17)$, $D = 0,19629(56)$, $P = 253,6(1,5)$ МГц. С. Б. Осин

CF (217)

Ommuck 14285

1982

кв. мех.
расчет

Zhu Z.H., Murrell J.N.

Chem. Phys. Lett.,
1982, 88, 13, 262-265.

CF

Om. 16886

1983

Farnell L., Pople J. A.,
et al.

ab initio
calculations

J. Phys. Chem., 1983,

87, N 1, 79-82.

CF

Om. 17924

1983

4 Л187. Исследование методом спектроскопии лазерного магнитного резонанса радикалов CF в области 7,8 мкм. Vibration-rotation transitions in the CF radical, studied by laser magnetic resonance spectroscopy at 7.8 μm . Gondai M. A., Rohrbeck W., Urban W., Blanckart R., Brown J. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 100, № 2, 290—302 (англ.)

М.П.

Получены спектры лазерного магн. резонанса радикалов CF, образованных в электрич. разряде CF₄, отвечающих основной полосе радикала в состоянии X²П, соответствующем горячим переходам и основной полосе, сопровождаемой переходом $\Omega=1/2 \rightarrow \Omega=3/2$. Ряд линий изучен на уровне лэмбовского провала. Приведены частоты использованных линий лазера CO₂ и значения резонансных магн. полей, а также отнесение наблюдаемых резонансов. С привлечением литер. данных

фр. 1984, 18, № 4

по лазерному магн. резонансу в длинноволн. ИК-об-
ласти и полученных с диодным лазером определены
гармонич. частота, параметры ангармоничности, вра-
щательные постоянные, константы колебательно-враща-
тельного взаимодействия и центробежного расщепле-
ния для равновесной конфигурации радикала. Наблю-
дено сверхтонкое расщепление линий, связанное с
ядром F^{19} .

М. В. Т.

CF

DM. 16719

1983

9 Д487. Переход $a^4\Sigma^- - X^2\Pi$ в CF. Измерение энергии терма и длины связи метастабильного флуорометилидина. The $a^4\Sigma^- - X^2\Pi$ transition in CF. A measurement of the term energy and bond length of a fluoromethylidyne metastable. Grieman F. J., Droegge A. T., Engelking P. C. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2248—2253 (англ.)

Впервые наблюдали колебательные полосы (0,0) и (0,1) слабого интеркомбинационного перехода $a^4\Sigma^- - X^2\Pi$ радикала CF. Определены спектроскопич. постоянные состояния $a^4\Sigma^-$: $T_0 = 28564 \pm 1 \text{ см}^{-1}$, $B_0 = 1,3035 \pm \pm 0,002 \text{ см}^{-1}$ и $r_0 = 1,326 \pm 0,001 \text{ А}$. Измеренные величины хорошо согласуются с данными теоретич. расчета, что позволяет утверждать существование перемешивания состояния $a^4\Sigma^-$ только с состояниями $X^2\Pi$ и $C^2\Sigma^+$. Создание высокой конц-ии метастабильных радикалов достигалось посредством электр. разряда в смеси CF_4 с инертными газами, причем небольшие примеси посторонних газов (напр. N_2) эффективно разрушали радикалы.

Е. П. Смирнов

М.П.

гр. 1983, 18, № 9

CF

[Om. 16749]

1983

98:152161q The $a^4\Sigma-X^2\Pi$ transition in fluoromethylidyne radical: a measurement of the term energy and bond length of

a fluoromethylidyne metastable. (Grlman, F. J.; Drooge, A. T.; Engelking, P. C. (Chem. Phys. Inst., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(5), 2248-53 (Eng). The 1st observation is reported of the (0,0) and (0,1) vibrational bands of the weak, spin forbidden $a^4\Sigma-X^2\Pi$ transition of the CF radical. The spectra, obtained in a flowing afterglow, yield values for T_0 , B_0 , and r_0 of the $a^4\Sigma$ -state of $28,564 \pm 1$ cm⁻¹, 1.3035 ± 0.002 cm⁻¹, and 1.326 ± 0.001 Å, resp. The intensity distribution in the rotational subbands is consistent with the mixing of the $a^4\Sigma$ -state predominantly with the $X^2\Pi$ state and the uncharacterized $C^2\Sigma^+$. This result is discussed with regard to previous calcs.

($a^4\Sigma-X^2\Pi$)

C. A. 1983, 98, N18.

CF

Ом. 1649 1983

16 Б163. Переход $a^4\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$ в CF. Измерение термической энергии и длины связи метастабильного фторметилидина. The $a^4\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$ transition in CF: a measurement of the term energy and bond length of a fluoromethyldyne metastable. Grieman F. J., Droege A. T., Engelking P. C. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2248—2253 (англ.)

М.А;

В спектре послесвечения, возникающем при прохождении смеси CF_4/He (1:70, $p_{общ} = 0,76$ мм) через холодный катодный разряд, в области 3500 и 3665 Å наблюдались две полосы, отнесенные к спинзапрещенному переходу $a^4\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$ молекулы CF. В каждой полосе выделено по четыре канта соответствующих различным ветвям вращательной структуры, три интенсивных и один малоинтенсивный. Рассчитан модельный спектр, соответствующий этому переходу. При расчете использовались известные молек. постоянные основного электронного состояния, варьируемыми параметрами были $T_0(a^4\Sigma^-)$, B_0' и пять параметров дипольных моментов переходов $\mu_i = \langle a^4\Sigma^- | \mu | X^2\Pi \rangle$ в предположении, что либо одно, либо оба состояния взаимодействуют с электронным со-

X. 1983, 19,
N 16

стоянием $C^2\Sigma^+$ (по аналогии с молекулой SiF «Can. J. Phys.», 1973, 51, 634) (I), либо взаимодействие происходит с участием близлежащего $^4\Pi$ состояния и трех $^2\Pi$ состояний (расчеты методом 4ПДП—КВ, Coll. Czech. Chem. Commun., 1981, 46, 179) (II). Значения T_0 , B_0 и r_0 CF ($a^4\Sigma$) равны $28\,564\text{ см}^{-1}$, $1,3035\text{ см}^{-1}$, $1,326\text{ А}$. Приведены и обсуждены два набора μ_i для случаев I и II. С экспериментом несколько лучше согласуется расчетный спектр I. Эксперим. значение излучательного времени жизни (τ) $\sim 2\text{ мс}$, однако отмечается, что оно, вероятно, занижено из-за тушения и потерь на стенках проточного реактора. Значение τ , вычисленное с использованием I, составляет $\sim 14\text{ мс}$.

В. М. Ковба

CF

CF⁺

CF⁻

расчет ϵ_i ,
м.п;

1983

11 Д138 ДЭП. Неэмпирические расчеты электронного строения фторуглеродных соединений CF и CF₂.
Халтурин В. Г., Исламов Р. Г., Зюбина Т. С.,
Шмаков П. А., Шайдулов В. С., Халепп Б. П.;
Казан. ун-т. Казань, 1983, 12 с. Библиогр. 15 назв.
(Рукопись деп. в ВИНТИ 1 июля 1983 г. № 3569-83Деп.)

Представлены результаты неэмпирич. расчета молекул CF, CF⁺, CF⁻, CF₂, CF₂⁺, CF₂⁻ методом Хартри—Фока—Рутана с базисом Роса и Зигбана, расширенным двумя диффузными 3s- и 3p-функциями. Автореферат

(15) 

р. 1983, 18, N 11

CF

Om. 16157 1983

№ Б282. Микроволновый спектр радикала CF. The microwave spectrum of the CF radical. Saito Shuji, Endo Yasuki, Takami Michio, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 1, 116—120 (англ.)

С использованием МВ-спектрометра с модуляцией частоты источника и 3,5-метровой поглощающей ячейки в области 100—300 ГГц измерены вращательные спектры радикала CF в подсостояниях $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$ основного электронного состояния. Радикалы получали непосредственно в ячейке под действием тлеющего разряда через CF₄ (0,017 мм) с малыми добавками CH₃F ($7 \cdot 10^{-4}$ мм). Эффект Штарка измеряли в ячейке (40 см) с параллельными пластинами при синусоидальной модуляции частотой 100 кГц. Наблюдены переходы $3/2 \rightarrow 1/2$, $5/2 \rightarrow 3/2$ и $7/2 \rightarrow 5/2$ в состоянии $^2\Pi_{1/2}$ и $5/2 \rightarrow 3/2$ и $7/2 \rightarrow 5/2$ в состоянии $^2\Pi_{3/2}$. Для всех линий измерено зеемановское расщепление при наложении магнитного поля величиной 24 Гс. Рассчитаны вращательные постоянные,

МВ спектр,

м.п.

X. 1983, 19, № 12

постоянные λ -удвоения, квадрупольного взаимодействия
 и дипольный момент радикала CF. Значения постоян-
 ных (в МГц): $B_0=42196,663$, $D_0=0,1993$, $A_I^{\text{эфф.}}=$
 $=-3,7203\ 78$, $p_0=255,95$, $q_0=0,69$, $a+(b+c)/2=664,07$,
 $a-(b+c)/2=747,58$, $b=269,2$, $d=792,17$, $a\ 705,82$, $c=$
 $=-352,7$, $\mu=0,645$ Д. Определены величины штарков-
 ских сдвигов в поле до 1000 в/см. и вычислены штар-
 ковские коэффициенты для четырех компонент перехода
 $I=3/2-1/2$. Полученные результаты сравниваются с
 данными спектров ЭПР, диодных лазерных спектров и
 спектров лазерного магнитного резонанса в далекой ИК-
 области. Рассчитаны усредненные орбитальные и спи-
 новые распределения неспаренного электрона в радика-
 ле CF и в рамках простой модели МО обсужден харак-
 тер связи в CF.

С. Б. Осин

CF

Om.

16157

1983

98: 80775t The microwave spectrum of the fluoromethylidyne radical. Saito, Shuji; Endo, Yasuki; Takami, Michio; Hirota, Eis. (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(1): 116-20 (Eng). Rotational transitions of the CF radical in both the $^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ ground electronic states were obsd. in the region up to 300 GHz by using a source-frequency modulation microwave spectrometer. The CF radical was generated directly in a free-space absorption cell by a d.c. discharge in CF₄ contg. a small amt. of Me fluoride. The rotational const., the centrifugal distortion const., and the A-type doubling consts., as well as all 4 hyperfine coupling consts. *a*, *b*, *c*, and *d* of the F nucleus, were detd. with good precision. From the obsd. hyperfine coupling consts. the unpaired-electron spin and spatial (orbital) distributions $\langle 1/r^3 \rangle$, $\langle (3 \cos^2 \chi - 1)/r^3 \rangle$, $\langle \sin \chi / r^3 \rangle$, and $\langle 1/r^3 \rangle_0$ were calcd. and discussed in terms of a simple mol. orbital picture.

frausam-
Cnekmp

C. A. 1983, 98, N10.

CF

От 16157

1983

6 Д402. Микроволновый спектр радикала CF. The microwave spectrum of the CF radical. Saito Shuji, Endo Yasuki, Takami Michio, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 1, 116—120 (англ.)

Исследован микроволн. спектр радикала CF, полученного в разряде постоянного тока через CF₄. Вблизи частот 124, 206, 215, 290 и 300 ГГц идентифицирована сверхтонкая структура вращательных переходов с $J \leq 7/2$ основного электронно-колебательного состояния $X^2\Pi_{1/2}$ и $X^2\Pi_{3/2}$. Определены значения вращательной и центробежной постоянных ($B_0 = 42196,663$, $D_0 = 0,1993$ МГц), и постоянных Λ -удвоения ($\rho_0 = 255,95$, $q_0 = 0,69$ МГц) и постоянных магнитных сверхтонких взаимодействий.

М. Р. Алиев

М.П;

Ф. 1983, 18, № 6

CF

1983

6 Б1141. Колебательно-вращательные переходы радикала CF исследованные методом спектроскопии лазерного магнитного резонанса при 7,8 мкм. Vibration-rotation transitions in the CF radical, studied by laser magnetic resonance spectroscopy at 7,8 μm . Gondal M. A., Rohrbeck W., Urban W., Blankart R., Brown J. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 100, № 2, 290—302 (англ.)

Методом лазерного магнитного резонанса исследован ряд переходов в колебательно-вращательном спектре радикала CF ($X^2\Pi$). Приведена блок-схема ЛМР-спектрометра с СО-лазером. Радикалы CF образовывались при прохождении смеси CF₄ в He или Ar через МВ-разряд. Отмечается, что интенсивность сигнала CF сильно зависит от скорости потока газа внутри оптич. ячейки и оптимальна при наивысшей скорости (давл. $P_{\text{CF}_4} = 0,017$ мм, $P_{\text{He}} = 0,45$ мм, $P_{\text{общ}} = 0,5$ мм). Помимо сильных резонансов, соответствующих переходам $^2\Pi_{3/2} - ^2\Pi_{3/2}$ фундаментальной полосы ($\sim 1286 \text{ см}^{-1}$), наблюда-

М.П.

X. 1984, 19, № 6

лись малоинтенсивные «перекрестные» переходы $^2\Pi_{3/2} - ^2\Pi_{1/2}$ и горячие полосы. В почти каждом переходе удалось разрешить СТС по ^{19}F . Приведено положение и отнесение наблюдаемых переходов и компонент СТС. Получены след. значения мол. параметров $\text{CF}(X^2\Pi)$ из спектра ИК ЛМР (см^{-1}): $\omega_e = 1307,9925$, $\omega_e x_e = 11,0711$, $B_e = 1,416718$, $\alpha_e = 0,0184257$, $D_e = 6,57 \cdot 10^{-6}$, $\alpha_A = 0,6491$. Значения остальных указанных ниже мол. постоянных фиксировались в соответствии с результатами (публикуемыми отдельно) анализа спектров далекого ИК-ЛМР резонанса $\text{CF}(X^2\Pi)$ (в см^{-1}): $A_e = 77,5219$, $\gamma = 0,49 \cdot 10^{-3}$, $p + 2q = 8,590 \cdot 10^{-3}$, $q = 1,98 \cdot 10^{-5}$, $h_{1/2} = 0,0249$, $h_{3/2} = 0,0222$, $b = 0,90 \cdot 10^{-2}$, $d = 0,0264$, $g_s = 2,00196$, $g_L' = 0,99975$, $g_e = 6,43 \cdot 10^{-3}$, $g_r = -2,15 \cdot 10^{-4}$, $g_e - g_r^{e'} = 3,037 \cdot 10^{-3}$, $g_r^{e'} = -0,7 \cdot 10^{-5}$. Мол. параметры v_0 , A_0 , α_A , B_0 и D_0 сопоставлены со значениями, полученными из анализа спектров $\text{CF}(X^2\Pi)$ в далекой ИК-области и полученными методом полупроводниковой лазерной спектроскопии.

В. М. Ковба

К-ф

CF⁺

отт. 18904

1984

19 Б1187. Изучение методом фотоэлектронной спектроскопии основного состояния CF⁺ через процесс ионизации CF⁺(X¹Σ⁺) ← CF(X²Π). A photoelectron spectroscopic study of the ground state of CF⁺ via the ionization process CF⁺(X¹Σ⁺) ← CF(X²Π). Dyke J. M., Lewis A. E., Morris A. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 4, 1382—1386 (англ.)

Измерены фотоэлектронные спектры с возбуждением He-Iα молекул CF, получаемых при взаимодействии атомарного фтора (МВ-разряд) с ацетальдегидом, ацетоном, ацетонитрилом или ацетиленом. Наиболее интенсивный спектр получен при использовании ацетальдегида. В спектрах наблюдалась одна полоса с разрешенной колебат. структурой, отнесенная к переходу CF⁺-(X¹Σ⁺) ← CF(X²Π) (электронная конфигурация CF(X²Π) 1σ²2σ²3σ²4σ²1π⁴5σ²2π¹; значения адиабатич. и вертикального потенциалов ионизации молекулы 9,11 ± ±0,01 и 9,55 ± 0,01 эВ соотв., ω_e (CF⁺, X) = 1840 ±

М.П.

(4) X

X. 1984, 19, N 19

CF (9) М.П.

$\pm 30 \text{ см}^{-1}$, $r_e(\text{CF}^+, X) = 1,148 \pm 0,005 \text{ \AA}$. Выполнен не-
эмпирич. ($\Delta\text{ССП}$) расчет (при $r_e(\text{CF}, X) = 1,2719 \text{ \AA}$,
метод ATMOL) вертикальных потенциалов ионизации
(ВПИ) $\text{CF}(X^2\Pi)$. Значения ВПИ с учетом корреляц.
поправки: $(2\pi)^{-1}$, состояние иона $X^1\Sigma^+ - 9,80 \text{ эВ}$;
 $(5\sigma)^{-1}$, $^3\Pi$, $^1\Pi$ 13,19 и 17,33 эВ; $(1\pi)^{-1}$, $^3\Sigma^+$, $^3\Delta$, $^1\Sigma^-$ и
 $^3\Sigma^-$, $^1\Delta$, $^1\Sigma^+$ — соотв. 17,97; 18,33; 18,65; 18,67; 19,51 эВ.
В пяти точках (интервал изменения $r_e(\text{CF}, X)$ 0,1 \AA)
рассчитаны полные ССП-энергии и получены значения
 $r_e(\text{\AA})$ и $\omega_e(\text{см}^{-1})$ для $\text{CF}(X^2\Pi)$ — соотв. 1,2594 и
1398 (эксперим. значение 1308 см^{-1}); $\text{CF}^+(X^1\Sigma^+)$
1,1351 и 1972; $\text{CF}^+(a^3\Pi)$ 1,1948 и 1744. В. М. Ковба

CF

Отм. 189004

1984

10 Л322. Исследование основного состояния иона VF^+ в ионизационном процессе $CF^+(X^1\Sigma^+) \leftarrow CF(X^2\Pi)$ методом фотоэлектронной спектроскопии. A photoelectron spectroscopic study of the ground state of CF^+ via the ionization process $CF^+(X^1\Sigma^+) \leftarrow CF(X^2\Pi)$. Dy-Re J. M., Lewis A. E., Morris A. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 4, 1382—1386 (англ.)

спектр, м.п.;
у;

Получен HeI (58,4 нм)-фотоэлектронный спектр радикалов $CF(X^2\Pi)$ в газообразном состоянии. Образование радикалов происходило при смешивании атомов F с парами ацетальдегида в реакторе, расположенном вблизи области ионизации. При объяснении спектра использованы результаты расчетов ab initio. В спектре присутствует только одна полоса с хорошо развитой колебательной структурой, отнесенная к ионизационным переходам в системе $CF(X^2\Pi) \rightarrow CF^+(X^1\Sigma^+)$. Адиабатич. и вертикальные потенциалы ионизации составляют (в эВ): $9,11 \pm 0,01$ и $9,55 \pm 0,01$ соответственно. Ана-

ф. 1984, 18, № 10

CF^+ (м.п.)

лиз колебательной структуры позволил авторам определить также молекулярные константы иона CF^+ ($X^1\Sigma^+$): $\omega_e = 1840 \pm 30 \text{ см}^{-1}$ и $r_e = 1,148 \pm 0,005 \text{ \AA}$. Результаты сопоставлены с данными других авторов для фторидов элементов первого ряда, полученными также методом фотоэлектронной спектроскопии. Библ. 42.
М. Т.

CF

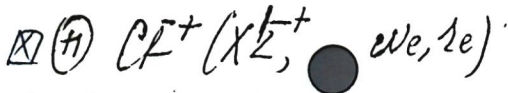
cm. 18904

1984

CF⁺

100: 111611c A photoelectron spectroscopic study of the ground state of fluoromethylidyne ion via the ionization process fluoromethylidyne ion ($X^1\Sigma^+$) $\leftarrow$ fluoromethylidyne ($X^2\Pi$). Dyke, J. M.; Lewis, A. E.; Morris, A. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, UK S09 5NH). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(4), 1382-6 (Eng). The CF($X^2\Pi$) radical was investigated by UPS and ab initio MO calcs. Only 1 band was obsd. and it was assigned to the ionization CF⁺($X^1\Sigma^+$) $\leftarrow$ CF($X^2\Pi$). For this band, the adiabatic and vertical ionization potentials were (9.11 ± 0.01) and 9.55 ± 0.01 eV, resp. Anal. of the vibrational structure in this band allowed ω_e and r_e for CF⁺($X^1\Sigma^+$) to be detd. as (1840 ± 30) cm⁻¹ and (1.148 ± 0.005) Å, resp. Comparison was made with other 1st-row diat. fluorides that have also been studied.

γ, фотохимия.
спектр



c.A. 1984, 100, N 14

CF

1984

100: 164701p The electronic spectra of CF, AlBr, GaF, and SiF₂. Griffith, William Bryan, Jr. (Ohio State Univ., Columbus, OH 43210 USA). 1983. 246 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8400207. From *Diss. Abstr. Int. B* 1984, 44(9), 2766.

(71. чекмп)

гуссермануе

(73) ~~74~~

с. А. 1984, 100, N 20



AlBr, GaF, SiF₂

CF

Om. 18266

1984

8 Б1035. Расчеты методом ДВМ- X_α оптических спектров, потенциалов ионизации и сродства к электрону радикалов CF, CF₂, CF₃, C₂F и C₂F₂. DVM X_α calculations of the optical spectra, ionization potentials and electron affinities of the CF, CF₂, CF₃, C₂F and C₂F₂ radicals. Gutsev G. L., Zyubina T. S. «Chem. Phys.», 1984, 83, № 1—2, 89—95 (англ.)

Спин-поляризованным дискретным вариационным методом (ДВМ- X_α) в двухэкспонентном базисе слейтеровских функций проведены расчеты электронного строения радикалов CF, CF₂, CF₃, C₂F и C₂F₂. В приближении переходного состояния для каждого радикала вычислены потенциалы ионизации (ПИ) валентных оболочек, энергии оптич. переходов (ОП) и сродство к электрону (СЭ). В результате комбинирования данных расчетов ПИ и энергий ОП, выполненных для различных чисел заполнения открытых оболочек, определены синглетные и триплетные составляющие ПИ и дублет-квартетные расщепления энергий

X(4)

расчет γ ,
м.п., Ae

x. 1984, 19, 48

возбужденных состояний, являющихся конечными состояниями рассмотренных ОП. Результаты расчетов ПИ и ОП хорошо согласуются с данными неэмпирич. расчетов и с известными эксперим. данными. Низшие ОП в CF и CF_2 обусловлены электронными переходами с МО неподеленной пары С на МО неподеленной пары С π -типа. Энергия этого ОП уменьшается в ряду CF , CF_2 , CF_3 , и в радикале CF_3 низшим ОП становится переход с МО неподеленной пары С на разрыхляющую МО $7 a_1^*$. Из всех рассмотренных радикалов только в CF_3 и C_2F значения СЭ положительны и составляют 1 и 2,2 эВ соотв. Релаксац. вклады для радикалов C_2F и CF_3 составляют 2,8 и 4,7 эВ для ПИ и 1,5 и 4,2 эВ для СЭ соответственно. И. А. Тополь



CF

DM-18266

1984

5 Д129. Расчеты оптических спектров, потенциалов ионизации и сродства к электрону радикалов CF , CF_2 , CF_3 , C_2F и C_2F_2 при помощи ДВМ $X\alpha$. DVM $X\alpha$ calculations of the optical spectra, ionization potentials and electron affinities of the CF , CF_2 , CF_3 , C_2F and C_2F_2 radicals. Gutsev G. L., Zyubina T. S. «Chem. Phys.», 1984, 83, № 1—2, 89—95 (англ.)

Структура, ϵ ,
 ϵ_i , A_e

Спин-поляризованным дискретно-вариационным методом $X\alpha$ (ДВМ $X\alpha$) с использованием 2-экспонентных базисов орбиталей слэтеровского типа рассчитано электронное строение радикалов CF , CF_2 , CF_3 , C_2F и C_2F_2 . В приближении переходного состояния определены потенциалы ионизации, энергии оптич. переходов и значения сродства к электрону. На основании величин полной энергии, соответствующих самосогласованным решениям для различных чисел заполнения МО открытой оболочки, при-

(44) 

фр. 1984, 18, N5

ближенно исследована структура мультиплетов возбужденных и ионизованных состояний. Результаты расчетов энергий переходов и потенциалов ионизации хорошо согласуются с эксперим. данными. Положит. значения сродства к электрону получены только для CF_3 (1,0 эВ) и C_2F (2,2 эВ).

А. В. Зайцевский



CF

Om. 18266

1984

100: 58897x DVM $X\alpha$ calculations of the optical spectra, ionization potentials and electron affinities of the fluoromethyldyne (CF), difluoromethylene (CF_2), trifluoromethyl (CF_3), fluoroethynyl (C_2F) and difluoroethenylidene (C_2F_2) radicals. Gutsev, G. L.; Zyubina, T. S. (Inst. Chem. Phys., 142432 Chernogolovka, USSR). *Chem. Phys.* 1984, 83(1-2), 89-95 (Eng). The electronic structure of a no. of the fluorocarbon radicals CF, CF_2 , CF_3 , C_2F and C_2F_2 was calcd. by the discrete-variational $X\alpha$ method within a double-zeta basis. A good agreement between theor. and exptl. data was obtained in all the cases in which a correct comparison is possible. A method for the evaluation of the av. energies of the quartet-doublet splittings for systems having an unpaired electron is suggested in the $X\alpha$ framework.

I, Ae, meop
pacnem

(44) 

c.A. 1984, 100, N 8

CF

1984

20 Б1055. ДВМ- X_α расчеты потенциалов ионизации радикалов CF, CF₂, CF₃, C₂F и C₂F₂. Гуцев Г. Л., Зюбина Т. С. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1984, № 6, 1330—1334

Дискретно-вариационным X_α -методом в двухэкспонентном базисе Клементи проведены систематич. расчеты электронной структуры ряда фторуглеродных радикалов CF, CF₂, CF₃, C₂F и C₂F₂. Получено хорошее согласие рассчитанных и эксперим. Пт ионизации во всех случаях, в к-рых возможно корректное сопоставление.

Автореферат

расчет
структурн, у

(44) X

х. 1984, 19, N 20

CF

1984

19 Б1069. ДВМ— X_α расчеты энергий оптических переходов и сродства к электрону радикалов CF, CF₂, CF₃, C₂F и C₂F₂. Гуцев Л. Л., Зюбин А. Т. С. «Теор. и эксперим. химия», 1984, 20, № 2, 141—147

Спин-поляризованным дискретно-вариационным X_α -методом (ДВМ- X_α) в двухэкспонентном базисе слейтеровских орбиталей рассчитано электронное строение

радикалов CF, CF₂, CF₃, C₂F и C₂F₂. В результате комбинирования результатов нескольких расчетов энергий одноэлектронных возбуждений в спин-поляризованном приближении определены величины синглет-триплетных расщеплений энергий ионизации и дублет-квартетных расщеплений энергий оптич. переходов для исследованных систем, имеющих один неспаренный электрон. Для каждого фторуглеродного радикала вычисле-

расчет
структур,
 T , A_e , δ ;

(74) ☒

X. 1984, 19, N 19

ны дипольные моменты и в приближении переходного состояния рассчитаны величины сродства к электрону (СЭ). В радикалах CF , CF_2 и C_2F_2 СЭ является отриц. величиной и составляет $-0,7$, $-0,8$ и $-5,6$ эВ соотв. Отриц. ионы CF_3^- и C_2F^- являются стабильными и соотв. значения СЭ составляют $+1,0$ и $+2,2$ эВ. Существенное увеличение СЭ в C_2F по сравнению с СЭ CF_3 объяснено локализацией МО неподеленной пары в C_2F преимущественно на атоме С, в то время как соотв. МО в CF_3 содержит заметный вклад от АО атомов F.

И. А. Тополь

CF

1984

1 Д97. ДВМ— X_α расчеты энергий оптических переходов и сродства к электрону радикалов CF, CF₂, CF₃, C₂F и C₂F₂. Гуцев Л. Л., Зюбина Т. С. «Теор. и эксперим. химия», 1984, 20, № 2, 141—147

расчет
энергий
оптических
переходов, Ae;

(44) ☒

ф. 1985, 18, №1.

CF⁺

DM 23835

1985

/ 103: 112486q Diode laser spectroscopy of fluoromethylidyne.
Kawaguchi, Kentarou; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan
444). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(4), 1437-9 (Eng). The fundamental
band of CF⁺ in the X' Σ^+ state was obsd. by IR diode laser
spectroscopy with magnetic field modulation of the d.c. discharge
plasma. The CF⁺ ion was generated by a hollow cathode discharge in
a mixt. of CF₄ and H₂. From an anal. of the obsd. spectra, the
following mol. consts. were obtained: $\nu_0 = 1766.3589(9)$, $B_e = 1.720$
 $366(81)$, $\alpha_e = 0.018\ 947(96)$, $D_e = 6.179(17) \times 10^{-6}$ in cm⁻¹ unit and r_e
 $= 1.154\ 272(35)$ Å, with 3 std. errors in parentheses.

(M.N.)

C.A. 1985, 103, N 14.

CF⁺

1985

McKinnon A. C.,
Lien M. H.

recomp. Can. J. Chem., 1985,
63, N 12, 3582-3586.

(Cell.  CH⁺; III)

CF⁺

1985

Б8 Б1243. Полупроводниковая лазерная спектроскопия CF⁺. Diode laser spectroscopy of CF⁺. Kawaguchi Kentarou, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 4, 1437—1439 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

На полупроводниковом лазерном спектрометре методом модуляции плазмы разряда постоянного тока магн. полем измерена вращат. структура фундаментальной полосы в ИК-спектре поглощения CF⁺(X¹Σ⁺). Ионы CF⁺ получались в разрядном источнике с полым катодом содержащем смесь CF₄ и H₂. Значения ΔG_{1/2} равновесных молек. постоянных B_e, α_e, D_e (в см⁻¹) и R_e (в Å): 1766, 3589; 1,72037; 0,01895; 6,18·10⁻⁶; 1,15427. Результаты сопоставлены с данными полученными методом ФЭС и данными неэмпирич. расчетов. В. Ковба

М.П.

Х. 1987, 19, № 8

CF_2^{2+}

[Um. 20975]

1985

CF_2^{2+}

Koch W., Frenking G.,

ab initio
calculations

Chem. Phys. Lett.,
1985, 114, N 2, 178-181.

CF⁺

(Om. 22328)

1985

Rademann K., Fockims H.-W.,
Baumgärtel H.,

A.P.

Z. Phys. Chem., 1985, 89,
N 16, 3459-3464.

CF²⁺

Im 23924

1985

104: 78331u Absolute partial and total electron impact ionization cross sections for carbon tetrafluoride from threshold up to 180 eV. Stephan, K.; Deutsch, H.; Mark, T. D. (Inst. Experimentalphys., Leopold Franzens Univ., A 6020 Innsbruck, Austria). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(11), 5712-20 (Eng). Electron impact ionization of CF₄ was studied as a function of electron energy from threshold up to 180 eV. A double focusing mass spectrometer system with an improved electron impact ion source was used, alleviating the problems of ion extn. from the source and the transmission of the extd. ions through the mass spectrometer system. Abs. partial ionization cross section functions for the prodn. of CF₃⁺, CF₂⁺, CF⁺, C⁺, F⁺, CF₃²⁺, and CF₂²⁺ in CF₄ were detd. In addn., the total (and the counting) ionization cross section functions of CF₄ was detd. (summation method) and was compared with calcs. based on classical and semiclassical binary encounter approxns. By using *n*th root extrapolation ionization energies of the following doubly charged fragment ions were derived: AE(CF₃²⁺) = 41.8 ± 0.3 eV, AE(CF₂²⁺) = 42.9 ± 0.3 eV, and AE(CF²⁺) = 52.1 ± 0.5 eV. In accordance with previous results, no stable CF₄⁺ parent ion was detected, however, a metastable dissocn. process CF₄⁺ → CF₃⁺ + F was obsd.

(AE)

(+2)


C.A. 1986, 104, N10

CF₂²⁺CF₃²⁺

CF⁺

1986

105: 180614w Spectroscopic properties of fluoromethylidyne (CF⁺) calculated by SCEP-CEPA. Botschwina, Peter (Fachber. Chem., Univ. Kaiserslautern, D-6750 Kaiserslautern, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 120(1), 23-7 (Eng). The near-equil. potential and elec. dipole moment curve of CF⁺ was calcd. by SCEP-CEPA using a basis set of 66 contracted Gaussian-type orbitals. The calcd. spectroscopic consts. are in good agreement with very recent exptl. values. The dipole moment of ¹²C¹⁹F⁺ in the vibrational ground state is -1.163 D and the absorption and strength of the 1-10 vibrational transition is 835 atm⁻¹ cm⁻² at 298 K.

(д.н. и
меоп. пацем)

C.A. 1986, 105, N 20

CF

1986

6 Л137. Спектр длинноволнового ИК-лазерного магнитного резонанса радикала CF и определение параметров основного состояния. The far-infrared laser magnetic resonance spectrum of the CF radical and determination of ground state parameters. Brown John M., Schubert Janette E., Saykally Richard J., Evenson Kenneth M. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 120, № 2, 421—434 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

(м.п.)

Получены спектры длинноволн. ИК-лазерного магн. резонанса образованного реакцией $\text{CH}_4 + \text{F}$ радикала CF на длинах волн генерации в интервале 117—657 мкм, часть из которых обеспечивает переходы меж-

ф. 1987, 18, № 6

ду системами уровней в состояниях $^2P_{1/2}$ и $^2P_{3/2}$. Приведены значения резонансных магн. полей для M -компонент переходов с $\delta M = 0, \pm 1$ и найденные по этим данным частоты в нулевом поле для вращательных переходов. В анализе спектров, проведенном для типа связи a по Гунду, использованы литер. данные по микроволн. поглощению и ЭПР. Найденная величина спин-орбитального расщепления $77,19692 \text{ см}^{-1}$ существенно точнее полученной ранее. Приведен набор параметров радикала в основном состоянии $v=0$. Обсуждаются измеренные значения g -факторов и параметров сверхтонкой структуры. Библ. 26. М. В. Т.

CF⁺

[On. 26263]

1986

Botschwina P.,

теорет.
практич.
номериз.
критер.

г. Мол. спектроскоп.,
1986, 120, N1, 23-27.



CF⁺

1986

7.Л183. Лазерная спектроскопия колебательно-возбужденного CF⁺ с модуляцией скорости. Определение молекулярной потенциальной функции. Velocity modulation laser spectroscopy of vibrationally excited CF⁺. Determination of the molecular potential function. Gruebele Martin, Polak Mark, Saykally Richard J. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 125, № 2, 165—169 (англ.)

Методом лазерной спектроскопии исследован ИК-спектр поглощения в области 1550—1850 см⁻¹ газовой смеси He/C₂F₆ в условиях электрич. разряда, промодулированного с частотой 30 кГц. Для основной колебат. полосы $\nu=0 \rightarrow 1$ и ряда горячих полос (до $\nu=6 \rightarrow 7$) иона CF⁺ с точностью 0.003 см⁻¹ измерены положения 56 вращательных линий. В приближении Данхэма определены параметры молекулярного потенциала, рассчитаны значения гармонич. частоты и молекулярных постоянных для равновесной конфигурации. Представлены оценки вращательной (650 K) и колебательной (15200 K) т-р CF⁺ в условиях электрич. разряда. В. К.

(М.Н.)

Ф. 1986, 18, № 7.

1986

CF

15 Б4391. Лазерная спектроскопия с модуляцией скорости колебательновозбужденных ионов CF^+ . Определение функции молекулярного потенциала. Velocity modulation laser spectroscopy of vibrationally excited CF^+ : determination of the molecular potential function. Gruebele Martin, Polak Mark, Saykally Richard J. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 125, № 2, 165—169 (англ.)

Методом лазерной спектроскопии с модуляцией по скорости при использовании диодных лазеров в области $1550\text{--}1850\text{ см}^{-1}$ изучены первые шесть колебательно горячих полос ионов CF^+ , к-рые получали при разряде в смеси 1,8 Торр He и 0,05 Торр C_2F_6 на частоте 30 кГц. На основании анализа 56 линий CF^+ , соотв. всем колебат. переходам от $v=0 \rightarrow 1$ до $v=6 \rightarrow 7$ определены молек. параметры CF^+ . Приведены величины этих параметров для CF^+ и взятые из лит. данные для нейтр. молекулы CF соотв. (см^{-1}): ω_e 1792, 6654; 1308,1 ω_{ex_e} 13,2298; 11,10; B_e 1,7204176; 1,416704; α_e 0,0188228; 0,018419; γ_e 0,0000407; 0,00011; $r_e =$ 1,1542551; 1,271077 А. Согласно оценкам вращат. и колебат. распределений, вращат. т-ра CF^+ в плазме равна $\sim 650\text{ К}$, а колебат. т-ра $\sim 5200\text{ К}$. В. Е. Скурат

М.П.

④ CF⁺

X. 1986, 19, N 15.

CF⁺

1986

104: 176911c Velocity modulation laser spectroscopy of vibrationally excited fluoromethylidyne (CF⁺): determination of the molecular potential function. Gruebele, Martin; Polak, Mark; Saykally, Richard J. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 125(2), 165-9 (Eng). The lowest 6 vibrational hot bands of CF⁺ were measured in a He/C₂F₆ discharge by velocity modulation laser spectroscopy. A total of 56 transitions were fit to the Dunham expansion for $v = 0-7$, yielding the parameters: $\omega_e = 1792.6654(18)$, $B_e = 1.7204176(75)$, $Y_{20} = -13.22968(54)$, and $D_0 = 62086(30)$ cm⁻¹. The rotational temp. of CF⁺ in the plasma is ~ 650 K, and the vibrational temp. is ~ 5200 K.

(u.n., D₀)

c.A. 1986, 104, N20

CF

1986

5 Д77. Неэмпирические НИК КВ потенциальные кривые, дипольные моменты и расщепления в нулевом поле для основных состояний $X^2\Pi$ молекул CF и CCl. Ab initio MRD CI potential curves, dipole moments and zero-field splittings for the $X^2\Pi$ ground states of the CF and CCl molecules. Hess Bernd A., Buenker Robert J. «Chem. Phys.», 1986, 101, № 2, 211—218 (англ.)

Проведены неэмпирич. расчеты методом НИК КВ для основных состояний $X^2\Pi$ молекул CF и CCl. Полученные потенц. кривые согласуются с известными спектроскопич. постоянными для этих молекул. Эти данные позволяют провести точные расчеты соответствующих колебательных волн. ф-ций. Обращено внимание на зависимости электрических дипольных моментов и спин-орбитальных расщеплений от выбора одноэлектронного базиса в расчетах КВ. Показано, что для этих величин лучшее согласие с эксперим. данными достигается при использовании естественных орбиталей состояний $X^2\Pi$.

Н. В. В.

М.А.

☒ (41)

фр. 1986, 18, 45

CF

(Om. 22983)

1986

ab initio
param

101: 95935m Ab initio MKD CI potential curves, dipole moments and zero-field splittings for the $X^2\Pi$ ground states of the fluoromethyldyne and chloromethyldyne molecules. Herz, Bernd A.; Buenker, Robert J. (Bergische Univ. Gesamthochsch., 5600 Wuppertal, 1 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1986, 101(2), 211-18. (Eng). Ab-initio, multiref.-double-excitation-CI calcs. at various levels of theor. treatment were done on the $X^2\Pi$ ground states of the CF and CCl mols. The resulting potential-energy curves led to quite good agreement with known spectroscopic consts. for these systems, and also allowed for the accurate computation of the corresponding vibrational wave functions. Particular attention was given to the dependence of the elec. dipole moments and spin-orbit splittings on the choice of the one-electron basis in the CI calcs. Best agreement with exptl. values for these quantities was obtained by employing the natural orbitals of $X^2\Pi$ states, in which case errors of only 0.1-0.2 D and 2.0-4.0 cm^{-1} , resp., in the computed dipole moments and zero-field splittings resulted.

☒ (7) CCl

C.A. 1986, 104, N12

CF

(От. 22983)

1986

12 Б1015. Неэмпирические потенциальные кривые, дипольные моменты и расщепления в нулевом поле для основных состояний $X^2\Pi$ молекул CF и CCl, полученные методом конфигурационного взаимодействия. Ab initio MRD CI potential curves, dipole moments and zero-field splittings for the $X^2\Pi$ ground states of the CF and CCl molecules. Hess Bernd A., Buenker Robert J. «Chem. Phys.», 1986, 101, № 2, 211—218 (англ.)

м.п., потенц.
кривые

В области межъядерных расстояний 2—4,5 ат. ед. рассчитаны потенциальные кривые, дипольные моменты

(4) 17

Х. 1986, 19, № 12

и постоянные спин-орбитального расщепления для основных состояний симметрии $^2\Pi$ молекул CF и CCl . Использованы два набора базисных АО (на основе двух- и трехэкспонентных наборов), различающиеся также поляризац. и диффузными орбиталями и связевыми ф-циями. Рассмотрены несколько вариантов приближения configuraц. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям и последующей экстраполяцией по энергии. Аппроксимацией рассчитанных точек определены потенциальные кривые и спектроскопич. постоянные. Приведены оценки энергий диссоциации. Установлено, что распределение электронной плотности вблизи равновесных межъядерных расстояний отвечает полярности C-X^+ , где $\text{X}=\text{F}$ или Cl . А. В. Немухин

CF⁺

1986

У 17 Б1187. Миллиметровый и субмиллиметровый спектр CF⁺. The millimeter and submillimeter spectrum of CF⁺. Plummer G. M., Anderson T., Herbst E., De Lucia F. C. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 4, 2427—2428 (англ.)

С использованием метода получения повышенных концевых ионов («J. Chem. Phys.», 1983, 78, 2312) измерены три вращат. перехода ($J' \leftarrow J''$) в спектре поглощения ионов CF⁺(X¹Σ⁺): 2←1, 3←2 и 4←3 соотв. при 205170,449; 307744,368 и 410304,781 МГц). Рассчитаны значения вращат. постоянных CF⁺(X¹Σ⁺) $B_0=51294,1143$ и $D_0=0,18803$ МГц. В. М. Ковба

(м.п.)

х. 1986, 19, N 17

CF⁺

1986

9 Л178. Миллиметровый и субмиллиметровый спектры иона CF⁺. The millimeter and submillimeter spectrum of CF⁺. Plummer G. M., Anderson T., Herbst E., De Lucia F. C. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 4, 2427—2428 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

(М.П.)

Исследован МВ-спектр иона CF⁺, полученного в тлеющем разряде через смесь CF₄+H₂ при давл. 25—75 мТор. Вблизи 205, 307 и 410 ГГц идентифицированы линии вращательных переходов с $J=2\leftarrow 1$, $3\leftarrow 2$ и $4\leftarrow 3$, соответственно, в основном электронно-колебательном состоянии X¹Σ⁺. Определены значения вращательной и центробежной постоянных: $B_0=51294,1143$, $D_0=0,18803$ МГц.

М. Р. Алиев

ср. 1986, 18, №9

CF⁺

Om-23772

1986

104: 118932z The millimeter and submillimeter spectrum of fluoromethylidyne. Plummer, Grant M.; Anderson, Todd; Herbst, Eric; De Lucia, Frank C. (Dep. Phys., Duke Univ., Durham, NC 27706 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(4), 2427-8 (Eng). The technique reported by D. et al. (1983) for the prodn. of significantly enhanced concns. of mol. ions for spectroscopic study was used for the detection and measurement of the millimeter and submillimeter wave spectrum of CF⁺. The identification of the spectrum as that of CF⁺ rests upon its excellent fit to the linear mol. model, its significant enhancement due to the axial magnetic field, chem. considerations, and the close agreement between the obsd. rotational frequencies and predictions based on the IR work of K. Kawaguchi and E. Hirota (1985). CF⁺ in its ground electronic state is ¹Σ and the obsd. lines were fit to the frequency expression $\nu = 2B_0(J + 1) - 4D_0(J + 1)^3$. The rotational consts. of CF⁺ (X ¹Σ⁺) were detd. as $B_0 = 51,294.1143(26)$ MHz and $D_0 = 0.18803(10)$ MHz.

Граням.
ночно.

C.A. 1986, 104, N 14.

CF

. 1986

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

revis.

CB 836

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

(cer. Li₂; III)

CF

1986

Tomasello P., von Niessen W.,
et al.

J;

J. Electron Spectrosc. and
Relat Phenom., 1986, 40,
N2, 193-198.

(cw. NO; III)

CF²⁺

1987

4 Б4032. Реакции разделения зарядов дикатионов CF²⁺ и CCl²⁺. Charge separation reactions of the CF²⁺ and CCl²⁺ dications. Curtis J. M., Brenton A. G., Boyd R. K. «Chem. Phys.», 1987, 116, № 2, 241—248 (англ.)

С помощью масс-спектрометра с двойной фокусировкой и электростатич. системой анализа кинетич. энергии ионов исследованы спонтанное и столкновительное разделение зарядов дикатионов: CX²⁺ → X⁺ + C⁺, где X = F, Cl, J. Ионы CX²⁺ генерировались в ионном источнике масс-спектрометра при электронной бомбардировке соотв. нейтр. молекул CH₃X. Определены величины высвобождающейся кинетич. энергии T, составляющие в ед. эВ для X = F, Cl и J соотв. 5,0; 5,1 и 4,4 для процесса мономолек. диссоциации и 5,6—7,7; 8,3 для столкновительной диссоциации. С помощью полуэмпирич. метода рассчитаны кривые потенциальной энергии для основного и первых трех низколежащих электронных уровней CF²⁺ и CCl²⁺. Обсуждаются каналы распада на различные состояния атомов. Н. И. Бутковская

(2i)

(H) X

X. 1988, 19, № 4

CF

011 28313

1987

11 Б1176. Спектроскопия резонансно усиленной двух-фотонной ионизации полос $3p\pi D^2\Pi_r(v'=0, 1, 2) \leftarrow \leftarrow \leftarrow X^2\Pi_r(v''=0)$ радикала CF между 355 и 385 нм. Two-photon resonance-enhanced multiphoton ionization spectroscopy of the $3p\pi D^2\Pi_r(v'=0, 1, 2) \leftarrow \leftarrow \leftarrow X^2\Pi_r(v''=0)$ bands of the CF radical between 355 and 385 nm. Johnson III R. D., Hudgens J. W. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 24, 6189—6191 (англ.)

Методом резонансно усиленной многофотонной (2+ +1) ионизации исследована вращат. структура полос $0 \rightarrow 0$, $1 \rightarrow 0$ и $2 \rightarrow 0$ перехода $3p\pi D^2\Pi_r \rightarrow X^2\Pi_r$ молекулы CF в обл. 355—385 нм. Радикалы CF получали в проточном реакторе при взаимодействии атомарного фтора с CH_3F . Для возбуждения использовали узкополосный ($0,2 \text{ см}^{-1}$) импульсный перестраиваемый лазер на красителе. Значения (в см^{-1}) рассчитанных молек. постоянных CF в состоянии $D^2\Pi_r$: $T_e = 52270,66$, $\omega_e = 1807,32$, $\omega_e x_e = 13,96$, A (спин-орбитальное расщепление) $= 6,2$, $B_e = 1,7286$, $\alpha_e = 0,0191$. Для отдельных уровней состояния D приведены v_0 , $A_{v'}$, $B_{v'}$, $D_{v'}$. Результаты сопоставлены с данными, полученными методом обычной вакуумной УФ-спектроскопии поглощения. В. М. Ковба

M. A.

X. 1988, 19, N 1P

CF

от 28313

1987

у 5 Л1537. Усиленная двухфотонным резонансом многофотонная ионизационная спектроскопия полос $3p\pi D^2\Pi_r$ ($v'=0; 1; 2$) $\leftarrow\leftarrow X^2\Pi_r$ ($v''=0$) радикала CF между 355 и 385 нм. Two-photon resonance-enhanced multiphoton ionization spectroscopy of the $3p\pi D^2\Pi_r$ ($v'=0; 1; 2$) $\leftarrow\leftarrow X^2\Pi_r$ ($v''=0$) bands of the CF radical between 355 and 385 nm. Johnson III Russell D., Hudgens Jeffrey W. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 24, 6189—6191 (англ.)

Исследован спектр усиленной двухфотонным резонансом трехфотонной ионизации молекулы CF в диапазоне 355—385 нм. Зарегистрированные полосы поглощения идентифицированы с двухфотонными переходами между состояниями $X^2\Pi_r$ ($v''=0$) и $3p\pi D^2\Pi$ ($v'=0; 1; 2$). Проведен анализ колебательно-вращательной структуры спектра и определены спектроскопич. постоянные $D^2\Pi$ -состояний. Сравнение полученных результатов с измерением спектров поглощения радикала CF в ВУФ-диапазоне показало, что они согласуются между собой, а их различия позволили определить некоторые преддиссоциирующие состояния.

М. Ю. Н.

ф 1988, 18, №5

CF

(DM 29079)

1987

Hudgens J.W., Dulcey
C. S., et al.

спектр,
Ридберг.
соевоям.

J. Chem. Phys., 1987,
87,  8, 4346-4558

FC

|om.27890|

1987

Карачевцев Т.В.,

(Ac)

ж. физ. химии, 1987,
61, N 8, 2070-2074.



CF⁺

(OM. 27881)

1987

(29083)

Peterson L.A., Woods R.C.,

meop. J. Chem. Phys., 1987,
parum 87, N 8, 4409 - 4418.

CF⁺

com. 26576

1987

Sears T. J.,

Библиогр.
эксперим.
исследов.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 2, 83,
N1, 111-126.

CF

1988

 $(\tau A^1\Sigma^+)$

110: 15440g. The radiative lifetime of fluoromethylidyne ($CF(A^1\Sigma^+)$). Booth, J. P.; Hancock, G. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3QZ). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 150(6), 457-60 (Eng). The radiative lifetimes of the $v' = 0$ and 1 levels of $CF(A^1\Sigma^+)$ in the gas phase were measured by observing the fluorescence decay following pulsed laser excitation. The values, 26.7 ± 1.8 and 25.6 ± 1.8 ns, resp., are $\sim 30\%$ larger than those previously obsd.

C.A. 1989, 110, N 2

CF

1988

2 Л412. Радиационное время жизни $CF(A^2\Sigma^+)$. The radiative lifetime of $CF(A^2\Sigma^+)$ / Booth J. P., Hancock G. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 150, № 6.— С. 457—460.— Англ.

По затуханию возбуждаемой лазером флуоресценции определено время жизни колебательных уровней $v=0$ и 1 состояния $A^1\Sigma$ радикала CF. Полученные значения $26,7 \pm 1,8$ и $25,6 \pm 1,8$ нс на 30% больше, чем полагали до сих пор.

В. С. Иванов

М.П.

ф. 1989, № 2

$C_4F_2^+$

[om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1988, 17, N2, 495.

CF⁻ 1988
Minaev B. F., Buketova,
A. E., et al.

мисл. Изв. Акад. Наук Каз.
рәс. SSR, Ser. Khim. 1988,
Te, D; (3), 26-31.

●
(ср. NH; III)

CF +

1988

Peterson Kirk A.,
Woods R. Claude.

et. n. J. Chem. Phys. 1988, 89, n8,
C. 4929-4944.

(cur. AEF; III)

CF

(DM. 30991)

1988

Tokue I., Ito Y.,

спектр
исследования
и т.д.

Chem. Phys. 1988, 125,
N 2-3, 347-353.

CF

1989

Baker J.

J. Chem. Phys. 1989.

u. n.

91, N 3. 1789-1795.

(с.  BeH; III)

CF

(DM 32778)

1989

Gilo H., Karplus M.,

J. Chem. Phys., 1989, 91,
N3, 1719-1733.

geometry,
minimum
vacuum

Basis set and polarization
function effects on optimized
geometries ● and harmonic

frequencies at the second-
-order Møller-Plesset
perturbation level:

CF⁺

1989

Leiter K., Scheier P.
et al.

поперечн.
сечение
ионизации

Int. J. Mass Spectrom.
Ion Processes 1989,
87(2), 209-24.

(см. $\bullet$ CF₂Cl⁺; II)

CF⁺

1989

Pouchar Claude.

растрём
поляр-
ности

J. Chim. Phys. Phys.-
Chim. Biol. 1989,
86 (10), 2043-56.

( cell. BF; III)

CF

От 33 200

1989

11 Б1057. Теоретическое определение радиационных времен жизни состояний $A^2\Sigma^+$ и $B^2\Delta$ CF. A theoretical determination of the radiative lifetimes of the $A^2\Sigma^+$ and $B^2\Delta$ states of CF / Rendell A. P., Bauschlicher C. W., Langhoff S. R. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 163, № 4—5.— С. 354—358.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями (КВ НИК 1+2) в базе МО, полученных многоконфигурац. методом ССП с усреднением по состояниям рассчитаны энергетич. и радиац. х-ки основного $X^2\Pi$ и возбужденных ридбергова $A^2\Sigma^+$ и валентного $B^2\Delta$ состояний CF. Расчеты выполнены в интервале межъядерных расстояний 1,8—4,0 ат. ед. в базе гауссовых орбиталей, сгруппированных к натуральным атомным и дополненным диффузны-

М.П.

Х. 1990, № 11.

ми ф-циями, со структурой [7s6p3d1f] на С и F. Спектроскопич. постоянные для всех состояний хорошо согласуются с экспериментом. Вычислены матричные элементы дипольного момента переходов и радиац. времени жизни (РВЖ) 4-х низших колебат. состояний (КС) терма $A^2\Sigma^+$ и двух- $B^2\Delta$. Для терма $A^2\Sigma^+$ оценки РВЖ двух низших состояний лежат в рамках разброса эксперим. данных; для 3-го и 4-го состояний время жизни с учетом подбарьерного туннелирования меньше, чем для радиац. распада, что объясняет отсутствие соотв. компонент в спектрах испускания. Отклонение на 15% оценок РВЖ для колебат. состояний терма $B^2\Delta$ от эксперим. отнесено за счет ошибок в последних.

В. Ф. Хрустов

CF

Om 33 200 1989

112: 27336g A theoretical determination of the radiative lifetimes of the $A^2\Sigma^+$ and $B^2\Delta$ states of fluoromethylidyne (CF). Rendell, Alistair P.; Bauschlicher, Charles W., Jr.; Langhoff, Stephen R. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 163(4-5), 354-8 (Eng). The potential curves for the $X^2\Pi$, $A^2\Sigma^+$ and $B^2\Delta$ states of the CF mol. were detd. using large Gaussian basis sets and accounting for electron correlation with the CASSCF/multireference CI method. The transition moment function between the $X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+$ state dramatic change at 2.6 a_0 where an avoided crossing between the $A^2\Sigma^+$ and a higher lying $2\Sigma^+$ state causes a significant change in the character of the wave function. Both the $A^2\Sigma^+$ and $B^2\Delta$ states are calcd. to be metastable species dissociating to $C(3P) + F(2P)$. For the $A^2\Sigma^+$ state both the radiative lifetime and unimol. decay lifetime for tunneling through the potential barrier were computed.

no cm

$X^2\Pi$, $A^2\Sigma$,
 $B^2\Delta$ com.

C.A. 1990, 112, N 4

CF⁺

1989

Wong Ming Wah,
Nobes Ross H. et al.

расчёт
свойств
и др

J. Chem. Phys. 1989.

91 (5), 2971-9.

(C₆₀ N₂; III)

CF⁺

077 34365 1990

21 Б1155. Численные потенциальные функции двухатомных молекул. f -Потенциалы CF⁺ и CCl⁺. Numerical potential functions for diatomic molecules. The f -potentials of CF⁺ and CCl⁺ / Gruebele Martin // Mol. Phys.— 1990.— 69, № 3.— С. 475—496.— Англ.

Рассмотрена задача восстановления потенциальных кривых двухатомных молекул по спектроскопич. данным. Предложена новая форма пробной потенциальной ф-ции, т. н. f -потенциал, представляющая собой ряд $\sum D_i (1 - f(r))^i$. Такое представление обеспечивает свободу выбора ф-ции f и достаточную гибкость аппроксимирующей ф-ции. Рассмотрены обобщения известных модельных ПТ (Саймонса—Парра—Финлана, Огилви—Типпинга, Морзе, Данхэма, Таккара). Данные различных спектроскопич. экспериментов использованы для восстановления потенциальных кривых CF⁺ и CCl⁺ с помощью численного решения колебат.-вращат. ур-нения Шредингера для f -потенциала. Изучено влияние выбора различных форм f -ф-ций: результаты сравниваются с данными методов Риса—Клейна—Ридберга и Данхэма.

(4)

14

Х. 1990, № 21

потенц.
ф-ии

А. А. Бучаченко

CF⁺

OM 34365

1990

18 Б1231. Численные потенциальные функции для двухатомных молекул. f -Потенциалы для CF⁺ и CCl⁺. Numerical potential functions for diatomic molecules. The f -potentials of CF⁺ and CCl⁺ / Gruebele Martin // Mol. Phys.— 1990.— 69, № 3.— С. 475—496.— Англ.

Представлены новые ф-лы для ф-ций потенциальной энергии двухатомных молекул, обладающие простыми аналитич. св-вами. Данная параметризация более удобна для прямого численного интегрирования. Предложенный f -потенциал оттестирован на примере основного электронного состояния галогеноуглеродных ионов CF⁺ и CCl⁺ и сопоставлен со станд. выражениями для потенциальной энергии. Этот f -потенциал более гибок и точно воспроизводит потенциальную энергию, к-рая легко м. б. дополнена информацией, навсегда доступной из экспериментов высокого разрешения, за счет введения поправок, связанных с нарушением борн—оппенгеймерового приближения. Результаты сравнены со станд. квазиклассич. приближениями (Данхем и РКР).

Е. А. Пазюк

М.П.

(H) CCl⁺

X. 1991, N 18

CF⁺

Om 34365

1990

112: 223465n Numerical potential functions for diatomic molecules. The f-potentials of fluoromethylidyne and chloromethylidyne (CF⁺ and CCl⁺). Gruebele, Martin (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Mol. Phys.* 1990, 69(3), 475-96 (Eng). Recently, we have reported diode laser measurements of the halocarbons CCl⁺ and CF⁺ vibrationally excited up to the $v = 7$ state. A more detailed anal. is given of their potential functions as test cases for direct numerical integration of the rovibrational Schroedinger equation. The f-potential, a new parameterization more suitable for numerical fitting, is derived by mapping the potential function into an anal. simpler representation. The results are compared to the std. semiclassical approaches, which are found to have shortcomings in the precision with which they represent spectroscopic data. These problems can become severe if one desires to det. corrections to the Born-Oppenheimer approxn.

Kondam.
NOMAN.

(7) ~~CCl~~ CCl⁺

C.A. 1990, 112, N24

CF⁺

1990

6 Д133. Спектроскопические свойства электронных состояний $X^1\Sigma^+$ и $a^3\Pi$ в CF^+ , SiF^+ и CCl^+ , изученные методом НИК-КВ. Spectroscopic properties of the $X^1\Sigma^+$ and $a^3\Pi$ electronic states of CF^+ , SiF^+ , and CCl^+ by multireference configuration interaction / Peterson Kirk A., Woods R. Claude, Rosmus Pavel, Werner Hans-Joachim // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 3.— С. 1889—1894.— Англ.

М. П.

Функции потенц. энергии и дипольных моментов рассчитаны методом НИК-КВ для CF^+ , SiF^+ и CCl^+ в их основных ($X^1\Sigma^+$) и первых возбужденных ($^3\Pi$) электронных состояниях с использованием больших гауссовых базисов. Сопоставление с доступными эксперим. данными показало, что рассчитанные значения r_e и ω_e имеют точность 0,006 Å и 7 см⁻¹ соответственно. Величины T_e для переходов $a^3\Pi-X^1\Sigma^+$ получены равными 4,77; 4,78 и 3,19 ($\pm 0,05$) эВ для CF^+ , SiF^+ и CCl^+ соответственно. Для всех катионов в состоянии $^3\Pi$ определены вращательные и колебательные постоянные. Из полученных ф-ций потенц. энергии и дипольного момента рассчитаны вероятности ИК-переходов, которые оказались большими для обоих состояний.

Н. В. В.

ф. 1991, № 6

CF⁺

1990

113: 140957u Spectroscopic properties of the X $^1\Sigma^+$ and a $^3\Pi$ electronic states of fluoromethylidyne, fluorosilyliumylidene, and chloromethylidyne (CF^+ , SiF^+ , and CCl^+) by multireference configuration interaction. Peterson, Kirk A.; Woods, R. Claude; Rosinus, Pavel; Werner, Hans Joachim (Dep. Chem., Univ. Wisconsin, Madison, WI 53706 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(3), 1889-94 (Eng). Potential energy and dipole moment functions were calcd. using multireference CI (MRCI) techniques for CF^+ , SiF^+ , and CCl^+ in their ground $^1\Sigma^+$ and 1st $^3\Pi$ electronic states with large Gaussian basis sets. Where exptl. data is available, the MRCI values of r_e and ω_e are accurate to within 0.006 Å and 7 cm^{-1} , resp. The T_e values for the a $^3\Pi$ -X $^1\Sigma^+$ transitions for CF^+ , SiF^+ , and CCl^+ are 4.77 ± 0.05 eV, 4.78 ± 0.005 eV, and 3.19 ± 0.05 eV (3.16 eV), resp. (exptl. value in parentheses). Rotational and vibrational spectroscopic consts. are also predicted for all 3 species in the $^3\Pi$ state. IR transition probabilities were calcd. from the MRCI potential energy and dipole moment functions. Intense IR transitions are predicted for all 3 species in both their ground and 1st excited state.

 $X^1\Sigma, a^3\Pi$

M.A.

pacem

(+2) 

C.A. 1990, 113, N 16

CF²⁺

DM 34662

1990

2 B1019. Неэмпирический расчет состояний $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ молекулы CF^{2+} . Ab initio calculation of the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ states of CF^{++} / Senekowitsch Jörg, O'Neil Stephen V., Werner Hans-Joachim, Knowles Peter J. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 1.— С. 562—569.— Англ.

В базисе 92 сгруппир. гауссовых орбиталей методом конфигурац. вз-вия с учетом одно- и двухкратно возбужденных (относительно исходного набора) конфигураций рассчитаны потенциальные кривые, дипольные моменты, моменты перехода и спектроскопич. постоянные состояний $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ молекулы CF^{2+} . В качестве набора исходных конфигураций использовано полное активное пространство на орбиталях $3\sigma \div 6\sigma$ и $1\pi \div 2\pi$ с замороженными остовными $1s$ -орбиталями; применена также группировка возбужденных конфигураций, позво-

М.П.

X.1991, №2

лившая уменьшить размер матриц на 1—2 порядка. Оба состояния метастабильны, причем $X^2\Sigma^+$ имеет глубокий минимум при $R_e=2,139$ ат. ед. с $D_e=-0,95$ эВ и высотой барьера $h=4,99$ эВ. Для состояния $A^2\Pi$ соотв-щие величины равны $R_e=3,073$, $D_e=-3,79$ и $h=1,04$. Приведены времена жизни отдельно для радиац. и туннельных переходов для колебат. уровней $X^2\Sigma^+$ $v=0-31$, $J=0$ и $A^2\Pi$ $v=0-16$, $J=0$. П. В. Ганелин



CF²⁺

(Im 34662)

1990

113: 138863s Ab initio calculation of the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ states of fluoromethanediylumyl (CF_2^+). Senekowitsch, Jorg; O'Neil, Stephen V.; Werner, Hans Joachim; Knowles, Peter J. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Natl. Inst. Stand. Technol., Boulder, CO 80309-0440 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(1), 562-9 (Eng). The potential energy, dipole moment, and electronic transition moment curves of the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ states of the CF_2^+ ion have been calcd. from internally contracted multireference CI wave functions with full-valence CAS-SCF ref. wave functions and large Gaussian basis sets. Both states are predicted to be metastable with equil. geometries $R_e(X^2\Sigma^+) = 2.139$ bohrs and $R_e(A^2\Pi) = 3.073$ bohrs. These min. lie above and are sepd. from their asymptotes by broad barriers with a height of 4.99 eV ($X^2\Sigma^+$) and 1.04 eV ($A^2\Pi$), resp. Similar to the isoelectronic NO^2+ , the Π state intersects the barrier of the $X^2\Sigma^+$ state. Radiative and nonradiative (tunneling) lifetimes of all vibrational levels have been calcd. by std. quantum-mech. scattering techniques.

$A^2\Pi$ u $X^2\Sigma$

COCMOER.

M.N. parret

C.A. 1990, 113, N16

CF⁺

1990

114: 156621q Potential function for the ground state of the molecular carbon monofluoride (CF⁺) ion. Surkus, A. (Siauliai Pedagog. Inst., USSR). *Liet. Fiz. Rinkinys* 1990, 30(5), 534-9 (Russ). The potential energy function for the ground state of CF⁺ in a form of perturbed Morse potential was calcd. based on exptl. data of mol. spectroscopic const. (M. Gruebele, et al., 1986) and dissocn. energy (J. M. Dyke, et al., 1984). The obtained 12-parameter perturbed Morse potential reproduces with sufficient accuracy the vibrational-rotational transitions data.

помещ.
кривая в
основном
состоянии

С.А. 1991, 114, N 16

CF

1991

Gutsev G. L., Ziegler T.

электрон.
строение

J. Phys. Chem. 1991.

95, N19. C. 7220-7228.

(см. ● CH; III)

CF-

№ 36870

1992

Гуцев Т. Л.

структура,
теор. исслед.

Ис. раз. Железы, 1992,
66, N 10, 2678-2687.

Теоретическое исследование
структур  алгебр
CF_n (n = 1 ÷ 5)

FC

(om. 37773)

1994

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

$^2\Pi_2$,
D,
эксперим.; теорет-
расчет; J. Phys. Chem., 1994,
98, N40, 9931-44.

1994

F: CF₄⁺

P: 3

11B1105. Нарушение симметрии и его влияние на энергии корреляции для ионов CF₄⁺ и CF₃²⁺. Symmetry breaking and its influence on the correlation energy for CF₄⁺ and CF₃²⁺ ions / Garcia de la Vega J. M., San Fabian E. // Int. J. Quantum Chem. - 1994. - 52, N 4. - С. 947-956. - Англ.

В рамках неэмпирич. квантово-хим. методов исследовано нарушение симметрии в трех системах с открытой оболочкой: молек. ионах CF⁺ (D[2d] и C[2v]) и CF₃⁺ (D[3h]). Энергию корреляции в молек. ионах оценивали в приближениях теории возмущений различных порядков, конфигурац. вз-вля и теории функционала плотности; начальные приближения волновой ф-ции рассчитывались в разных приближениях метода ХФ. Обсуждено влияние начального приближения и симметрии волновой ф-ции и метода расчета корреляц. поправки на величину энергии корреляции исследуемых молек. ионов. Исследована устойчивость ионов CF₄⁺ и CF₃⁺ к различным каналам мономолек. распада.

X. 1996, N //

CF

1994

120: 331652v Comment on "Temperature-enhanced electron detachment from $C_6F_8^-$ negative ions" [J. Chem. Phys. 98, 7875 (1993)]. Chen, E. C. M.; Chen, E. S. D.; Wentworth, W. E. (Univ. Houston, Clear Lake, Houston, TX 77058 USA). J. Chem. Phys. 1994, 100(9), 6981-2 (Eng). A polemic on P. G. Datskog et al. (ibid (1993) 98, 7875). The claim in the subject article that the lowest state of CF has an electron affinity of 0.52 eV is disputed. Exptl. evidence is presented for a state with affinity of 0.86 0.03 eV.

(Ae)

C. A. 1994, 120, N 26

CF

1994

120: 310073s High-resolution FTIR spectrum of the CF radical. Nakanaga, Taisuke; Ito, Fumiyuki; Takeo, Harutoshi (Natl. Inst. Mater. Chem. Res., Tsukuba, Japan 305). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 165(1), 88-96 (Eng). The high-resoln. IR absorption spectrum of the fundamental band of CF radical was measured with an FTIR spectrometer. Reliable mol. consts. of the vibrationally excited state were obtained. The vibrational transition dipole moment was estd., via R. Herman-R.F. Wallis (1955) theory, to be $\mu_{10} = -0.14(7)$ D from the anal. of the intensity distribution of the vibration-rotation lines. The sign of the transition dipole moment is opposite to that of the permanent dipole moment.

ИК спектр
высокого
разрешения

С. А. 1994, 120, № 24

CF
CF⁻

1994

* 20 Б114. Сродство к электрону CF. The electron affinity of CF / Xie Yaoming, Schaefer Henry F. (III) // J. Chem. Phys. — 1994 — 101, № 11 — С. 10191—10192 — Англ.

Неэмпирическим методом ССП, а также с учетом конфигурац. вз-виз с использованием расширенных базисов, дополненных диффузными ф-циями, получены длины связей и энергии CF и CF⁻. Величина адиабатич. сродства к электрону CF найдена равной $0,45 \pm 0,05$ эВ. Проведено сопоставление с предыдущими расчетами и эксперим. данными. Г. К.

М.П.

Х. 1995, N 20

1995

F: CF4-

P: 3

7B1101. Структура аниона $\text{CF}[4]\{-\}$ и сродство к электрону молекулы $\text{CF}[4]$. The structure of the $\text{CF}[4]\{-\}$ anion and the electron affinity of the $\text{CF}[4]$ molecule / Gutsev Gennady L., Adamowicz Ludwik // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 23. - С. 9309-9314. - Англ.

В втором порядке теории возмущений Меллера-Плессета (МП2) в базисе 6-31+ГФ{*} исследованы стационарные точки ППЭ аниона $\text{CF}[4]\{-\}$, а также рассчитаны геометрич. параметры и частоты гармонич. колебаний основных состояний частиц $\text{CF}[4]$, $\text{CF}[3]$ и $\text{CF}[3]\{-\}$. Энергии уточнены в четвертом порядке МПЧ. Установлено, что локальному минимуму ППЭ аниона $\text{CF}[4]\{-\}$ соответствует конфигурация с симметрией $\text{C}[s]$, тогда как формы $\text{C}[2v]$ и $\text{C}[3v]$ являются переходными состояниями. В приближении Борна-Оппенгеймера вертикальное сродство $\text{CF}[4]$ к электрону равно нулю. Адиабатическое сродство имеет отрицательную величину - 1.2 эВ (на уровнях теории МП2 и МП4). Взаимодействие с электроном инициирует процессы фрагментации $\text{CF}[4]$ на $\text{CF}[3]+\text{F}\{-\}$ и $\text{CF}[3]\{-\}+\text{F}$, рассчитанные энтальпии K -рых хорошо согласуются с эксперим. величинами. Библ. 56.

Р.Ж.Х. N 7, 1996.

CF

1995

23 Б1182. Спектроскопия лазерного магнитного резонанса в дальней инфракрасной области колебательно-возбужденных радикалов CF. Far-infrared laser magnetic resonance spectroscopy of vibrationally excited CF radicals / Liu Yuyan, Liu Zhu-an, Davies Paul B. // J. Mol. Spectrosc. — 1995 — 171, № 2 — С. 402—419 — Англ.

Методом лазерного магнитного резонанса в дальней ИК-области. Исследованы чисто вращательные спектры радикалов $\text{CF}(^2\Pi_{3/2}^2\Pi_{1/2})$ в возбужденном колебательном, состоянии $\nu=1$. Рассчитаны и приводятся вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения, Λ -удвоения, спин-вращательного взаимодействия, параметры GTC (^{19}F)CF ($X^2\Pi$, $\nu=1$). В. М. Ковба

М.А.

X. 1995, N 23

CF

1995

Su, Keti; Deakyn, C.A.,
et al

(2) Nali Huaxue Xuebao
1995, 11 (10), 865-9

(Chin. Ref., I)

CF

1996

125: 341769f Cationic and anionic states of CF, CCl, SiF and SiCl. Some new information derived using translational energy spectroscopy. Reid, C. J. (EPSRC Mass Spectrometry Service Centre, Chemistry Department, University of Wales, Swansea, Singleton Park, Swansea, UK SA2 8PP). *Chem. Phys.* 1996, 210(3), 501-511 (Eng). Translational-energy spectroscopy was applied to collisional-excitation and charge-inversion reactions of CF^+ , CCl^+ , SiF^+ and SiCl^+ to gain energetic and bond-length information about the anionic and excited-cationic states of the title mols. The excitation spectra revealed that the $\tilde{a}^3\Pi$ state, known in CCl^+ and SiCl^+ , has a term energy of 4.85 ± 0.15 eV in CF^+ and 4.70 ± 0.20 eV in SiF^+ , while the $1^1\Pi$ state, known in CCl^+ , is not below the dissociation threshold in CF^+ , SiF^+ and SiCl^+ . These data, and bond-length ests. for the $\tilde{a}^3\Pi$ states, are consistent with documented ab initio predictions except for r_e of $\text{CF}^+(\tilde{a}^3\Pi)$ which seems to be larger than 1.21 Å. Charge-inversion spectra indicated that beams of monohalide cations formed from the tetrahalides contained substantial proportions of $\tilde{a}^3\Pi$ -state ions, and, in the case of CCl, SiF and SiCl, the broadness of spectral peaks was taken as evidence for the stability of the $\tilde{a}^3\Delta$ -state anion. Adiabatic electron affinities are 0.49 ± 0.15 eV, 0.89 ± 0.20 eV, 1.34 ± 0.30 eV and 1.40 ± 0.30 eV for the title mols., resp.

(Ae)



C.A. 1996, 125, ~26

CF, CCl, SiF, SiCl

Reid G.J.

1996

$$A(\text{CF}) = 0.44 \pm 0.15 \text{ eV}$$

$$\text{CCl} = 0.89 \pm 0.20 \text{ eV}$$

$$\text{SiF} = 1.34 \pm 0.30 \text{ eV}$$

$$\text{SiCl} = 1.40 \pm 0.32 \text{ eV}$$

CF⁺ a³Π 4.78 ± 0.15
SiF⁺ a³Π 4.70 ± 0.2
CCl⁺ - - - - - (a³Π)
overlaid
copy

Chem. Phys. 1996, 210, p. 501-511.

Cationic and anionic

states of CF, CCl, SiF & SiCl

Some new information derived
using translational energy
spectroscopy



CF

1996

124: 355145r Determination of the rotational and vibrational constants of photolytically generated CF radicals by REMPI measurements. Wollbrandt, J.; Rossberg, M.; Strube, W.; Linke, E. (Department Chemistry, Humboldt University, D-12484 Berlin, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 176(2), 385-396 (Eng). Transient free CF radicals were studied with resonance enhanced multiphoton ionization (REMPI). The CF radicals were generated from the gaseous (50-200 Pa) halocarbons CCl_3F , CCl_2F_2 , CClF_3 , 1,2- $\text{C}_2\text{Cl}_2\text{F}_4$, C_2ClF_3 , and C_6F_6 by a combined IR and UV/visible laser photolysis. Because of the small absorption of the halocarbon mols. in the dye laser range used (328-485 nm) a preceding prodn. of precursors (capable of absorbing dye laser photons) was necessary, which was achieved by IR multiphoton dissocn. of the parent mols. with a TEA CO_2 laser pulse. In a subsequent absorption of UV/visible dye laser photons the precursors were photolyzed yielding CF radicals. These could be spectroscopically studied by their REMPI signals in a $(2 + 1)$ -photon absorption process in the focussed radiation of the same dye laser pulse. About 20 vibrational bands were measured, rotationally resolved, and were assigned to a 2-photon $3p, \pi \text{ D } ^2\Pi_r \leftarrow \text{X}^2\Pi_r$ resonant transition followed by 1-photon absorption for direct ionization of CF. Compared to the cold CF radicals,

транс-
и
конфам-
нострох.

C. A. 1996, 124, N 26

commonly extd. from a flow reactor, the laser-photolytically generated CF radicals are vibrationally and rotationally extremely excited ($v'' \leq 12$, $J \leq 80.5$). Using the wide rotational contour of the vibrational bands the authors could det. with greater precision than before the electronic, vibrational, and rotational consts. T_e , ω_e , $\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$, A_v , B_v , and D_v , resp., for the Rydberg state $3p\pi$ D $^2\Pi_r$ ($v' = 0-6$) and the electronic ground state X $^2\Pi_r$ ($v'' = 0-12$). Based on these consts. the Morse and the Durham potential curves for both states were calcd. A study of missing and shifted rovibronic lines of the D state yielded information on the vibrational levels $v' = 3, 4$, and 5 of the B $^2\Delta_r$ valence state, which cannot be measured directly by REMPI. In the UV wavelength range a $(1 + 1)$ -photon REMPI spectrum belonging to the vibrational bands $v' = 0 \leftarrow v'' = 0$ and $v' = 1 \leftarrow v'' = 0$ of the A $^2\Sigma^+ \leftarrow$ X $^2\Pi_r$ transition was measured. Even in the range of high rotational quantum nos. J no indication was found of Λ -type doubling of the rovibronic states within a resolu. of 0.2 cm^{-1} .



CF

1996

Xi, Xiangzhi;
Palolus, Fred,

непрет.
расчет.
температ.
состояния.

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

CF

[om. 38757]

1997

Jan Hrušák, et al.,

Li. n. J. Chem. Phys., 1997,
106 (17), 7185...



CF

1998

 $E^2\Pi_2 - X^2\Pi_2$

129: 348612r Rotational analysis for the $5\sigma\pi E^2\Pi_r(\nu'=1) - X^2\Pi_r(\nu''=0)$ band of CF radical. Zhang, Qun; Shu, Jinian; Zhou, Xiaoguo; Dai, Jinghua; Li, Quanxin (Dep. Chem. Physics, Univ. Sci. & Technology China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *Wuli Huaxue Xuebao* 1998, 14(10), 865-868 (Ch), Beijing Daxue Chubanshe. The 2-photon resonance-enhanced multiphoton ionization spectrum between 285 and 288.5 nm of the $5\sigma\pi E^2\Pi_r(\nu'=1) - X^2\Pi_r(\nu''=0)$ band of CF radical was reported. The band was analyzed with the resoln. of rotation spectra, and the spectroscopic consts. of the $5\sigma\pi E^2\Pi_r(\nu'=1)$ state were derived: $\sigma_0 = 695676.38 \pm 0.52 \text{ cm}^{-1}$, $A'_v = 46.4 \pm 0.3 \text{ cm}^{-1}$, $B'_v = 2.565 \pm 0.017 \text{ cm}^{-1}$, and $D'_v = (8.6 \pm 1.2) \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$.

C.A. 1998, 129, N26

CF⁺

(Om. 40 066)

1999

Ioannis D. Petsalaxis,

осущ.
состав.

J. Chem. Phys., 1999,
110, N 22, 10730-10737

CF

(Om. 40 066)

1999

X 217,
12 gram.
for yal. merk.
CO CM. ~~te~~

Ioannis D. Petsalakis,
J. Chem. Phys., 1996,
110, N22, 10730-
10737

CF, CF⁺

1999

моделювання
радиом
нометрії.
критеріум

131: 92713j Theoretical study on electronic states of carbon monofluoride and on the predissociation of the lower lying states. Petsalakis, Ioannis D. (Theoretical and Physical Chemistry Institute, The National Hellenic Research Foundation, Athens, Greece 116 35). *J. Chem. Phys.* 1999, 110(22), 10730-10737 (Eng), American Institute of Physics. Adiabatic potential energy curves of X ²Π, 12 doublet excited electronic states of CF and the ground state of CF⁺ were detd. by MRDCI (multireference single and double excitations CI) calcns. The potentials of the excited electronic states are complicated by interactions with repulsive states as well as by valence-Rydberg interactions. Potential energy curves of higher-lying Rydberg states were generated with the

C.A. 1999, 131, N7

aid of quantum defect calcs. Radiative lifetimes were calcd. for the A $^2\Sigma^+$ and the B $^2\Delta$ states while predissocn. lifetimes were obtained by a 5-state complex-coordinate rotation calcn. involving the lowest 5 doublet states along with their mutual interactions. The results are in agreement with the existing exptl. data regarding the predissocn. of the $v > 1$ levels of A $^2\Sigma^+$, while predissocn. is predicted for all the vibrational-rotational levels of the 2 $^2\Sigma^+$, for the $v > 1$ levels of the pos. parity substate of D $^2\Pi$ and for the higher vibrational levels ($v > 2$) of B $^2\Delta$. For the latter 2 states predissocn. increases significantly with the rotational level.

40606

2000

F: CF

P: 3

132:185674 The Scalar Relativistic Contribution
to the Atomization Energi CF, CF₄, and SiF₄.

Bauschlicher, Charles W. , Jr. NASA
Ames Research Center Moffett Field, CA 94035, USA
J. Phys. Chem. A, 104(11), 2281-2283
(English) 2000 The one-electron Douglas
Kroll (DK) approach and perturbation theory,
accounting for the mass-velocity and Darwin (MVD)
terms, are used to comp scalar relativistic
contribution to the atomization energies of CF,
CF₄, SiF₄. The difference between these two
approaches is studied as a functi basis set and
level of correlation treatment.

C.A. 2000, 132

F: CF+

P: 3

132:242122

Om- 40260a" 2000
Electronic states of CF+.

Petsalakis,

I. D.; Theodorakopoulos, G. Theoretical and Physical Chemistry Institute, The National Hellenic Research Foundation Athens, Greece Chem. Phys., 254(2-3), 181-186 (English) 2000 Ab initio multireference CI calcns. have been carried out on the ground and excited electronic states of the cation CF+ of singlet and triplet sp multiplicities. The results on the ground and the first excited state, a are in good agreement with exptl. and previous theor. results. The poten energy curve of a 3.PI. has a deep min. of 2.27 eV at 1.227 A. The poten the 1 1.PI. state has a very shallow local min. (0.10 eV) at 1.307 A. Th potential energy curves of the higher excited states show mostly shallow large internuclear distance, but they are repulsive at the re of the grou state. □

C.A. 2000, 132

2000

F: CF4+

P: 3

132:185625 Ab initio calculations of the spin-orbit splitting in the C st CF4+ including the dynamical Jahn-Teller effect. Sommerdijk, Harry; van Hemert, Marc C.

Gorlaeus Laboratoria, Leids Instituut voor Chemisch Onder Universiteit Leiden Leiden 2300 RA, Neth. J. Chem. Phys., 112(9), 4124-4

131 (English) 2000 Detailed ab initio calcns. on the lowest vibrational state of the electronic C 2T2 manifold of CF4+ show a small Jahn-Teller effect in all modes. This results in only small distortions from tetrahedral symmetry, due to strong coupling between

C.A. 2000, 132

electronic and nuclear motions (dynamical Teller effect), the spin-orbit splitting is reduced by an order of magnit This answers the outstanding question on the large differences between th results of electronic structure calcns. and measurements on spin-orbit splittings in XY4 mols. or mol. ions [R. N. Dixon and R. P. Tuckett, Chem Lett. 140, 553 (1987); J. F. M. Aarts and J. H. Callomon, Mol. Phys. 81, (1994)]. Complete agreement with expt. is however not reached because th dynamical Jahn-Teller effect is very sensitive to small errors in the pot energy surface.

2001

 $CF^+ (X^1\Sigma^+)$ $CF (X^2\Pi)$
(fakyyu. gorm)
 $CF^+ (a^3\Pi)$ (mex)

(We, 2e)

135: 295658a A photoelectron spectroscopic study of the second ionisation of the $CF(X^2\Pi)$ radical. Dyke, J. M.; Hooper, N.; Morris, A. (Department of Chemistry, University of Southampton, Southampton, UK SO17 1BJ). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 2001, 119(1), 49-56 (Eng), Elsevier Science B.V. The $CF(X^2\Pi)$ radical was re-studied with vacuum UPS. Two bands were obsd. and assigned to the

ionizations $CF^+(X^1\Sigma^+)$ $CF(X^2\Pi)$ and $CF^+(a^3\Pi)$ $CF(X^2\Pi)$. The 1st band, which was obsd. previously, has an adiabatic ionization energy of (9.11 ± 0.02) eV and a vertical ionization energy of (9.55 ± 0.02) eV. For the 2nd band, 3 vibrational components were obsd. with the 1st, the most intense, at an ionization energy of (13.94 ± 0.02) eV. Anal. of the vibrational structure in the 2 obsd. bands allowed ω_0 and r_0 to be detd. as 1810 ± 30 cm^{-1} and 1.154 ± 0.005 Å, resp. for the 1st ionic state, $CF^+(X^1\Sigma^+)$, and 1614 ± 30 cm^{-1} and 1.213 ± 0.005 Å, resp. for the 2nd ionic state, $CF^+(a^3\Pi)$. Comparison of the ionization energies and spectroscopic consts. obtained was made with values obtained from recent multi-ref. CI calcs.

C.A. 2001, 135, N20

CF

[Om. 41632]

2003

Jorge Duque et al.,

$CaZ^+ - X^2\Pi$,
ab initio
parent

J. Chem. Phys., 2003,
118, N3, 1206-1213.