

Az HCl

Xi (HCl; HCl-Ar) XI 3557 1973

Larvor M., Houdeau-F.-P.,

Haeussler C.,

Spectrochim. acta, 1973, A 29, 16,

971-980 (pp).

Étude à très haute résolution du
spectre d'absorption infrarouge indu-
it à basse température dans le gaz
chlorhydrique pur et mélange à l'argon.

Pu Xu-u, 1973, 235312

10 (all HCl; III)

ArNO , ArHCl , NeDCl , XeHCl , 1973.

ArBF_3 , KrBF_3 , $(\text{NO})_2$, $(\text{HCl})_2$, $\frac{13}{\text{XI}} 4348$

BF_3NO , BF_3CO , $(\text{CO}_2)_2$ (сложныя).

Novick S.E., Davies P.B., Dyke T.R.,
Klemperer W.

J. Amer. Chem. Soc. 1973, 95 (26),
8547 (Eng).

Polarity of van der Waals molecules.

(all ArNO ; III)

C.A. 1974. 80 N4. 20513z. NO (⊕)

ArHCl

теметр

и. и.

XI-3696

1973

6 Б236. Определение структуры молекулы ArHCl.
Novick Stewart E., Davies Paul, Hattis
Stephen J., Klemperer William. Determination
of the structure of ArHCl. «J. Chem. Phys.», 1973, 59,
№ 5, 2273—2279 (англ.)

Пучок молекул ArHCl (и ArDCI) получен при расшире-
нии смеси газов Ar и HCl (DCI) через ультразвуковое
сопло. Методом электрич. резонанса в молекул. пучке
получены МВ- и РЧ-спектры молекул ArHCl и ArDCI
(с ^{35}Cl и ^{37}Cl). Обнаружены линии вращательных пере-
ходов с $\Delta J=1$, $J=1$ и 2, $K=0$ всех 4-х изотопозамещ.
и РЧ-переходов с $\Delta J=0$, $K=0$, $|\Delta M_J|=1$ молекул
ArH ^{35}Cl и ArD ^{35}Cl в основном колебательном состоя-
нии ($v=0$). Отсутствие в спектрах линий переходов в
состояниях с $K>0$ и $v>0$ показывает, что молекулы
ArHCl и ArDCI в этих состояниях нестабильны (т-ра
внутренних степеней свободы ниже 20 К). Идентифи-
цирована квадрупольная сверхтонкая структура МВ- и

X 1974 N. 6



Емлю

РЧ-переходов, отвечающая взаимодействию квадрупольных моментов ядер Cl и D с молек. вращением. Спектры проанализированы по приближенным ф-лам, справедливым для линейной молекулы с эффективными значениями вращательной $\bar{B} = (B + C)/2$ и центробежной (D_J) постоянной и постоянной квадрупольной связи (eqQ_a) (молекулы AgHCl и AgDCl являются слегка асимм. вытянутыми волчками). Для AgH³⁵Cl и AgD³⁵Cl определены значения постоянных $\bar{B}$, D_J , eqQ_a и дипольного момента μ_a , а для AgH³⁷Cl и AgD³⁷Cl — только постоянной $\bar{B} - 2D_J$. В частности для AgH³⁵Cl получено: $\bar{B} = 1,678511$ Ггц, $D_J = 20,30$ Кгц, $eqQ_a = -23,027$ Мгц, $\mu_a = 0,81144$ D. По значениям B оценены эффективные структурные параметры: Ag—Cl 4,006 Å в AgHCl, Ag—Cl 4,025 Å в AgDCl, Ag—Cl—H $\approx 45^\circ$, Ag—Cl—D $\approx 34^\circ$. По значению D_J с использованием ф-лы Кратцера оценена частота вал. кол. ($32,2$ см⁻¹) вандерваальсовой связи Ag—Cl.

М. Р. Алиев

X1-3696

1973

Ar HCl

Ar DCl

comp. by
H. A. J. R. A. J.
M. B. C. J. R. A. J.

151305k Determination of the structure of argon hydrogen chloride. Novick, Stewart E.; Davies, Paul; Harris, Stephen J.; Klemperer, William (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(5), 2273-9 (Eng). The radio-frequency and microwave spectra of $K = 0$ states of ArH³⁵Cl, ArH³⁷Cl, ArD³⁵Cl, and ArD³⁷Cl were measured by mol. beam elec. resonance spectroscopy. The rotational and hyperfine structure consts. for the lowest vibrational state of the 4 isotopic species were detd. Only the lowest vibrational state was obsd. The mol. is extremely nonrigid. The av. Ar-Cl distance is 4.006 in ArHCl and 4.025 Å in ArDCl. The Ar-Cl-H angle is acute and the amplitude of the zero point angle bending is extremely large. The av. Ar-Cl-H angle is $\sim 45^\circ$, while the av. Ar-Cl-D angle is $\sim 34^\circ$. The vibrational frequency of Ar-HCl bond stretching was computed to be 32.2 cm^{-1} from the obsd. centrifugal distortion const.

C. A. 1973, N26, 79

Ar-HCl

XI - 4919

1974

no mems -
op-ym

+) 176468v Argon-hydrogen chloride interaction potential from differential elastic scattering cross section measurements. Farrar, J. M.; Lee, Y. T. (James Franck Inst., Univ. Chicago, Chicago, Ill.). *Chem. Phys. Lett.* 1974, 26(3), 428-30 (Eng). The crossed-mol.-beam technique was used to determine the Ar-HCl spherically sym. intermol. potential. ...Analysis of the data obtained at a relative collision energy of 12.4×10^{-14} erg (1.78 kcal/mole) yields a potential with a well depth of $\epsilon/k = 191^\circ\text{K}$ (k Boltzmann const.) and the min. located at $R_m = 4.0\text{\AA}$ the distance from Ar to the center of interaction with HCl. These results agree with other experimental conclusions on the Ar-HCl van der Waals complex as well as with transport phenomena.

C.A. 1974, 81 N26

1974

Ar-HCl

homocyclic
noble gas

29674f) Determination of the interaction potential between argon and hydrogen chloride. Green, Sheldon (Goddard Inst. Space Stud., New York, N. Y.). *J. Chem. Phys.* 1974, 60(7), 2654-6 (Eng). An Ar-HCl potential surface was calcd. to test an ab initio method proposed by R. G. Gordon and Y. S. Kim, (1972). The results are in agreement with the exptl. data of W. B. Neilsen and R. G. Gordon, (1973), except for well depth.

C.A. 1974. 81. NY

40402.3605

TE, Ch

ArHCl

ArDCl

50701 02

1974

43-4338

Klemperer William. Molecular spectroscopy of loosely bound complexes. "Ber. Bunsenges. phys. Chem.", 1974, 78, N 2, 128-134

(англ., рез. нем.)

0076 мак

061 062

0069

ВИНИТИ

1975

XI-4517

Ne₂, Ar₂, Kr₂, Xe₂, H₂Ar, N₂Ar, Ar.HCl,
 ArFCl, (H₂)₂, (O₂)₂, (H₂)₂, (NO)₂, (HF)₂,
 (CO₂)₂, (H₂O)₂ (u.n.)
 обзр.

Ewing G. E.

Acc. Chem. Res., 1975, 8(6), 185-92(all Ne₂; (III)

20

Ar HCl

1976

Anderson Alfred B.

(xb. aux.
pacerum)

J. Chem Phys. 1976, 64(5)
2266-7 (eng)

(cu Ar Kr; III)

Ar - HCl

1976

85: 149333y Rotational excitation of hydrogen chloride by argon impact. Buck, U.; McGuire, P. (Max-Planck-Inst. Stroemungsforsch., Goettingen, Ger.). *Chem. Phys.* 1976, 16(1), 101-8 (Eng). Making use of an empirical potential energy surface, the coupled states approxn. was employed to study elastic and rotationally inelastic Ar-HCl collisions. Converged integral and differential cross sections are presented for transitions $j \rightarrow j'$ out of the $j = 0$ and 1 rotational states of HCl. The behavior of the exptl. total differential cross section of J. M. Farrar and Y. T. Lee (1974) cannot be explained with the assumed potential surface. Modifications of the anisotropy in the surface are considered and a correlation is found between the deepest potential well and the rainbow angle in the total differential cross section.

C.A. 1976. 85 N20

HCl-Ar

* 4. 11526

1976

Д171. Расчет ван-дер-ваальсова комплекса
HCl-Ar. Dunker Alan M., Gordon Roy G. Cal-
culations on the HCl-Ar van der Waals complex.
«J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 1, 354—363 (англ.)

Проводится теоретич. исследование ван-дер-ваальсова
комплекса HCl-Ar. Рассчитанный ранее потенциал
взаимодействия этого комплекса используется при реше-
нии связанных ур-ний для колебательно-вращательного
движения этого комплекса при условии, что молекула
HCl считается жестким ротатором и пренебрегается
центробежными эффектами и изменением вращательной
постоянной этой молекулы. Найдены уровни энергии
комплекса, средние значения дипольного момента, па-
раметра анизотропии потенциала, вращательная постоян-
ная и т. д. Расчеты были проведены для нескольких на-
боров параметров потенциала. Результаты сравниваются
с данными экспериментов по рассеянию в молекуляр-
ных пучках и спектроскопич. данными. Найдено, что,
хотя теория удовлетворительно согласуется с каждым
из экспериментов в отдельности, существуют трудности
согласования с экспериментами обоих родов.

А. Зембеков

расчет
комплекса

Ф 1976 № 6

* 8-11526

1976

HCl + Ar

Кв. метр.
расчет

84: 65494t Calculations on the hydrogen chloride-argon van der Waals complex. Dunker, Alan M.; Gordon, Roy G. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(1), 354-63 (Eng). Published anisotropic intermol. potentials for HCl-Ar were tested for comparison with mol. beam resonance expts. on the van der Waals complexes. The Schroedinger equation for the coupled rotational and vibrational motion of the complex is solved by a close coupling method. Energy levels, and expectations of the dipole moment, $\cos\theta$, and $\cos^2\theta$, where θ is the Ar-HCl center of mass-H angle, were calcd. for the lower states of ^{40}Ar complexes with H^{35}Cl , H^{37}Cl , D^{35}Cl , and D^{37}Cl . Rotational and centrifugal distortion consts. were calcd. for the lowest level. The assignment of the angle θ is discussed, and results support the acute choice (i.e., H on the av. between the Cl and Ar nuclei). The shift in angular expectations with HCl isotope distinguishes between the potentials tested, and comparison with expts. suggests that the true potential has an abs. min. near $\theta = 0^\circ$. However, none of the available potentials fits both the scattering data and the bound state spectroscopic data quant. Simultaneous anal. of scattering and bound state data constrains the potential much more than either alone.

C.A. 1976. 84 N10

Ar HCL

1976

Dunker A.M., et al.

J. Chem. Phys. 1976,
64, N12, 4984-94.

(back p-134)
present

(Ar H₂) III

Ар·НСl

*4 - 16883

1976

13 Б238. Определение энергии связи в гидрохлориде аргона, $\text{Ar} \cdot \text{HCl}$, по инфракрасным спектрам. Miziolek Andrzej W., Pimentel George C. Argon hydrochloride, $\text{Ar} \cdot \text{HCl}$, bond energy by infrared spectroscopy. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 11, 4462—4466 (англ.)

Энергия
связи
по И.К.
спектрам

В области $2850\text{--}3010\text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры поглощения смесей аргона и HCl ($P_{\text{HCl}} = 2\text{--}6\text{ мм}$, $P_{\text{Ar}} = 400\text{--}760\text{ мм}$). Использована низкот-рная ($T = 195\text{--}298^\circ\text{K}$) многоходовая ячейка ($l = 300, 460$ и 620 м). В области нулевого промежутка колебательно-вращательного спектра HCl обнаружены полосы 2887 и 2879 см^{-1} , для к-рых величина оптич. плотности линейно зависит от давлений аргона и HCl . В спектрах смесей HCl (2 и 19 мм) с гелием (400 мм) поглощения в этой области не наблюдалось. Полосы 2887 и 2879 см^{-1} отнесены к комплексу $\text{Ar} \cdot \text{HCl}$. Измерена т-рная зависимость их интенсивностей и определено значение $\Delta H_{\text{эфф.}} \approx 1200\text{ кал/моль}$. Обсужден вклад вал. кол. $\text{Ar}\text{--}\text{Cl}$, либрационного колебания и ангармоничности в колебательную теплоемкость комплекса и глубина потенциальной ямы.

В. М. Ковба

Х.1977. №13

ArHCl

44-16883

1976

286: 81089m Argon hydrochloride, Ar.HCl, bond energy by infrared spectroscopy. Miziolek, Andrzej W.; Pimentel, George C. (Chem. Dep., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1976, 65(11), 1462-6 (Eng). The IR absorption at 2860-3010 cm^{-1} (the missing Q-branch region) of Ar (200-760 torr) and HCl (2-6 torr) mixts was detd. at 195-298 K.. The temp. dependence of 2 absorption features of the ArHCl complex, at 2887 and 2879 cm^{-1} , led to a bond energy est. that depended upon the assumptions made about the internal degrees of freedom of the complex. Agreement with expt. was reached for well depths near 1.2 kcal/mol; this result is relatively insensitive to the choices of the vibrational frequencies and anharmonicities, but depends upon the extent to which the energy-level manifolds are truncated to avoid mol. excitation in excess of the bond energy. This bond energy contrasts with the commonly accepted value of 0.4 kcal/mol; the possible origin of the disparity is considered.

Debye

C. A. 1977 86 N12

ArHCl

#4-14772

1976

85: 133288b Centrifugal distortion in argon hydrogen chloride (ArHCl). Novick, Stewart E.; Janda, Kenneth C.; Holmgren, Stephen L.; Waldman, Marvin; Klemperer, William (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1976, 65(3), 1114-16 (Eng). From measurements of the higher-energy rotational transitions, the centrifugal-distortion consts. (D_J , in kHz), wavenos. (in cm^{-1}) for vibrational stretching, and effective force consts. (k , mdyne/Å) obtained, resp., are: 20.0, 32.4, 0.0117 for ArH^{35}Cl ; 19.0, 31.9, 0.0114 for ArH^{37}Cl ; 17.1, 34.4, 0.0134 for ArD^{35}Cl ; 16.4, 33.7, 0.0132 for ArD^{37}Cl . The relations are discussed of the D_J values to an effective radial potential and the assocd. vibrational wave function. Although the stretching vibrational frequency and the resulting force const. are not directly related to the nonharmonic, angle-averaged radial potential, the centrifugal-distortion const. is interpreted in terms of the std. deviation (or width) of the radial wave function. A harmonic approxn. for the std. deviation of the wave function accurately reflects a wave function for a complicated potential surface.

(min)

C.A. 1976 85 N 18

AgHCl

* У-14772

1976

2 Б245. Центробежное искажение в AgHCl . No-
vick Stewart E., Janda Kenneth C., Holm-
gren Stephen L., Waldman Marvin, Klem-
perer William. Centrifugal distortion in AgHCl .
«J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 3, 1114—1116 (англ.)

Измерены МВ-спектры ван-дер-ваальсовых молекул
 AgHCl и AgDCl в сверхзвуковом пучке. Идентифициро-
ваны линии вращательных переходов с $J=1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$
в основном колебательном состоянии, а также квадра-
польная структура линий. Определены значения вра-
щательной и центробежной постоянных и постоянной
квадрупольной связи: $B=1678,511; 1631,604; 1657,627$
и $1611,904$ Мгц, $D_J=20,0; 19,0; 17,1$ и $16,4$ Кгц для
 AgH^{35}Cl , AgH^{37}Cl , AgD^{35}Cl и AgD^{37}Cl соотв.,
 $eqQ(\text{AgD}^{35}\text{Cl})=-36,241$, $eqQ(\text{AgD}^{37}\text{Cl})=-28,587$ Мгц.
Для вычисления центробежной постоянной использован
 N , 6-потенциал Ленарда—Джонса и по сравнению вы-
численных и измеренных значений D_J установлено силь-
ное отличие между потенциальными функциями связей
 $\text{Ag} \dots \text{HCl}$ и $\text{Ag} \dots \text{DCl}$. М. Р. Алиев

(и.и.)

X 1977 N 2

ВХ-1626

1976.

LiCN , ArH_2 , LiOH , ArHCl ,
 Ar_2O_2 , Ar_2N_2 , LiCN (кв. мех. расем)

Милинский Б.И., Истомин В.А.,
Степанов Н.Ф.

Тезисы докл. - Сила. докл. спектроск. вмс.
Стерхис. разрезанные, 3^{ий} 1976, 87-9.

Коллестельно-враща. метал. пробы
С.А. 1978, 22, N 14, 967408

Ю

⊕

70503.8709
Ch, Ph, TC

UK - 48692
Ar-HCl

1977
7-13-18276

Boon E. W., Frenkel D., van der Elsken J.

A far infrared study of the Ar-HCl
van der Waals molecule.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 5, 1826-1829
(англ.)

0869 ммк

834 842 60

ВИНИТИ

НСВ. Ач

42-175-26

1976

(12 Б83.) Расчет ван-дер-ваальсова комплекса HCl—Ar. Duncker Alan M., Gordon Roy G. Calculations on the HCl—Ar van der waals complex. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 1, 354—363 (англ.)

В приближении Борна—Оппенгеймера проведены расчеты колебательно-вращательных состояний ван-дер-ваальсовых молекул $H^{35}ClAr$, $H^{37}ClAr$, $D^{35}ClAr$, $D^{37}ClAr$. Координаты системы определены двумя векторами $\vec{r}$ и $\vec{R}$, где $\vec{r}$ —вектор, направленный от ядра Cl к протону, а $\vec{R}$ —вектор, направленный от центра масс двухатомной молекулы к ядру атома Ar. Рассмотрена след. модель комплекса: двухатомная молекула считается жестким ротатором, а потенциал взаимодействия V атома Ar с молекулой HCl зависит от двух переменных R и θ (R —длина вектора $\vec{R}$, θ —угол между векторами $\vec{r}$ и $\vec{R}$). Для потенциала V использовано 4 модификации, предложенные ранее. При расчете (уровней энергии, средних значений $\cos \theta$, $\cos^2 \theta$ и величины проекции полного дипольного момента на вектор $\vec{R}$) предполагалось, что атом Ar

расчет
колебат.
вращат.
состояния

+Евг
☒

X1976 N12

находится в основном колебательном состоянии по переменной R , поэтому проблема по-существу сведена к задаче о двух взаимодействующих ротаторах. Волновые функции и уровни энергии такой системы были определены в базисе биполярных сферич. гармоник (кол-во базисных функций не превышало 15). Использование при расчете однократной точности оказалось, однако недостаточным для обнаружения расщепления удвоенных K -уровней при $I \neq 0$ (I — квантовое число полного момента). Отмечено, что зависимость уровней энергии от квантового числа I выражается обычной ф-лой $BI(I+1) - DI^2(I+1)^2$, однако этому явлению не удалось дать исчерпывающего объяснения. Приведены значения постоянных B и D для наинизших состояний всех рассматриваемых молекул. Рассчитанные величины детально сопоставлены с имеющимися эксперим. величинами. Полного согласия как со спектроскопич. данными, так и с данными по рассеянию не достигнуто. Напр., эксперим. значение проекции полного дипольного момента на ось R в два раза превышает вычисл. значение. Обсуждены возможные причины расхождений.

В. А. Истомин

Ar HCl

1976

Zhilinskii, B.I. et al.

Tezisy Dokl.-Simp. Mol. Spektrosk.
Vys. Sverkhvys. Razresheniya, 3rd

кб. макс.
парсе



ев. Ли. CH- III

Ar-HCl

1977

спектры
и.к.

18 B283. изучение спектра в дальней инфракрасной области ван-дер-ваальсовой молекулы $\text{Ar}-\text{HCl}$. By ~~om~~ E. W., Frenkel D., van der Elsken J. A far infrared study of the $\text{Ar}-\text{HCl}$ van der Waals molecule. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 5, 1826—1829 (англ.)

Измерены в области $150-13 \text{ см}^{-1}$ ИК-спектры поглощения газ. смеси $\text{HCl}+\text{Ar}$ (соотв., 0,07 и 1,1 атмага) при t -рах $175-295^\circ \text{K}$. В спектрах наряду с очень сильными пиками 21 и 42 см^{-1} переходов $J=0 \rightarrow 1$ и $J=1 \rightarrow 2$ свободных молекул HCl наблюдается серия пиков малой интенсивности $14,1; 15,9; 17,9; 24,2; 26,3; 28,2; 30,2; 32,3; 34,3$ и $36,3 \text{ см}^{-1}$, отнесенных к ван-дер-ваальсовым молекулам $\text{Ar}-\text{HCl}$. Природа переходов, ответственных за наблюдаемые пики, остается пока невыясненной. Энергия образования молекул $\text{Ar}-\text{HCl}$ оценена порядка $1,4 \text{ ккал/моль}$. Б. В. Рассадин

л. 1977 N 18

HCl - Ar

1972

номеру
поверхи

/ 86: 148216w A far infrared study of the argon-hydrogen chloride van der Waals molecule. Boom, E. W.; Frenkel, D.; Van der Elsken, J. (Lab. Phys. Chem., Univ. Amsterdam, Amsterdam, Neth.). *J. Chem. Phys.* 1977, 66(5), 1826 9 (Eng). Results of far IR measurements on the system HCl-Ar at low d. and temp. are presented. Distinct spectral features are obsd. that must be attributed to Ar HCl van der Waals mols. Possible explanations of the obsd. spectra in terms of a simple picture of the internal motion of the complex are discussed. An est. of the enthalpy of formation is made.

C.A. 1977, 86N20

1977

ArHCl

ArFCl

HeI₂NeI₂ArI₂

12 Д141. Модель колебательной преддиссоциации ван-дер-ваальсовых молекул. Boswick J. A., Jortner Joshua. Model for vibrational predissociation of van der Waals molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 1, 13—18 (англ.)

Рассматривается теоретич. модель колебательной преддиссоциации линейных трехатомных молекул типа X—B—A, в которых атом инертных газов (X) связан ван-дер-ваальсовым взаимодействием с двухатомной молекулой (AB). Анализ ограничивается рассмотрением одномерного движения молекулы для отдельной поверхности потенц. энергии, удовлетворяющей условиям адиабатичности, $V(R_{AB}, R_{BX}) = V_{AB}(R_{AB}) + V_{BX}(R_{BX})$. Потенциал взаимодействия в двухатомной молекуле V_{AB} описывается в гармонич. приближении или потен-

9. 1977, N12

(+3) ☒

сигналом Морзе. Ван-дер-ваальсово взаимодействие $V_{\text{вх}}$ также описывается потенциалом Морзе с параметрами, взятыми из эксперим. данных. Делается предположение о малости взаимодействия, связывающего состояния дискретного спектра между собой. Колебательная диссоциация рассматривается как распад отдельного дискретного состояния $|nl\rangle$, где n и l — колебательные квантовые числа в спектрах соответственно V_{AB} и V_{BX} , на совокупность из n состояний непрерывного спектра $|n'\epsilon'\rangle$, причем $n' = n-1, n-2, \dots, 1, 0$, а ϵ' — относит. кинетич. энергия X и АВ. Получено выражение для скорости перехода и исследована ее зависимость от частоты колебаний комплекса АВ, энергетич. параметров ван-дер-ваальсова взаимодействия и массы атомов инертных газов. Анализируется конечное распределение по колебательным уровням молекулы АВ, возникшей в результате преддиссоциации. Приведены результаты расчетов для молекул ArHCl, ArFCl и XJ₂ ($X = \text{He, Ne, Ar}$).

А. В. Гольцов

1974

23 Б72. Модель колебательной преддиссоциации ван-дер-ваальсовых молекул. Boswick J. A., Jortner Joshua. Model for vibrational predissociation of van der Waals molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 1, 13—18 (англ.)

Проведено теор. изучение колебательной преддиссоциации линейных трехатомных ван-дер-ваальсовых молекул XBA , где BA — обычная двухатомная молекула, а X — атом инертного газа. Колебательная преддиссоциация рассмотрена для одномерной модели молекулы с учетом только одной адиабатич. потенциальной поверхности. Исследована зависимость скорости преддиссоциации от частоты колебаний связи $A-B$, от энергетич. параметров, характеризующих ван-дер-ваальсову связь в молекуле, от массы атома инертного газа, а также зависимость распределения по колебательным уровням результирующей двухатомной молекулы. Развита модель применена к таким молекулам, как $AgHCl$, $AgFCl$, AgJ_2 , NeJ_2 и HeJ_2 .
Б. И. Жилинский

 $AgHCl$ $AgFCl$ AgJ_2 NeJ_2 HeJ_2

преддиссоц.

(+4)

X. 1974

n 23

1977

НСВ - Ач

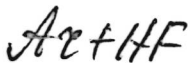
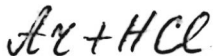
расчет
молекулы

13 Б88. Динамика внутреннего движения вандерваальсовых комплексов. I. Разделение методом Борна—Оппенгеймера радиального и углового движений. Holmgren Stephen L., Waldman Marvin, Klemperer William. Internal dynamics of van der Waals complexes. I. Born—Oppenheimer separation of radial and angular motion. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 10, 4414—4422 (англ.)

Предложен приближенный метод описания св-в основного состояния вандерваальсовых комплексов атома и двухатомной молекулы. При расчете молекула аппроксимируется жестким ротатором. На первом этапе валентные колебания комплекса отделяются от деф. колебаний. Путем решения задачи на собственные значения находится эффективный потенциал, зависящий лишь от межмолек. расстояния. Конкретные расчеты проведены для системы HCl—Ag. Показано, что погрешность при расчете энергии основного состояния HCl—Ag достигает ± 3 см⁻¹. Предложенный формализм позволяет существенно сократить расчетное время по сравнению с методом сильной связи. И. В. Лебель

2. 1978, N 13

1977



структура,
спектроск.
пост.

12 Д438. Вращательная спектроскопия ван-дер-ваальсовских молекул. Klemperer William. Rotational spectroscopy of Van der Waals molecules. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1977, № 62, 179—184. Discuss., 300—340 (англ.).

Дан краткий обзор результатов исследования ван-дер-ваальсовских молекул в системах $\text{Ar} + \text{HCl}$, $\text{Ar} + \text{HF}$, $\text{Ar} + \text{ClF}$, $\text{Kr} + \text{ClF}$, $\text{Ar} + \text{OCS}$, $(\text{HF})_2$, $\text{HF} + \text{HCl}$ и $\text{HF} +$

ClF методом спектроскопии электр. резонанса в молекулярном пучке. Приведены улучшенные значения спектроскопич. постоянных и структурных параметров ван-дер-ваальсовских комплексов. Библ. 20.

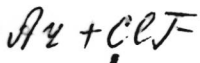
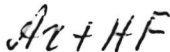
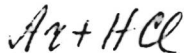


(45)



Ф. 1977, № 12

1977

вращат.
спектры(+5) ☒

22 Б290. Вращательная спектроскопия ван-дер-ваальсовых молекул. Klemperer William. Rotational spectroscopy of van der Waals molecules. «Faraday Discuss., Chem. Soc.», 1977, № 62, 179—184. Discuss., 300—340 (англ.)

Рассмотрены результаты работ, посвященных исследованию вращательных спектров молек. комплексов: $\text{Ar} + \text{HCl}$, $\text{Ar} + \text{HF}$, $\text{Ar} + \text{ClF}$, $\text{Kr} + \text{CF}$, $\text{Ar} + \text{OCS}$, $(\text{HF})_2$, $\text{HF} + \text{HCl}$, $\text{HF} + \text{ClF}$, и их изотопозамещенных методами электр. резонанса в молек. пучках. Приведены суммарные данные о вращательных постоянных, постоянных центробежного искажения, дипольных моментах, постоянных ядерного квадрупольного взаимодействия, межатомных расстояниях и эффективных гармонич. частотах для линейных комплексов атом + молекула. В использованной молек. модели предположено, что электр. и механ. параметры молекул в комплексе совпадают с параметрами свободных молекул. Спектро-

Ж. 1977 № 22

скопич. постоянные использованы для определения параметров межмолек. потенциала. Сильная анизотропия потенциальной кривой вблизи минимума и отсутствие плотной равновесной структуры показывают, что вандер-ваальсовый радиус для атомов не может быть определен достаточно точно. Полученные результаты находятся в противоречии с представлениями об аддитивном атом—атомном центральном силовом потенциале в области минимума потенциальной кривой.

С. Н. Мурзин

Az-HCl

1977

Lloyd J., et al.

J. Chem. Soc. Faraday

Trans. 2. 1977, 73
N 2, 234-44.



(all.)

(memor.
nomenus.)

1977

HCl-Ar

12 Д170. Определение анизотропных межмолекулярных потенциалов для ван-дер-ваальсовых молекул. Le Roy Robert J., Carley J. Scott, Grabenstetter James E. Determining anisotropic intermolecular potentials for van der Waals molecules. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1977, № 62, 169—178. Discuss., 300—340 (англ.)

потенц.
поверхн.
системы

Из спектроскопич. данных для поверхности системы молекулы водорода и атома аргона определены эффекты статистич. корреляции, а также чувствительность поверхности к выбору модели расчета. Определен потенциал для этой системы, правильно воспроизводящий асимптотич. поведение при больших расстояниях между атомом и молекулой, и диффер. сечения рассеяния и энергии резонансов орбитирования, полученные экспериментально. Аналогичным методом рассчитана также потенц. поверхность для системы HCl—Ar, обладающей существенно большей анизотропией. А. И. Шушин

Ф, 1977, № 12

1977

 $Ag \cdots HCl$ $Ag \cdots HF$ $Ag \cdots HBr$

расчет
энергий
колебат.
уровней

12 Д144. Колебательные и термодинамические свойства ван-дер-ваальсовых молекул $AgHX$. Shin Hyung Kyu. Vibrational and thermodynamic properties of $AgHX$ van der Waals molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 1, 193—196 (англ.)

По литературным данным для параметров потенциала Леннард-Джонса методом ВКБ выполнен расчет энергии колебательных уровней межмолекулярной связи ван-дер-ваальсовых молекул $Ag \cdots HX$ ($X = F, Cl, Br, I$). Показано, что эти молекулы имеют 7, 10, 12 и 14 дискретных колебательных уровней, соответственно, а частота колебания связи $Ag \cdots H$ равна 42,0, 32,5, 31,2 и 24,6 cm^{-1} . Вычислены также термодинамич. ф-ции этих молекул.

М. Р. Алиев

Р. 1977 №12

Ar HCl

1978

Beswick J.A., et al.

J. Chem. Phys., 1978,

68, N5, 2277-97.

каждат.
перевод.

сер. Ar Y₂ - III

Ar.HCl

number 6090

1978

88:158804s A floating Gaussian orbital calculation on argon hydrochloride (Ar.HCl). Blustin, Peter H. (Dep. Chem., Univ. Sheffield, Sheffield, Engl.). *Theor. Chim. Acta* 1978, 47(3), 249-57 (Eng). The electronic structure, properties and binding of the argon hydrochloride (Ar.HCl) complex are discussed in connection with simple ab initio floating Gaussian orbital calcns. on the system.

Rb. mex.
packet

C.A., 1978, 82, 122

Ag-HCl

спектры
поглощ.

1978
8 Б181. Проявления анизотропии межмолекулярных сил ван-дер-ваальсовых молекул Ag-HCl в длинноволновых инфракрасных спектрах поглощения. Восток E. W., Elksen J. van der. Anisotropic intermo-

lecular force effects in the far infrared absorption spectra of the Ag-HCl van der Waals molecule. «J. Mol. Struct.», 1978, 45, 113—118 (англ.)

В спектральной области $13-40 \text{ см}^{-1}$ изучены спектры поглощения ван-дер-ваальсовых молекул Ag-HCl в газовой фазе. Отмечено, что полученные данные о частотах и интенсивностях полос поглощения свидетельствуют о наличии либрац. движения. Полученные спектральные данные проанализированы в рамках простого углового межмолек. потенциала и сопоставлены с нек-рыми теоретически полученными потенциалами. Сделан вывод, что результаты измерений доказывают существование анизотропии межмолек. потенциала в случае Ag-HCl.

О. Г. Гаркуша

2.1978, N8

HCL-Ar [ommuu 7357] 1978.

M.N. Boulet c., Robert d.

Chem. Phys. Lett;
1978, 60 (1), 162-168

АрНсl

поверхн.
потенц.
энергии

1978

6 Б86. Внутренняя динамика ван-дер-ваальсовых комплексов. II. Определение поверхности потенциальной энергии системы ArHCl . Holmgren S. L., Waldman M., Klempeter W. Internal dynamics of van der Waals complexes. II. Determination of a potential energy surface for ArHCl . «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 4, 1661—1669 (англ.)

Гамильтониан трехатомной системы, выведенный ранее (сообщ. I L. Holmgren, M. Waldman, «J. Chem. Phys.», 1978, 67, 4414) и удобный для приближенного расчета уровней энергии слабосвязанных комплексов атом — двухатомная молекула, использован для восстановления поверхности потенциальной энергии системы ArHCl по спектроскопич. данным. Поверхность U при фиксированном расстоянии H—Cl представлялась в виде разложения по полиномам Лежандра от угла между осью HCl и линией, соединяющей Ar с центром тяжести HCl . Учитывались три полинома Лежандра, и каждый из коэф., зависящий от межмолек. рас-

2.1979N6

стояния R , представлялся в виде потенциала Бэкин-гема (exp-6) либо обобщенного потенциала Леннарда-Джонса ($n=6$). При расчете уровней энергии учитывалось кориолисово взаимодействие, а также изотопич. смещение при замене H на D. Кроме того, использовалась дополнительная информация от изотропной части потенциала, полученная из экспериментов по рассеянию. Приведены параметры восстановленных потенциальных поверхностей двух типов (exp-6, и $n=6$), для каждой из к-рых минимум отвечает линейной конфигурации комплекса $\text{Ag}-\text{H}-\text{Cl}$. Отмечается, что небольшое число учтенных угловых функций ограничивают точность представления U при варьировании угла.

Е. Е. Никитин

ArHCl

1978

nomens.
p-4ucl

89: 186331z Internal dynamics of van der Waals complexes.
II. Determination of a potential energy surface for argon hydrogen chloride (ArHCl). Holmgren, Stephen L.; Waldman, Marvin; Klemperer, William (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(4), 1661-9 (Eng). The Born-Oppenheimer angular-radial sepn. method for calcg. ground state properties of atom diat. complexes was used to det.

a potential energy surface for ArHCl. By using a nonlinear least-squares procedure, the calcd. properties from trial surfaces were fit to the available mol.-beam elec.-resonance data including both radial and angular expectation values. The inclusion of Coriolis coupling terms in the Hamiltonian had a small but discernable effect on the calcd. properties. Both the no. and type of parameters used to describe the surface affected their correlations dramatically. Fitting the angular properties of the complex required the potential to have an anisotropic to isotropic strength ratio of about 1:2. The isotropic portion of the potential could not be uniquely detd. from the bound-state data alone, but was fixed by predicted differential elastic scattering cross sections.

C.A. 1978. 89 N 22

ArHCl

1978.

Klemperer W.

момент.
смысл

"Adv. Laser Chem. Proc.
Conf., Pasadena, 1978"
Berlin, 1978, 389-404

(см. Ar₂ ; III)

Арцелл

1978

Lova & F. J.

м. в.
спектр
молекулы,
парам.

J. Phys. and. Chem.
Ref. Data, 1978, 7 (4)
1445-1750

Таблицы м. в. спектров.
II Прехватанные молекулы.

HCl-Ar. common 8626 1979

Waldman M., et al.

J. I. 203.
neofus
memor.
cur.

J. Chem. Phys., 1979
41(3), 1340-52

HCl - Ar

бп. 10338

1980

HCl - Kr

HCl - Xe

3 Б244. Длинноволновые инфракрасные спектры вандер-ваальсовых молекул в смесях HCl-благородный газ. Boom E. W., van der Elsen J. Far infrared spectra of van der Waals molecules in HCl-noble gas mixtures. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 1, 15—20 (англ.)

На ДИК-спектрометре интерференц. типа в области частот $14-240 \text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,3 \text{ см}^{-1}$ измерены спектры поглощения газовых смесей HCl—Ar (I), HCl—Kr (II) при $t_{\text{ре}} 168 \text{ К}$ и HCl—Xe (III) при $t_{\text{ре}} 181 \text{ К}$ и общей плотности газа $0,04-0,08 \text{ г/см}^3$. Для I найдены две новых слабых линии около $36,4$ и $44,5 \text{ см}^{-1}$, резкая линия около $45,4 \text{ см}^{-1}$ и широкополосная структура около 27 см^{-1} . Для II новые линии поглощения смещены в более высокочастотную область. Спектр III отличается более сложной структурой, чем для I и II. Эксперим. зависимость величины поглощения в максимумах от температуры и давления.

Д.К. Скворцов.
Хе

(+2) □

Х. 1981 N 3

муме линий комплексов от давления газовых смесей подтверждает образование 1:1 комплексов. Анализ спектров выполнен для модельного изотропного межмолек. потенциала с учетом эффектов внутреннего вращения комплексов. Для I, II и III, соотв., межмолек. расстояние в минимуме потенциальной ямы равно $r_m = 3,9; 4,01$ и $4,18$ А и глубина потенциальной ямы равна, $\epsilon = 135, 169,2$ и $203,8$ см⁻¹. Наряду с линиями ван-дер-ваальсовых комплексов I, II и III в спектрах найдены линии димера (HCl)₂. С. Н. Мурзин

HCl...Ar

Qumma 10338

1980

HCl...HCl

HCl...Kr

HCl...Xe

93: 104179b Far infrared spectra of van der Waals molecules in hydrogen chloride-noble gas mixtures. Boom, E. W.; Van der Elsken, J. (Lab. Phys. Chem., Univ. Amsterdam, Amsterdam, Neth.). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(1), 15-20 (Eng). Results of far-IR measurements on HCl-noble gas mixts in the region 14-240 cm^{-1} at low temps., and densities between 0.4 and 4 amagat, are presented. Between the free HCl rotational lines, distinct absorption features were obsd. that were assigned to X-HCl van der Waals mols. (X = HCl, Ar, Kr, Xe). Various internal motions of the complexes were considered, and it was concluded that the spectra originate from internal rotatory motion of the HCl subunit. A model for an effective angular potential governing this motion is discussed. The trends in the exptl. spectra suggest that the well depth increases in the series Ar-Kr-Xe, reflecting an increase in anisotropy in the above order.

u. r. c. n. e. p.

(43) ☒

C. A. 1980, 93 n 10

ArHCl

1980.

Bunker P.R.; et al.

J. Mol. Spectrosc., 1980,
83 (2), 288-303.

Ei (faeces)

(cur. Line; III)

Ar HCl

1980

Burdett J.

no. acc
par.

J. Chem. Phys. 1980, 73(6),
2825-32.

cor. ArCl₂ - 11

1980

Ar-HCl

94: 147658v Spectroscopic properties and potential surfaces for atom-diatom van der Waals molecules. Hutson, Jeremy M.; Howard, Brian J. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, Engl. OX1 3QZ). *Mol. Phys.* 1980, 41(5), 1123-41 (Eng). A new method for calcg. accurate spectroscopic consts. for atom-diatom van der Waals mols., based on the BOARS approxn. of S. L. Holmgren et al. (1977), is described. The method includes nonadiabatic corrections which are significant. Mol. properties of Ar-HCl were calcd. for several potential energy surfaces and compared with expt. The centrifugal distortion of the nuclear quadrupole coupling const. is strongly potential dependent.

non-adiab.
p-44-8

C.A. 1981.94N18

Ar • HCl

1980

8 Д73. Спектроскопические свойства и потенциальные поверхности для комплексов типа атом-двухатомная молекула с ван-дер-ваальсовым взаимодействием. Spectroscopic properties and potential surfaces for atom-diatom van der Waals molecules. Hutson Jeremy M., Howard Brian J. «Mol. Phys.», 1980, 41, № 5, 1123—1141 (англ.)

В рамках приближения Борна—Оппенгеймера для разделения радиального и углового движения и с учетом неадиабатич. поправок по методу, развитому авторами в работе (Hutson F. M., Howard B. F. «Molecular Physics», 1980, 41, 1113), выполнен расчет ряда спектроскопич. констант и поверхностей потенц. энергии комплекса Ar·HCl. Дана оценка влияния центробежного искажения на величину константы ядерного квадрупольного взаимодействия. Отмечается необходимость учета неадиабатич. поправок и кориолисова взаимодействия, особенно при расчете вращательной постоянной. Рассмотрен эффект сдвига центра масс в изотопич. системах Ar·HCl и Ar·DCI и его влияние на величину спектроскопич. постоянных. Сравнение с альтернатив-

М, Н,

ф. 1981 N 8

ными расчетами других авторов показывает, что предлагаемый метод, как правило, приводит к более точным результатам при тех же вычислительных затратах.

А. В. Гольцов

Ar...HCl

ommuch 11247 | 1980.

консерв,
кривые
потенц. энергии.
спектр. пост.

Jeremy M., et al.

Mol. Phys., 1980, 41
(5), 1123-41.

ArBrF₃
ArHCl

ArHF

ArClF
ArHBr

names.
names.

(various 9295) 1980

Klemperer w.

J. Mol. Spect.,
1980, 59, 161-176.



(see. Ne₂; III)

1981

Ag·HCl

расчет
потенц.
поверхн.

3 Б131. Межмолекулярная поверхность потенциальной энергии системы Ag·HCl. Hutson J. M., Howard B. J. The intermolecular potential energy surface of Ag·HCl. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 3, 493—516 (англ.)

На основании эксперим. данных по микроволновому и РЧ-спектру вандерваальсовой молекулы Ag·HCl, уширению спектральных линий вращательной структуры HCl в Ag, т-рной зависимости 2-го вириального коэф. смеси указанных газов, и энергетич. зависимости полного сечения рассеяния HCl на Ag (эксперименты в пучках) восстановлены оптим. Пв потенциальной энергии Ag·HCl при фиксированном расстоянии R_{HCl} . Параметры предположенной формы Пт подбирали из условия наилучшего совпадения вычисл. и эксперим. св-в системы Ag·HCl. Исследованы 4 типа параметризации Пв $V(R, \theta)$: 1) мультипольное разл. по полиномам Лежандра $P_l \theta$ с коэф. $v_l \theta$ в виде ф-ций Бэкингема

X. 1982, 19, N3.

(вандерваальсово притяжение и экспоненциальное отталкивание), 2) ф-ции Мейтленда—Смита (аналогично 1, но с орбитальной экспонентой, зависящей от R), 3) интерполяц. ф-ла через четыре точки по θ и 4) Пт Мейтленда—Смита с параметрами, зависящими от θ . Отмечается, что система $\text{Ag}\cdot\text{HCl}$ обладает сильной анизотропией и поэтому мультипольное представление Пт с учетом трех низших гармоник не дает достаточно точной аппроксимации Пт. Основные параметры Пв, одинаковые для всех параметризаций, таковы: миним.

энергия достигается при линейной конфигурации $\text{Ag}\cdot\text{HCl}$, глубина ямы варьирует от 124 до 180 см^{-1} , равновесное расстояние 4А и радиальное положение минимума энергии сильно возрастает при увеличении θ .
Е. Е. Никитин

Ar·HCl

1981

поверхность
межмолекуляр.
потенц.
энергии

ср. 1982,
18, №1.

1 Д166. Поверхность межмолекулярной потенциальной энергии системы Ar-HCl. The intermolecular potential energy surface of Ar-HCl. Hutson Jeremy M., Howard Brian J. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 3, 493—516 (англ.)

Подгонкой методом наименьших квадратов аналитич. ф-ции под эксперим. данные получена поверхность межмолекулярной потенц. энергии ван-дер-ваальсова комплекса Ar-HCl. Использовались результаты экспериментов по: а) микроволновым и радиочастотным спектрам комплексов Ar-HCl и Ar-Cl в молекулярных пучках; б) уширению вращательных линий в этих системах; в) измерениям 2-го вириального коэф.; г) полным сечениям рассеяния при низких энергиях. Для представления радиальной части потенциала использовалась ф-ция Леннард-Джонса с показателем экспоненты, зависящим от межмолекулярного состояния (потенциал, введенный Майтландом и Смитом). Угловая часть записывалась в виде мультипольного разложения, в котором удержи-

вались четыре **первых члена**. Использовались 4 параметризации потенциала и соответственно получены 4 поверхности. Все они характеризуются равновесной линейной конфигурацией $\text{Ag}-\text{H}-\text{Cl}$ с межмолекулярным расстоянием R , равным 4 Å, причем при изгибе комплекса минимум выдавливается вверх и в сторону меньших R . Глубина потенц. ямы равна в среднем 180 см^{-1} . Несколько неопределенной остаются характеристики поверхности для конфигурации $\text{Ag}-\text{Cl}-\text{H}$, поскольку последняя не реализуется в эксперим. условиях.

А. А. Зембеков

Ar...HCl

22. 12229

1981

1 Б455. Радиочастотная спектроскопия высокого разрешения Ar...HCl. Hutson Jeremy M., Howard Brian J. High resolution radiofrequency spectroscopy of Ar...HCl. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 6520—6521 (англ.)

Методом электрич. резонанса в молек. пучке исследована ТС нескольких вращательных переходов в спектрах молекул Ar...H³⁵Cl и Ar...D³⁵Cl. Положения линий спектров сопоставлены с вычисленными с учетом эффектов центробежного искажения и спин-вращательного взаимодействия для Cl. Определены константы квадрупольного взаимодействия для Cl и D в исследуемых комплексах, а также их дипольные моменты.

Л. А. Корытко

кл. Л.



(+1)

X. 1982, 19АБ, N1.

Ar-HCl

077.12229

1981

12 Д469. Радиочастотный спектр высокого разрешения комплекса Ar-HCl. High resolution radiofrequency spectroscopy of Ar...HCl. Hutson Jeremy M., Howard Brian J. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 6520—6521 (англ.)

М.П;

Методом электрич. резонанса в молекулярном пучке измерены частоты (с точностью до 10^{-6} Гц) переходов между компонентами сверхтонкой структуры вращательных уровней с $J \leq 4$ основного колебательного состояния комплексов $\text{Ar}-\text{H}^{35}\text{Cl}$ и $\text{Ar}-\text{D}^{35}\text{Cl}$. Определены значения постоянных квадрупольного взаимодействия ($eq Q = -23,0297 - 1,60 \cdot J(J+1)$ МГц для $\text{Ar}-\text{HCl}$), спин-вращательного взаимодействия ($C = 0,132$ (кГц) ядра Cl и дипольного момента ($\mu = 0,81171 - 0,000021 \cdot J(J+1)$ ед. Дебая для $\text{Ar}-\text{HCl}$).

М. Р. Алиев

Ф. 19-81, 18, N 12.

Ar...DCl

OMMUCK 12229

1981

195: 33065q High resolution radiofrequency spectroscopy of argon...hydrochloric acid. Hutson, Jeremy M.; Howard, Brian J. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, Engl. OX1 3QZ). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(11), 6520-1 (Eng). Seven radiofrequency transitions off the van der Waals mols. $\text{Ar}\dots\text{H}^{35}\text{Cl}$ and 4 of $\text{Ar}\dots\text{D}^{35}\text{Cl}$ were Stark-tracked with a total of 63 line positions being obtained for each isotope. Transitions were obsd for $K = 0$ states within the $J = 1-4$ rotational levels of $\text{Ar}\dots\text{H}^{35}\text{Cl}$ and $J = 2-3$ of $\text{Ar}\dots\text{D}^{35}\text{Cl}$. The centrifugal distortion of the quadrupole coupling const. reflects the fact that the van der Waals bond stretches as the complex rotates, so that a rotating mol. feels a slightly different angular potential at the increased av. intermol. distance. The coeff. of $J(J+1)$ is only ~ 20 ppm in $\langle P_2(\cos \theta) \rangle$, but its sign confirms that the bending force const. increases with increasing intermol. distance.

радиочаст.
чрезмер

C.A. 1981. 95 N4

AgHCl

1981

10 Б71. Точный расчет колебательно-вращательных уровней энергии трехатомных молекул. Kidd I. F., Balint-Kurti G. G., Shapiro M. Exact calculation of the rotational-vibrational energy levels of triatomic species. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1981, № 71, 287—300 (англ.)

Развиваемый авторами метод искусственных каналов применен к расчету колебательно-вращательных уровней энергии молекул AgHCl и H₂O. Сравнение с вариац. расчетом показывает высокую точность использованного подхода. Б. И. Жилинский

расчет
м.п.

⚡
(H)

Х. 1982, 19, N 10.

HCl-Ar

1981

1) 7 Д391. Точный расчет энергии колебательно-вращательных уровней трехатомных соединений. Exact Calculation of the rotational—vibrational energy levels of triatomic species. Kidd I. F., Balint-Kurti G. G., Shapiro M. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1981, № 71, 287—300 (англ.)

расчет E_i

Предложен метод расчета энергии колебательно-вращательных уровней трехатомных систем при заданной потенц. энергии взаимодействия. Метод применен к расчету комплекса HCl—Ar и первых колебательных уровней молекулы H_2O . Для комплекса HCl—Ar расчет проведен для нескольких потенциалов. Отмечена быстрая сходимость и высокая точность вычислений. М. В. Т.

ф. 1982, 18, № 7.

McL. Az

1981

Votava Christian,
et al.

Internat. Forces. Proc. 14th
Symp. Quantum Chem. and
Biochem., Jerusalem, Apr.
13-16, 1981. Dordrecht. e.a.,
1981, 133 - 147.

(см. McL ; III)

Электрон.
свойства,
структура.

Ar-HCl

1982

1 Б187. Глубина межмолекулярных потенциальных ям из температурной зависимости спектров поглощения газообразных комплексов в смесях HCl с благородными газами. Intermolecular potential well depths from the temperature dependence of the absorption spectra of gas-phase complexes in HCl-noble gas mixtures. Bom E. W., van der Elsken J. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 2, 625—630 (англ.)

Do;

Исследована ν -рная ($T=170-293\text{ K}$) зависимость спектров поглощения в длинноволновой ИК-области газообразных смесей HCl с Ar и Xe. Появление полос в области $\sim 30\text{ см}^{-1}$ (для смеси с Ar) и $\sim 50\text{ см}^{-1}$ (для смеси с Xe) указывает на образование в смесях ван-дер-ваальсовых молекул Ar-HCl (I) и Xe-HCl (II). По ν -рной зависимости интенсивностей полос энергии диссоциации комплексов оценена в $184-24$ и $339 \pm \pm 33\text{ см}^{-1}$ для I и II, соответственно. А. В. Бобров

(41) ~~41~~

X. 1983, 19, №1

Ar-HCl

1982

1 Д608. Определение глубины ямы межмолекулярных потенциалов комплексов HCl — инертный газ по температурной зависимости спектров поглощения газовых смесей. Intermolecular potential well depths from the temperature dependence of the absorption spectra of gas-phase complexes in HCl—noble gas mixtures. Boon E. W., van der Elsken J. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 2, 625—630 (англ.).

№;

Спектры поглощения ван-дер-ваальсовских комплексов Ar—HCl и Xe—HCl в далекой ИК-области исследованы при различных T -рах в диапазоне 175—293 К. Предложен метод анализа температурных зависимостей интенсивности линий комплексов в ИК-спектрах поглощения. Оценены энергии диссоциации комплексов: $(184 \pm \pm 24) \text{ см}^{-1}$ для Ar—HCl и $(339 \pm 33) \text{ см}^{-1}$. Библ. 20.
В. С. Иванов

(4) 

сп. 1983, 18, №1

Ar-HCl

1982

97: 169244w Intermolecular potential well depths from the temperature dependence of the absorption spectra of gas-phase complexes in hydrogen chloride-noble gas mixtures. Boom, E. W.; Van der Elsken, J. (Lab. Phys. Chem., Univ. Amsterdam, 1018 WS Amsterdam, Neth.). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(2), 625-30 (Eng). The far IR spectra of the Ar-HCl and Xe-HCl van der Waals mols. were detd. at various temps. A method was developed for analyzing the temp. dependence of the intensities of the absorption lines. Apart from information on the relative positions of the energy levels involved in the obsd. transitions, the data gave an est. of D_0 , the dissociation energy of the complex: $184 \pm 24 \text{ cm}^{-1}$ for Ar-HCl and $339 \pm 33 \text{ cm}^{-1}$ for Xe-HCl.

lek chexep,
 D_0

(7) ~~X~~ Xe-HCl

C.A. 1982, 97, N 20.

Ar HCl

1982

Ar ClH

Stone Anthony J.,
Mayes Ian C.

Faraday Discuss. Chem.
Soc., 1982, N 73, 19-31.
Discuss., 109-136.

(see. Ar HF; III)

Ar · HCl

1983

10 Д62. Вращательная преддиссоциация ван-дер-ваальсова комплекса Ar · HCl. Расчеты методом сильной связи теории рассеяния. Rotational predissociation of the Ar · HCl van der Waals complex. Close-coupled scattering calculations. Ashton C. J., Child M. S., Hutson Jeremy M. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 6, Pt 2, 4025—4039 (англ.)

Заемствованный из теории рассеяния метод сильной связи используется для расчета положения и ширины резонансов для ван-дер-ваальсова комплекса Ar · HCl, распадающегося в результате вращательной преддиссоциации, при которой энергия, необходимая для разрыва Ar...HCl связи, черпается из вращательной энергии молекулы HCl. Используется вид взаимодействия, соответствующий взаимодействию атома с жестким ротатором, причем глубина потенц. ямы и параметр анизотропии потенциала получены из данных по рассеянию в молекулярных пучках. Рассчитанные резонансные ширины оказались в пределах 10^{-4} — 8 см $^{-1}$, причем приближение изолированного резонанса оказа-

м.п., стро-
ение

Ср. 1983, 18, N 10

лось пригодным только для очень узких резонансов. Сравнение точного расчета с приближенными позволило провести приближенное отнесение квантовых чисел каждому резонансному уровню. При этом выяснилась зависимость ширины резонансов от квантового числа внутреннего вращения комплекса, квантового числа, соответствующего растяжению вдоль линий связи, и квантового числа проекции углового момента на молекулярную ось.

А. А. Зембеков

Ar · HCl

1983

98:167276e Rotational predissociation of the argon-hydrogen chloride (Ar.HCl) van der Waals complex: close-coupled scattering calculations. Ashton, C. J.; Child, M. S.; Hutson, Jeremy M. (Theor. Chem. Dep., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3TG). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(6, Pt. 2), 4025-39 (Eng). An extensive computational study was made of rotationally predissocg. metastable states of the Ar-HCl van der Waals complex, using a highly realistic empirical intermol. potential recently proposed by J. M. Hutson and B. J. Howard (1981). The states are characterized by fully converged, close-coupled, scattering calcns. Resonance energies, widths, and partial widths are extd. by fitting the energy dependence of *S* matrixes. Total angular momenta of 0 and 1 are studied, and the calcns. span an energy range from 0 to 1400 cm⁻¹. Comparison of the close-coupling results with approx. calcns. enables assignment of approx. quantum nos. to the metastable states. Phys. explanations are suggested for the strong trends in resonance parameters as a function of the intermol. stretching, diatom rotation, and mol.-fixed angular momentum projection quantum nos.

nomety.
sp-ue, nre-
gucco.

C. A. 1983, 98, N20

Ar: HCl
Ar: HF
и др.

Om. 17275

1983

UK снєкмп
в лампє
(обзор)

Barnes A. J.,
J. Mol. Spectr., 1983,
100, 259-280

ArHCl

Om. 17020

1983

Д 24 Б289. Вращательный эффект Зеемана в AgHCl и AgDF . Rotational Zeeman effect in AgHCl and AgDF . Campbell E. J., Read W. G. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6490—6501 (англ.)

Методом импульсной МВ-фурье-спектроскопии исследован эффект Зеемана для вращательных спектров молекул AgH^{35}Cl , AgH^{37}Cl , AgDF . Из этих данных определены молек. g -факторы и анизотропии магнитной восприимчивости. Рассмотрена связь этих параметров со знаками электр. дипольных моментов молекул, величиной молек. квадрупольных моментов и анизотропией вторых моментов распределений электронных зарядов. Обсуждены особенности изменения электронной структуры атомов благородного газа и молекул галогеноводорода при комплексообразовании. Л. А. Корытко

М.П.

(4) ☒

X. 1983, 19, 424

АрНСС

От. 17020

1983

11 Д509. Вращательный эффект Зеемана в молекулах ArHCl и ArDF . Rotational Zeeman effect in ArHCl and ArDF . Campbell E. J., Read W. G. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6490—6501 (англ.)

Методом импульсной спектроскопии Фурье в микроволн. диапазоне частот измерены g -факторы молекул ArH^{35}Cl , ArH^{37}Cl и ArDF . Измерения проводятся на частотах ~ 10 ГГц в магн. полях до 3 Тл с использованием микроволн. резонатора Фабри—Перо, расположенного в центре сверхпроводящего соленоида. Обсуждена корреляция полученных эксперим. данных с известными значениями электрич. дипольных моментов, квадрупольных моментов и вторых моментов распределения электронных зарядов. Сделан вывод, что вклад атома благородного газа в измеряемое значение g -фактора пренебрежимо мал, тогда как величина анизотропии магн. восприимчивости в сильной степени зависит от атома благородного газа. Библи. 40. В. С. З.

М.П.

(4) X

оп. 1983, 18, N 11

ArHCl

Om.

17020

1983

99: 13122k Rotational Zeeman effect in ArHCl and ArDF.
 Campbell, E. J.; Read, W. G. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois,
 Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(11), 6490-501
 (Eng). The mol. g values and magnetic susceptibility anisotropies of
 ArH³⁵Cl, ArH³⁷Cl, and ArDF were measured by pulsed Fourier-
 transform microwave spectroscopy carried out in a Fabry-Perot
 cavity located in the bore of a superconducting solenoid magnet.
 The measured magnetic parameters for these 3 mols., obtained from
 rotational Zeeman splittings of $K = 0$ R -branch transitions are
 given. The relation between these measurements and the signs of the
 elec. dipole moments, the mol. quadrupole moments, and the
 anisotropy in the 2nd moments of the electronic charge distribution
 is discussed, with particular emphasis on the effects of the large
 zero-point bending motions present in these mols. The relations
 between the measured Zeeman parameters and the properties of the
 individual rare gas and H halide subunits were treated. The
 contribution of the rare-gas atom to the measured $g_{\perp}$ values is
 negligibly small, but the rare-gas atom apparently does make a
 measurable contribution to the magnetic susceptibility anisotropies
 of at least the HF contg. systems.

④

Franziam -
 Zeem. paper

C.A. 1983, 89, N2

ArDF

Ar - HCl

1983

3 Б1108. Теоретическое изучение ван-дер-ваальсовых молекул: общий формализм. Theoretical studies of van der Waals molecules: general formulation. Danby G. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1983, 16, № 18, 3393—3410 (англ.)

Развит общий подход к определению энергий связанных состояний ван-дер-ваальсовых молекул, состоящих из двух двухатомных молекул, рассматриваемых как жесткие ротаторы. Метод основан на разложении волновой функции системы по вращательному базису в молек. системе координат. Проведен полный учет симметрии изучаемой системы. Отдельно рассмотрены случаи двух разных гетероядерных молекул, двух одинаковых гетероядерных молекул и двух гомоядерных молекул. Полученная с помощью интегрирования по угловым переменным система радиальных дифферен-

расчет
энергий
утопии

х. 1984, 19, № 3

циальных уравнений решается методом Вогелера и пропагаторным R -матричным методом. Изучена сходимость обоих методов. На примере вычисления энергетических уровней системы Ag—HCl показано, что оба рассмотренных метода приводят к достаточно точным результатам.

В. Б. Павлов-Веревкин

Ar-MCl

1983

2 Д149. Теоретическое изучение ван-дер-ваальсовых молекул: общая формулировка. Theoretical studies of Van der Waals molecules: general formulation. Дан by G. «J. Phys. B: Atom and Mol. Phys.», 1983, 16, № 18, 3393—3410 (англ.)

Для ван-дер-ваальсова молекулярного комплекса рассмотрена модель двух слабо связанных жестких двухатомных ротаторов. Проведен учет симметрии для комплексов из двух идентичных молекул или включающих хотя бы одну гомоядерную молекулу. Для численного решения спектральной задачи используются методы R-матричного пропагатора и Девогелэра и сравниваются свойства сходимости этих процедур с увеличением вращательного базиса. В качестве простого примера рассмотрен комплекс Ar-HCl. Полученные значения энергетич. уровней хорошо согласуются с имеющимися теоретич. данными. Библ. 31.

А. Ф. Шестаков

структура,
& ;

ф. 1984, 18, № 2

ArHCl

Om. 19390

1984

2 Л200. Спектроскопия и динамика комплексов ArHCl . Spectroscopy and thermodynamics of ArHCl . Bernstein Lawrence S., Wormhoudt Joda. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 10, 4630—4639 (англ.)

Разработана модель, предназначенная для анализа ИК-спектров поглощения атом-двухатомных ван-дер-ваальсовских комплексов. Модель использована для расчета ИК-спектров поглощения комплексов ArHCl . Получено хорошее согласие рассчитанных спектров со спектрами, измеренными в работе (Mizioleck A. W., «J. Chem. Phys.», 1976, 65, 4462). Предложен также квантовомеханич. метод расчета ф-ций распределения связанных и метастабильных комплексов. С использованием этого подхода рассчитаны термодинамич. свойства комплексов ArHCl . Определены, в частности, теплота образования комплексов и температурная зависимость константы равновесия. Библ. 48. В. А. Е.

м.п., т.ф.,
 ΔH_f ;

① Ar

ср. 1985, 18, 42

ArHCl (т.ф., ΔH_f)

АрНс

Ом. 19390

1984

20 Б3003. Спектроскопия и термодинамика AgHCl . Spectroscopy and thermodynamics of AgHCl . Bernstein Lawrence S., Wormhoudt Joda. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 10, 4630—4639 (англ.)

Развита общая модель для анализа ИК-спектров ван-дер-ваальсовых молекул типа атом—диатомная молекула (АДМ). При использовании энергетич. уровней и спектроскопич. параметров в приближении Пт М5 Хатсона и Говарда эта модель количественно воспроизводит ранее наблюдавшийся спектр AgHCl в области нулевого интервала спектра мономера HCl . Обсуждена термодинамика систем атом—атом и АДМ. Выведен приближенный квантовомех. метод для оценки функций распределения (ФР) связанных и метастабильных состояний. Представлены простые выражения для ФР, к-рые точно воспроизводят надежные результаты для атом-атомных комплексов. Обсужден обобщенный подход к системам АДМ. ФР использованы для расчета теплоемкостей и констант равновесия.

По резюме

X. 1984, 19, № 20

ArHCl

Om. 19390 } 1984

101: 14269k Spectroscopy and thermodynamics of argon hydrogen chloride (ArHCl). Bernstein, Lawrence S.; Wormhoudt, Joda (Spectral Sci., Inc., Burlington, MA 01803 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(10), 4630-9 (Eng). A general model for anal. of the IR spectrum of atom-diatom van der Waals mols. was developed. By using energy levels and spectroscopic parameters based on the J. M. Hutson and B. J. Howard (1981, 1982) M5 potential, this model quant. reproduces the previously obsd. ArHCl spectrum in the null gap of the monomer HCl spectrum. The thermodyn. of atom-atom and atom-diat. systems is discussed. An approx. quantum mech. method of evaluating bound and metastable partition functions is derived. Simple expressions for the partition functions are given which are shown to accurately reproduce the well established results for atom-atom complexes. The generalization of the approach to atom-diatomics is discussed. These partition functions were used to calc. thermodyn. properties such as heat capacities and equil. consts.

lek chetmp,
cyllla no
locm.,
mymy. qp-uu

C.A. 1984, 101, N2

As-HCl [Om. 19455]

1984

KP. Mex.
pacem

Douketis C., Hutson J.M.,
et al.,

Mol. Phys., 1984, 52,
N4, 763-782.

ArHCL

1984

Hayes I.C., Hurst G.J.B.,
Stone A.J.

Mol. Phys., 1984, 53, N1,
107-127.

( cer. Me Be; III)

Ar-HCl

DM 20 261

1984

4 Л177. Колебательная преддиссоциация и ИК-спектр ван-дер-ваальсовых молекул $\text{Ar}=\text{HCl}$. ~~Vibrational predissociation and infrared spectrum of the Ar-HCl. Van der Waals molecule.~~ Hutson Jeremy M. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 5, 2357—2362 (англ.)

Рассчитаны энергетич. уровни и времена жизни димеров $\text{Ar}=\text{HCl}$. В расчетах использована потенц. поверхность с абс. минимумом для линейной конфигурации $\text{Ar}=\text{HCl}$ и вторичным минимумом для конфигурации $\text{Ar}-\text{HCl}$. Приведены энергии колебательно-вращательных состояний молекулы HCl в комплексе, параметры потенциала для возбужденного состояния HCl $v=1$ найдены из модельных соображений и сдвига колебательной частоты HCl в твердом Ar . Рассчитаны уровни колебательной энергии димера и времена жизни соответствующих состояний, определяемые колебательной преддиссоциацией. Возникающее за счет этого механизма уширение линий составляет ~ 1 МГц. Рассмотрен спектр ИК-поглощения димера в области основного тона HCl . Обсуждаются ограничения теории, приводящие к трудностям в предсказании энергетич. состояний продуктов диссоциации.

М. В. Т.

ИК спектр, Е

Ф. 1985, 18, № 4.

Ar · HCl

Om. 20261

1984

101: 160417y Vibrational predissociation and infrared spectrum of the argon-hydrogen chloride van der Waals molecule. Hutson, Jeremy M. (Univ. Chem. Lab., Cambridge, UK CB2 1EW). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(5), 2357-62 (Eng). The energies and lifetimes of bound and vibrationally predissociating states of Ar-HCl were calcd. by using accurate close coupling calcs. on the best available potential energy surface, and the selection rules governing the IR spectrum are described. The vibrational predissocn. lifetimes are of the order of microseconds; thus the resulting spectroscopic lines will be sharp (width < 1 MHz), but the excited states will not survive to travel far down a mol. beam. The dominant predissocn. product is HCl in the highest accessible rotational level ($j = 15$). Perturbation theory calcs. of the lifetimes and product state distributions are drastically in error.

(ВК спектр
предиссоц.)

C.A. 1984, 101, N18.

Ar-HCl

Ом. 20264 1984

6 B1081. Колебательная преддиссоциация и инфракрасный спектр вандерваальсовой молекулы Ar—HCl. Vibrational predissociation and infrared spectrum of the Ar—HCl Van der Waals molecule. Hutson Jeremy M. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 5, 2357—2362 (англ.)

В приближении сильной связи рассчитаны положения уровней энергии и времена жизни связанных и колебательно-преддиссоциирующих состояний вандерваальсовой молекулы Ar—HCl. Потенциальная поверхность молекулы задана с помощью введенного Хатсоном и Ховардом М5-потенциала взаимодействия Ar и HCl, в котором явно учтена зависимость от межъядерного расстояния $R(H-Cl)$. Времена жизни преддиссоциирующих состояний оценены в несколько мкс, что определяет достаточную узость спектральных линий. Распределение продуктов преддиссоциации характеризуется ростом засе-

геометр., структура
потенциальной поверхности

х. 1985, 19, № 6

ленности вращательных состояний HCl вплоть до $j=$
 $=15$ и запретом образования энергетически наиболее
близкого к резонансу состояния с $j=16$. Показано, что
расчет по теории возмущений не воспроизводит полу-
ченных данных.

Г. Г. Дьяченко

Ar-HCl

1984

ab initio
program

104: 40006d Ab initio calculations on weakly bonded systems. Van Lenthe, Joop H.; Van Dam, Teus; Van Duijneveldt, Frans B.; Kroon-Batenburg, Loes M. J. (Theor. Chem. Group, Univ. Utrecht, Utrecht, Nider). *Faraday Symp. Chem. Soc.* 1984, 19 125-35 (Eng). Large-basis CI calcns. were performed on the van der Waals complexes Ar-HCl and $(H_2O)_2$. A reasonable est. of the CI basis-set superposition error is obtained from a ghost calcn. involving the orbitals of the monomer and only the virtual orbitals of the ghost. Both basis-set superposition error corrections and size-consistency corrections are of vital importance to obtain a reliable potential-energy surface. For Ar-HCl, the min. of the potential are predicted within 50 μ hartree of the exptl. surface, i.e. -804 μ hartree for the Ar-HCl orientation and -565 μ hartree for the HCl-Ar geometry. The $(H_2O)_2$ van der Waals min. is estd. to be -4.9 kcal/mol, which is less deep than the exptl. derived min. of -5.4 kcal/mol, but just within the exptl. error limit.

(4) $\otimes$ $(H_2O)_2$

c. A. 1986, 104, N 6

Ar-HCl

1984

1 B1110. Неэмпирические расчеты слабосвязанных систем. Ab initio calculations on weakly bonded systems. van Lenthe J. H., van Dam T., van Duijneveldt F. B., Kroon-Batenburg L. M. J. «Faraday Symp. Chem. Soc.», 1984, № 19: Symp. Mol. Electron. Struct. Calc. Meth. and Appl., Cambridge, 12—13 Dec., 1984, 125—135 (англ.)

Рассчитаны потенциальные Пв вандерваальсовых комплексов Ag—HCl и (H₂O)₂. Расчет проведен методом конфигурац. взаимодействия (KB) с учетом одно- и двукратных возбуждений для Ag—HCl и методом связанных электронных пар для (H₂O)₂. Использованы различные базисы сгруппированных гауссовых ф-ций. Геометрич. параметры мономеров взяты из эксперимента. На потенциальной Пв Ag—HCl получены минимумы $-8,04 \cdot 10^{-4}$ и $-5,65 \cdot 10^{-4}$ ат. ед. при ориентации Ag—HCl и HCl—Ag соотв., что согласуется с эксперим. данными в пределах ошибки эксперимента ($5 \cdot 10^{-5}$ ат. ед.). Рассчитанная глубина потенциальной ямы для димера воды (4,9 ккал/моль) согласуется с экспериментальной (5,4 ккал/моль) в пределах эксперим. ошибки.

А. А. Сафонов

расчет потенц.
поверки.

И

х. 1986, 19, N1

Ag-HCl

1984

2 Д189. Неэмпирические расчеты слабо связанных систем. Ab initio calculations on weakly bonded systems. Van Lenthe Joop H., Van Dam Teus, Van Duijneveldt Frans B., Kroon-Batenburg Loes M. J. «Faraday Symp. Chem. Soc.», 1984, № 19: Symp. Mol. Electron. Struct. Calc. Meth. and Appl., Cambridge, 12—13 Dec., 1984, 125—135 (англ.)

Рассчитаны равновесные значения геометрич. параметров и энергии диссоциации (ЭД) ван-дер-ваальсовых комплексов Ag-HCl (I) и (H₂O)₂ (II). При исследовании I использован метод конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений исходной хар-три-фоковской конфигурации, реализованный в обширных сгруппированных гауссовых базисах. Размерногласованность результатов достигалась введе-

расчет выполнен,
до

ср. 1986, 18, №2

● (H₂O)₂

нием поправки Попла; отмечено преимущество этого приема перед традиционным вычислением поправки по Дэвидсону. Проанализировано несколько способов исключения ошибок перекрывания базисных наборов мономеров. Расчетная ЭД I составила $8,04 \cdot 10^{-4}$ ат. ед. Помимо глобального минимума, на потенц. поверхности I найден один локальный минимум. Расчет комплекса II проводился в приближении связанных электронных пар; оценка ЭД равна $7,76 \cdot 10^{-3}$ ат. ед.

А. В. Зайцевский

ArHCl

(Om. 22373)

1985

103: 221202q Model potential study of the interactions in ArHCl, ArHBr, KrHCl and XeHCl systems. Andzelm, Jan; Huzinaga, Sigeru; Klobukowski, Mariusz; Radzio, Elzbieta (Dep. Chem., Univ. Alberta, Edmonton, AB Can. T6G 2G2). *Chem. Phys.* 1985, 100(1), 1-11 (Eng). The model-potential method (A. et al., 1984) was used in SCF and dispersion-energy calcns. of the weak interactions in ArHCl, ArHBr, KrHCl, and XeHCl systems. The computed geometries of these systems were close to the exptl. ones. The trends in exptl. interaction energies were satisfactorily reproduced by the present results, esp. those obtained by using the Moeller-Plesset scheme of the dispersion-energy calcns. The ArHBr-potential-energy surface was similar to that of ArHCl.

meop. paper
NOMEX 9-114

(73) 18

@.A. 1985, 103, N 26

ArHCl

DM. 31099

1985

103: 29434a Spectroscopy of rare gas hydrogen halide complexes. Bernstein, Lawrence S.; Wormhoudt, Joda (Spectral Sci., Inc., Burlington, MA 01803 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(11), 4802-8 (Eng). A recently developed band contour model is used to analyze the gas phase spectra of rare gas hydrogen halide complexes in the region of the hydrogen halide fundamental. The sensitivity of model predicted spectra of variation of major spectroscopic parameters is illustrated for ArHCl. Published spectra from several groups for KrHCl, XeHCl, ArHBr, and XeHBr are considered. The unusual appearance of the XeHCl spectrum is attributed to the large shift of the HCl fundamental frequency -12.5 cm^{-1} when complexed to Xe. Through spectral anal. the dissoen. energies of these complexes were 214 (KrHCl), 220 (XeHCl), 230 (ArHBr), and 300 cm^{-1} (XeHBr). The uncertainty in these dissoen. energies and comparison to other ests. are discussed.

(Vi, жеруе
гидрохлорид)

(74) 

C. A. 1985, 103, N 4.

ArHCl

[Dm. 23038]

1985

104: 26343e Rotational predissociation and libration in the infrared spectrum of argon-hydrogen chloride. Howard, B. J.; Pine, A. S. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 122(1-2), 1-8 (Eng). Fully resolved rotational structure in the high-frequency vibrational region of the Ar-HCl van der Waals complex was recorded under thermal equil. conditions at 127 K with a tunable difference-frequency laser. Both the fundamental H-Cl stretch and its combination with the low-frequency large-amplitude bend (libration) were obsd. with comparable intensities. An abrupt cutoff of the spectrum at high J due to rotational predissocn. yields a measure of the binding energy of the complex. The band center shifts and rotational and distortion consts. provide much information about the interaction potential surface and its vibrational dependence and about perturbations from low-frequency modes not directly obsd.

Вращам-
свращива
и свращив

c. A. 1986, 104, 24

ArHCl

1985

/ 103: 223529a Characterization of the lowest-lying Π bending state of argon-hydrogen chloride by far infrared laser-Stark spectroscopy and molecular beam electric resonance. Marshall, Mark D.; Charo, Arthur; Leung, Helen O.; Klemperer, William (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(10), 4924-33 (Eng). Far-IR laser-Stark spectroscopy was used to populate an excited vibrational state in the van der Waals mol., ArHCl, in a mol. beam. Microwave - far-IR double resonance allows the identification of this state as the 1st excited bending state of Π symmetry. Subsequent radio-frequency elec. resonance of the vibrationally excited mol. combined with far-IR - radio-frequency 2-photon expts. gives the following spectroscopic consts.: $\nu_0 - B'$ = 33.9248(7) (cm^{-1}), B' = 1695.(20) (MHz), μ = 0.265(3) (D), eqQ_{aa} = 12.(7) (MHz), $eqQ_{bb} - eqQ_{cc}$ = -73.927(23) (MHz), q_1 = -49.583(2) (MHz). These consts. were compared with theor. predictions obtained using previously suggested potential energy surfaces and are related to the presence of other nearly vibrational states.

(Yb, UK,
M.N.)

C.A. 1985, 103, N26

ArHCl

1985

4 Б1093. Квантовый колебательный хаос в вандерваальсовой молекуле ArHCl . Quantum vibrational chaos in the ArHCl van der Waals molecule. Tennyson Jonathan. «Mol. Phys.», 1985, 55, № 2, 463—473 (англ.)

Выполнены расчеты 15 нижних связанных колебат. состояний в эмпирич. М5 потенциале Хатсона — Ховарда для вандерваальсовой молекулы ArHCl . Обсуждено применение различных критериев, определяющих хаотич. режим движения системы в квантовом случае, для выяснения характера движения в различных колебат. состояниях этой молекулы. Найдено, что состояния с энергиями, большими $2/3D$, где D — энергия диссоциации, являются хаотическими. Показано, что переход от регулярного к хаотич. режиму движения в изучаемой молекуле управляется в основном оператором кинетич. энергии. Обсуждено влияние вращения на хаотичность колебательного движения в ArHCl .

В. Б. Павлов-Веревкин

м.п., &;

X. 1986, 19, 44

ArHCl

1985

3 Д91. Изучение с помощью метода модельного потенциала взаимодействий в системах ArHCl, ArHBr, KrHCl и XeHCl. Model potential study of the interactions in ArHCl, ArHBr, KrHCl and XeHCl systems. Andzelm Jan, Huzinaga Sigeru, Klobukowski Mariusz, Radzio Elżbieta. «Chem. Phys.», 1985, 100, № 1, 1—11 (англ.)

Методом ССП с аппроксимацией остовных орбиталей модельным потенциалом и последующим учетом электронной корреляции методом многочастичной теории возмущений в вариантах Меллера — Плессета (МП) и Эпштейна — Несбета (ЭН) выполнены расчеты энергий взаимодействия (ЭВ) в системах HgHCl (Hg=Ar, Kr, Xe) и ArHBr. Сравнение полученных результатов с эксперим. данными показало, что они согласуются в пределах 0,1 Å для геометрич. параметров молекул и 20% для энергий. При этом найдено, что МП-расчеты более предпочтительны, чем ЭН-расчеты. Отмечено, что дисперсионный вклад в полную ЭВ обусловлен в основ-

4 (13)

ср. 1986, 18, №3

ArHBr, KrHCl, XeHCl

ном $3p-2\pi$ - и $3p-5\sigma$ -дисперсионными взаимодействиями. Найдено, что в МП-расчетах дисперсионная энергия (ДЭ), как правило, недооценивается вследствие отсутствия в базисе поляризационных ф-ций с высоким угловым моментом (в первую очередь, f ф-ций), а в ЭН-расчетах — переоценивается, поскольку при этом включаются интракорреляционные вклады. Сделан вывод о том, что хотя согласие с экспериментом величин ДЭ, полученных в МП- и ЭН-расчетах, приблизительно одинаковое, методика МП более удобна и перспективна для расчетов ДЭ. Обсуждено влияние на получаемые результаты учета релятив. эффектов. Библ. 37. А. И. К.

ArHCl

1985

6 Б1155. Изучение взаимодействия в системах ArHCl, ArHBr, KrHCl и XeHCl с использованием модельного потенциала. Model potential study of the interactions in ArHCl, ArHBr, KrHCl and XeHCl systems. Andzelm Jan, Huzinaga Sigeru, Klobukowski Mariusz, Radzio Elżbieta. «Chem. Phys.», 1985, 100, № 1, 1—11 (англ.)

Рассчитаны энергии взаимодействия атомов инертных газов с молекулами HCl и HBr в системах ArHCl, ArHBr, KrHCl и XeHCl. Хартри-фоковский и дисперсионный вклады в энергию взаимодействия получены в приближении модельного основного потенциала, использованного ранее авторами для расчета димеров инертных газов («Mol. Phys.», 1984, 52, 1495). Дисперсионные вклады определены по теории возмущений Меллера—Плессета или Эпштейна—Несбета. Получены потенциальные кривые (при фиксированных межъядерных расстояниях HX) для трех различных ориентаций молекулы HX относительно атома Rg (X = Cl или Br, Rg благородный газ): для линейных конфигураций RgHX и RgXH и T-образной конфигурации. Линейная конфигурация RgHX отвечает абс. минимуму энергии, а линейная конфигурация RgXH — локальному минимуму.

⊗ (+3)

потенц. крив.,
геометрия

х. 1986, 19, № 6.

на од. А. А. Сафонов

ArHBr , KrHCl , XeHCl

Ar-HCl

1985

4 Л189. Вращательная преддиссоциация и либрация в ИК-спектре Ar-HCl . Rotational predissociation and libration in the infrared spectrum of Ar-HCl . Howard B. J., Pine A. S. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 1-2, 1-8 (англ.)

С помощью лазерного спектрометра, использующего смещение излучений лазеров Ar^+ и на красителе, с шириной линии 1 МГц получены спектры ИК-поглощения димеров Ar-HCl , образованных в смеси газов HCl (2 мм рт. ст.) и Ar (7 мм рт. ст.) при $t_{\text{ре}} 127 \text{ K}$ в слое 72 м. Полностью разрешена вращательная структура спектра. Интерпретация выполнена с привлечением микроволн. данных в предположении линейной структуры комплекса. Наблюдаемые линии отнесены к полосе ν_1 , близкой по частоте к основной полосе HCl , и комбинационной полосе $\nu_1 + \nu_2$ с участием деф. кол. Вблизи $J \approx 60$ вращательная структура полос обрывается, что связано с преддиссоциацией вращением. Определены колебательные частоты полос, вращательные постоянные в возбужденных колебательных состояниях и константы центробежного растяжения. Библ. 39. М. В. Т.

спектр,

М. П.

ср. 1986, 18, 14

ArHCl

1985

Janda Kenneth C.

oδgop Photodissociat. and
Photoionizat. Chichester
e. a., 1985, 201-244.

( ArH₂; III)

Ar HCl

1985

№10 Б1335. Характеристика низлежащего Π изгибного состояния $\text{Ar}-\text{HCl}$ при использовании методов далекой инфракрасной лазерно-штарковской спектроскопии и электрического резонанса в молекулярном пучке. Characterization of the lowest-lying Π bending state of $\text{Ar}-\text{HCl}$ by far infrared laser-Stark spectroscopy and molecular beam electric resonance. Marshall M. D., Chao A., Leung H. O., Klemperer W. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 10, 4924—4933 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

М.П.

Методом длинноволновой ИК-лазерной-штарковской спектроскопии с использованием эл. резонанса в молек. пучке исследована СТС вращат. переходов вандерваальсовой молекулы $\text{Ar}-\text{HCl}$ в 1-м возбужденном изгибном колебат. состоянии Π -симметрии. Для Π -состояния определены частота изгибной моды $\nu_0 - B' = 33,9248(7) \text{ см}^{-1}$, вращат. постоянная $B' =$

X. 1987, 19, n 10

$= 1695(20)$ МГц, дипольный момент $\mu = 0,265(3)$ D и постоянные квадрупольного взаимодействия $1qQ_{aa} = 12(7)$ МГц, $eqQ_{bb} - eqQ_{cc} = -73,927(23)$ МГц. Полученные спектроскопич. данные согласуются с результатами модельного расчета для Пв потенциальной энергии, предложенной Гастоном и Говардом («Mol. Phys.», 1982, 45, 769). С. Н. Мурзин

ArHCl

[Om. 23906]

1985

Marshall M.D., Charo A.,
Leeung H.O. et al.,

мизини
электрон-
состоян,
лк лазерн.
спектр

J. Chem. Phys., 1985,
83, N 10, 4924-4933.

Ar. Hill

1985

/ 105: 199508m Intracavity far infrared laser Stark spectroscopy of a supersonic free jet: a study of the ν_2 bending vibration of argon-hydrochloric acid. Ray, Douglas (Univ. California, Berkeley, CA USA). 1985. 218 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8610179. From *Diss. Abstr. Int. B* 1986, 47(3), 1084.

(ν_2)

C. A. 1986, 105, N 22

ArHCl

1985

3 Д106. : Квантовый колебательный хаос в ван-дер-ваальсовой молекуле ArHCl. Quantum vibrational chaos in the ArHCl van der Waals molecule. Tennyson Jonathan. «Mol. Phys.», 1985, 55, № 2, 463—473 (англ.)

С использованием полуэмпирич. потенциалов рассчитаны колебат. состояния ван-дер-ваальсовой молекулы ArHCl. Состояния с энергией связи, меньшей 40 см^{-1} , являются хаотическими, что определяется по хаотич. поведению линий равного уровня для волн. функции, по нерегулярной зависимости колебат. энергий от расстояния HCl от Ar и по зависимости колебат. энергий от массы одной из частиц (водорода). Управляющим параметром, определяющим переход к хаотич. поведению, служит не потенциал, как обычно, а оператор кинетич. энергии. Экспериментально это можно было бы проверить по нерегулярной зависимости колебат. уровней при замене H_2 на изотоп. Существующей эксперим. точности, однако, недостаточно для обнаружения этого эффекта.

М.П., М.П.

ф. 1986, 18, №3

Ar-HCl [Om. 24729] 1986

Celi F. G., Janda K. C.

обзор,
колебаний.
спектр,
потенц.
поверхн.
предис-
соедин.

Chem. Rev., 1986,
86, N 3, 507-520.



Ar • HCl

1986

(u.n.)

105: 160993r The augmented secular equation method for calculating spectra of van der Waals complexes. Application to the infrared spectrum of argon-hydrogen chloride. Hutson, Jeremy M. (Chem. Lab., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EW). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1986, 82(8), 1163-71 (Eng). The recently proposed (1985) secular equation-perturbation theory (SEPT) procedure for calcg. spectra of van der Waals mols. was tested on the strongly anisotropic system Ar-HCl. It is more accurate than other available approx. schemes, but the convergence with respect to basis set size is slow. An alternative method, which uses the perturbation correction from a SEPT calcn. to augment the original secular equation basis set, converges considerably faster. This method was used to calc. spectroscopic properties for various excited states of Ar-HCl and the results are compared with exptl. data.

c. A. 1986, 105, N18

Ar·HCl

OM 23798, a" 1986

ВК Лапте-
ЧЕРМР

104: 98452n Vibrational spectroscopy of van der Waals bonds: measurement of the perpendicular bend of argon-hydrogen chloride (ArHCl) by intracavity far infrared laser spectroscopy of a supersonic jet. Ray, Douglas; Robinson, Ruth L.; Gwo, Dz Hung; Saykally, Richard J. (Dep. Chem. Mater., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(3), 1171-80 (Eng). The development is reported of a sensitive laser technique for measuring the vibrational motions in van der Waals bonds. This technique was used to detect the lowest perpendicular bending vibration in ArHCl near 35 cm^{-1} with signal-to-noise ratios $\geq 10^4$ and with resolu. of nuclear hyperfine structure. A total of 80 Stark-hyperfine components of the $R(0)$, $Q(1)$, $Q(2)$, rotational lines were measured with a precision of $\leq 1\text{ MHz}$ and were analyzed by least squares techniques to obtain precise values for the vibrational band origin [$\nu = 1,018,731.20(31)\text{ MHz}$], the dipole moment [$\mu = 0.26026(11)\text{ D}$], the effective rotational const. [$(B' + C')/2 = 1696.70(22)\text{ MHz}$], the i -type doubling const. [$q_1 = -50.90(35)\text{ MHz}$], and the ^{35}Cl quadrupole coupling consts. [$eqQ'_{aa} = -6.5(4.1)\text{ MHz}$, $EqQ'_{bb} = eqQ'_{cc} = -74.4(2.2)\text{ MHz}$] in the excited perpendicular ($l = \pm 1$) bending state. Interpretation of these consts. indicated a strongly bent av. geometry ($\theta > 51^\circ$) for the excited state. These measurements supported the results obtained from empirical potential surfaces by J. M. Hutson (1984) and H. and B. J. Howard (1981).

C.A. 1986, 104, N 12

HClAr

1986

Wovick S.E.

J. Mol. Spectrosc.,

u. 12.

1986, 118, N2, 550 -
- 552.

(see.  HClBF₃; III)

АрМССР [от. 28370] 1987

Алехан А.Б., Венюкова Т.И. и др.

струк-
тура
колебат.
чистоты

Таблицы рекомендуемых
справочных данных.

Деполнерова. во ВНИИКИ
Госстандарт СССР 17.02.87г.
N 295.

Ar HCl

DM 27944

1987

✓ 6 Б1348. Перестраиваемая далекая инфракрасная лазерная спектроскопия в плоской сверхзвуковой струе. Деформационное Σ -колебание $\text{Ar}-\text{H}^{35}\text{Cl}$. Tunable far-infrared laser spectroscopy in a planar supersonic jet: the Σ bending vibration of $\text{Ar}-\text{H}^{35}\text{Cl}$. Busa row K. L., Blake G. A., Laughlin K. B., Cohen R. C., Lee Y. T., Saykally R. J. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 141, № 4, 289—291 (англ.)

М.П.

Используя разработанный авторами перестраиваемый лазерный спектрометр высокого разрешения для далекой ИК-обл. измерена вращат. структура самого нижнего по энергии перехода деф. кол. симметрии Σ , (02°O), комплекса ArH^{35}Cl в непрерывной плоской сверхзвуковой струе. Излучение перестраиваемого лазера (на HCOOH , $10-200 \text{ см}^{-1}$) с накачкой от непрерывного CO_2 -лазера смешивалось с перестраиваемым ($2-40 \text{ ГГц}$) микроволновым излучением; затем с помощью диплексера выделялось излучение с суммарной или разностной частотой. Значения молек. параметров B , D , H $\text{Ar}-\text{H}^{35}\text{Cl}$ (в МГц): состояние (00°O) — $1678,567$; $0,02022$; $-1,9 \cdot 10^{-7}$; состояние (02°O) — $1761,358$; $0,03188$ — $1,73 \cdot 10^{-6}$; $\nu_0 = 709224,68$. В. М. Ковба

Х. 1988, 19, № 6

Ar-HCl

от 27944

1987?

73 Л229. Перестраиваемая лазерная спектроскопия далекой ИК-области в плоской сверхзвуковой струе: Σ -деформационное колебание $\text{Ar}-\text{H}^{35}\text{Cl}$. Tunable far-infrared laser spectroscopy in a planar supersonic jet: The Σ bending vibration of $\text{Ar}-\text{H}^{35}\text{Cl}$. Busarow Kergu I., Blake Geoffrey A., Laughlin K. B., Cohen R. C., Lee Y. T., Saykally R. J. «Chem. Phys. Lett.», 141, № 4, 289—291 (англ.)

В условиях плоской, непрерывной молекулярной струи, охлажденной при сверхзвуковом расширении до $T < 10 \text{ K}$, в области $23,6 \text{ см}^{-1}$ изучен ИК-спектр поглощения комплекса $\text{Ar}-\text{H}^{35}\text{Cl}$. С использованием излучения длинноволн. лазера на HCOOH , перестраиваемого в области $50-1000 \text{ мкм}$, измерены положения колебательно-вращательных линий полосы $2\nu_2^0$, обусловленной Σ -деформационным колебанием комплекса. Представлены результаты колебательно-вращательного анализа: определено положение начала полосы и рассчитаны значения молекулярных постоянных комплекса в основном и возбужденном (02^0) колебательных состояниях. В. К.

М.А.

ф. 1988, 18, №3

Ar-HCl

[OM. 27944] 1987

108: 28741q Tunable far-infrared laser spectroscopy in a planar supersonic jet: the Σ bending vibration of argon-hydrogen chloride (Ar-H³⁵Cl). Busarow, Kerry L.; Blake, Geoffrey A.; Laughlin, K. B.; Cohen, R. C.; Lee, Y. T.; Saykally, R. J. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 141(4), 289-91 (Eng). The lowest Σ bending vibration (02°0) of Ar-H³⁵Cl was obsd. near 23.6 cm⁻¹ from P(23) to R(17), in a continuous planar jet expansion using a tunable far-IR laser. A least-squares anal. was performed to det. the centrifugal distortion consts. for the ground and excited states, which will greatly facilitate the detn. of an accurate intermol. potential surface.

гепорманс.
констан.

c. A. 1988, 108, NY

1987

ArMCl Ferantos Stavros C.,
Tennyson Jonathan.

Stochasticity and Intra-
mol. Redistribut. Energy;
u.n. Proc. NATA Adv. Res. Works-
hop, Orsay, June 23 - July 4,
1986. Dordrecht e.a., 1987,
15-30. (cu. KCN; iii)

Ar... HCl

1987

UK chemp

106: 204192f Study of molecular complex by high resolving power infrared spectroscopy. Oshima, Yasuhiro; Kuchitsu, Kozo (Fac. Sci., Tokyo Univ., Tokyo, Japan). *Kagaku (Kyoto)*. 1987, 42(3), 216-17 (Japan). A review with 9 refs. Descriptions are given on Ar...HCl and (HF)₂. K. Aoki

(H) (HF)₂
⊗

C.A. 1987, 106, N24

Ar. HCl

1987

108: 46117v Vibration-rotation spectroscopy of argon-hydrogen chloride by far-infrared laser and microwave/far-infrared laser double resonance spectroscopy. Robinson, Ruth L.; Ray, Douglas; Gwo, D. Hung; Saykally, Richard J. (Dep. Chem. Mater., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). NATO ASI Ser., Ser. C

1987, 212(Struct. Dyn. Weakly Bonded Mol. Complexes), 85-92 (Eng). Direct absorption by the low frequency van der Waals vibrations in ArHCl was obsd. using the technique of intracavity far IR ODR. Consts. are reported for the II bending state of ArH³⁷Cl. These consts. favor, though not conclusively, a potential surface with a double min.

UK лазер.
УВ спектры,
потенц. крив.,
М.П.

C.A. 1988, 108, N 6

Ar. HCl

DM-28326

1987

197: 245397r An extended study of the lowest Π bending vibration-rotation spectrum of argon-hydrogen chloride by intracavity far infrared laser/microwave double resonance spectroscopy. Robinson, Ruth L.; Ray, Douglas; Gwo, Dz Hung; Saykally, Richard J. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(9), 5149-55 (Eng). The lowest Π bending state in Ar-HCl was characterized through the use of far-IR laser/microwave ODR spectroscopy. This extended anal. includes a partial reassignment of the far-IR spectra of Ar-H³⁵Cl previously reported by D. R. et al. (1986) and by M. D. Marshall et al. (1985), as well as an anal. of the ArH³⁷Cl spectra. Improved mol. consts. were detd. The value of the rotational const. is in agreement with that calcd. by J. M. Hutson (1986) from the M5 double min. potential surface. Along with the recently reported spectrum of the Σ bending vibration, this extended anal. provides evidence for the existence of 2 min. character in the intermol. potential surface of Ar-HCl.

UK-46 chem
nomerul. no -
rep. x. x. x. x. x.

C. A. 1987, 107, N 26

Ar-HCl

(Om. 28325)

1987

(ν_3)

107: 245398s The high-resolution far infrared spectrum of a van der Waals stretching vibration: the ν_3 band of argon-hydrogen chloride. Robinson, Ruth L.; Gwo, Dz Hung; Saykally, Richard J. (Dep. Chem. Mater., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(9), 5156-60 (Eng). A high-resoln. measurement of a van der Waals stretching vibration is reported. The ν_3 fundamental stretching vibration in Ar-HCl was measured by intracavity far IR laser/microwave ODR spectroscopy of a supersonic free jet. Coupling between the stretching state and the nearby bending states gives the spectrum an intensity which is greater than predicted. The mol. consts. for the stretching state are in agreement with calcns. by J.M. Hutson (1986) for the M5 potential surface.

c. A. 1987, 107, N26

Ar · HCl

Om. 27453

1987

106: 223337y Evidence for a secondary minimum in the argon-hydrogen chloride potential surface from far infrared laser spectroscopy of the lowest Σ bending vibration. Robinson, Ruth L.; Gwo, Dz Hung; Ray, Douglas; Saykally, Richard J. (Dep. Chem. Mater., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(9), 5211-12 (Eng). The measurement is reported of the lowest (24 cm^{-1}) excited Σ bending vibration (the undertone) of the Ar-HCl van der Waals complex from IR laser spectroscopy. Anal. of the spectra in conjunction with the close coupling results of J. M. Hutson (1986) provides convincing evidence for a secondary min. in the Ar-HCl potential surface. The results also demonstrate the possibility of using far-IR laser spectroscopy to obtain accurate anisotropic intermol. potential functions.

номеру.
номеру.

C.A. 1987, 106, N 26

ArHCl

OM. 30496

1988

UK chemp,
M.A.

' 109: 118555g Tunable far infrared laser spectroscopy of van der Waals bonds: extended measurements on the lowest Σ bend of argon-hydrogen chloride. Busarow, Kerry L.; Blake, Geoffrey A.; Laughlin, K. B.; Cohen, R. C.; Lee, Y. T.; Saykally, R. J. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(3), 1268-76 (Eng). A tunable far-IR laser system was used to measure the vibration-rotation spectrum of the lowest Σ bending state of ArHCl near 24 cm^{-1} in a continuous-wave planar jet operating with a terminal jet temp. near 3 K. Over 60 transitions were obsd. for both ^{35}Cl and ^{37}Cl isotopes with resolu. of the quadrupole hyperfine structure. An improved set of mol. parameters was detd., including B , D , H , and eqQ for both upper and lower states. Narrow linewidths ($\sim 300\text{ kHz}$) resulting in high resolu. and sensitivity make this technique a powerful new method for the detailed investigation of intermol. forces.

C.A. 1988, 109, N14

Ar.... HCl OM. 31315 1988

110: 29287z The intermolecular potential of argon-hydrogen chloride: determination from high-resolution spectroscopy. Hutson, Jeremy M. (Dep. Chem., Univ. Durham; Durham, UK DH1 3LE). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(8), 4550-7 (Eng). Two new intermol. potentials for Ar-HCl were obtained by least-squares fitting to mol.-beam-microwave and far-IR-laser spectra of the Ar-HCl van der Waals complex. In agreement with previous potentials, the equil. geometry was found to be linear Ar-H-Cl, with a well depth around 175 cm⁻¹. The far-IR spectra allowed the potential in the region of the linear Ar-Cl-H geometry to be detd. as well a secondary min. was found at this geometry, with a depth around 140 cm⁻¹. The secondary min. arises because the Ar atom can approach closer to the Cl atom at the linear geometry than at a T-shaped geometry. The fitted potential was used to calc. addnl. bound states of the Ar-HCl van der Waals complex, which have not yet been obsd. spectroscopically.

nonexch.
p-HCl

C.A. 1989, 110, N4

ArHCl

DM 29362

1988

21 Б1322. Активные в ИК-спектре комбинационные полосы AgHCl . Infrared-active combination bands in AgHCl . Lovejoy Ch. M., Nesbitt D. J. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 146, № 6, 582—588 (англ.)

С применением перестраиваемого лазера изучены ИК-спектры охлажденных в сверхзвуковом пучке ван-дер-ваальсовых молекул AgHCl в обл. трех нижних составных частот, отвечающих однократному возбуждению вал. кол. фрагмента HCl . Показано, что полоса, отвечающая деф. кол. 11^{10} , сильно возмущена кориолисовым взаимодействием с полосами вал. кол. 10^{01} и деф. кол. 12^{00} . Однократное возбуждение фрагмента HCl практически не изменяет геометрич. параметров молекул AgHCl в соотв. возбужденных состояниях.

В. Б. Павлов-Веревкин

М.П.

Х. 1988, 19, N 21

Иссл. Ар

М.А.

Ф 1988, 18, N 10

29362
DM

1988
10 Л176. Активные в ИК-поглощении комбинационные полосы ArHCl . Infrared-active combination bands in ArHCl . Lovejoy Christopher M., Nesbitt David J. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 146, № 6, 582—588 (англ.)

С использованием лазерного спектрометра на различной частоте получены спектры ИК-поглощения димеров $\text{HCl} \cdot \text{Ar}$, образованных в импульсном пучке при вращательных T -рах 5—15 К. Использование многоходовой оптики и щелевого сопла обеспечило хорошее соотношение сигнал/шум. Зарегистрированы 3 комбинационных полосы димера, включающих основной переход молекулы HCl : 2 полосы $\Sigma \leftarrow \Sigma$ и одна $\Pi \leftarrow \Sigma$. Полностью разрешена Q -ветвь, начиная с линии $Q(1)$. Выполнен анализ частот вращательных линий комплексов $\text{H}^{35}\text{Cl} \cdot \text{Ar}$, для линий с числами J до ~ 20 . Определены вращательные и центробежные постоянные в различных колебательных состояниях димера. Отмечено сильное кориолисово взаимодействие изученных состояний и слабая зависимость вращательных постоянных димера от возбуждения колебаний HCl . Библ. 22. М. В. Т.

ArHCl

Om. 29362

1988

(UK, Pi)

109: 29314k Infrared-active combination bands in argon-hydrogen chloride (ArHCl). Lovejoy, Christopher M.; Nesbitt, David J. (Dep. Chem. Biochem., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309-0440 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 146(6), 522-8 (Eng). Ultra-sensitive IR absorption spectroscopy in a slit supersonic expansion is used to obtain the spectrum of each of the 3 low-frequency van der Waals vibrations in ArHCl in combination with the ν_1 HCl stretch. The (11 10) perpendicular bend is heavily perturbed by Coriolis interactions both with the nearby (10⁰1) van der Waals stretch and with the (12⁰0) parallel bend. The ArHCl complexes formed from ground-state HCl and from vibrationally excited HCl are quite similar, as evidenced by the nearly identical vibrational frequencies and rotational consts. for the 3 corresponding pairs of low-frequency vibrational modes.

C.A. 1988, 109, NY

ArHCl

1988

10 БГ163. Субдоплеровская инфракрасная спектроскопия в щелевых сверхзвуковых струях. Изучение всех трех вандерваальсовых мод в возбужденном состоянии ν_1 ArHCl. Sub-Doppler infrared spectroscopy in slit supersonic jets. A study of all Three van der Waals Modes in ν_1 -Excited ArHCl / Nesbitt D. J., Lovejoy C. M. // Faraday Discuss. Chem. Soc.— 1988.— № 86.— С. 13—21.— Англ.

Исследована колебат. динамика комплексов ArHCl, охлажденных (10 K) в импульсной сверхзвуковой струе. Измерялись непосредственно спектры поглощения излучения перестраиваемого ИК-лазера стабилизированной разностной частоты в диапазоне 2900—2920 см^{-1} (обл. фундаментальной полосы ν_1 ArHCl). В спектре наблюдались три колебат. полосы, сдвинутые относительно фундаментального перехода ν_1 на 23,6 см^{-1} ($12^\circ 0$) Σ (деф.); 32,6 см^{-1} ($10^\circ 1$) Σ



X. 1990, N 10.

(вандерваальсовы вал.); $34,1 \text{ см}^{-1}$ ($11^1 0$) Π (деф.). Результаты хорошо согласуются с данными теорет. расчетов (соотв. 24,9; 33,5; $35,1 \text{ см}^{-1}$, // Mol. Phys.,— 1982.— 45.— С. 769). Проанализированы вращат. структура указанных полос и рассчитаны (с учетом и без учета кориолисовых взаимодействий) вращат. постоянные B , D , H , L , P в верхних колебат. состояниях. Батохромически сдвинутая полоса ($12^0 0$) Σ свидетельствует о наличии втор. минимума на потенциальной Пв соотв. конфигурации AgClH . Неожиданно высокая интенсивность полосы ($10^0 1$) Σ говорит о сильном взаимодействии валентной и деформационных вандерваальсовых мод в комплексе.

В. М. Ковба

As HCl

DM-29695

1988

109: 13867g Far infrared laser Stark spectroscopy of the Σ bending vibration of argon-hydrogen chloride (ArHCl): strong evidence for a double minimum potential surface. Robinson, Ruth L.; Gwo, Dz Hung; Saykally, Richard J. (Dep. Chem., Lawrence Berkeley, Berkeley, CA 94720 USA). *Mol. Phys.* 1988, 63(6), 1021-9 (Eng). A complete anal. of the far-IR laser Stark/microwave ODR spectrum of the Σ bending vibration of ArHCl is given. Hyperfine-resolved spectra of the $R(0)$, $R(1)$, $R(2)$, and $P(1)$ transitions were measured near 25 cm^{-1} for both Cl isotopes. Accurate values for the band origins, rotational consts., dipole moments, and quadrupole hyperfine consts. were obtained. Comparison with J.M. Hutson's (1986) close-coupling calcs. provide strong support for the existence of a secondary min. in the intermol. potential surface at the linear ArClH geometry.

UK, Y8,
Graessam.
noem; empyd.

C. A. 1988, 109, N2.

ArHCl

Om 29695

1988

24 Б1406. Штарковская лазерная спектроскопия в далекой инфракрасной области Σ изгибных колебаний AgHCl . Строгое доказательство для потенциальной поверхности с двумя минимумами. Far infrared laser Stark spectroscopy of the Σ bending vibration of AgHCl . Strong evidence for a double minimum potential surface. Robinson R. L., Gwo D.-H., Saykally R. J. «Mol. Phys.», 1988, 63, № 6, 1021—1029 (англ.)

Методом внутривибронного ДИК-микроволнового двойного резонанса измерена СТС колебательно-вращат. переходов в обл. Σ изгибного колебания для двух изотопич. образцов комплекса, AgH^{35}Cl (I) и AgH^{37}Cl (II). Комплекс генерировался в сверхзвуковой струе в смеси Ag и HCl . Для I и II, соотв., идентифицировано 41 и 29 штарковских сверхтонких переходов. Для наименьшего возбужденного Σ изгибного состояния I и II, соотв., определены частоты полос $\nu=709,21996$ (26) и $707,8469$ (23) ГГц, вращат. постоянные $B=1761,204$ (53) и $1711,46$ (53) МГц, дипольные моменты и по-

М.А.

Х. 1988, № 24

стоянные квадрупольного взаимодействия. Анализ эксперим. данных и неэмпирич. расчет указывают на возможность существования второго минимума для потенциальной Пв при линейной конфигурации AgClH .

С. Н. Мурзин



AgHCl

1989

/ 15 Б1123. Слабосвязанные молекулы раскрывают свои секреты. Loose molecules reveal their secrets / Baggett J. // New Sci.— 1989.— № 1689.— С. 34.— Англ.

Краткое описание результатов лаборатории Лоуренса Беркли в Калифорнийском университете по эксперим. изучению слабосвязанных вандерваальсовых комплексов. Основное внимание уделено методу возбуждения молекулы AgHCl излучением CO_2 -лазера, с одновременным использованием эффекта Штарка. Отмечено, что на потенциальной ПВ молекулы AgHCl есть две долины с минимумами, отвечающие линейным структурам AgHCl и AgClH.

В. В. Павлов-Веревкин

Х. 1990, № 15

Ar. MCL

1989

Clary David C.,
Nesbitt David F.

(Vi, UK) J. Chem. Phys. 1989,
90(12), 7000-13.

Ar-HCl

OM 34324

1990

1 Д81. Определение связанных и несвязанных состояний ван-дер-ваальсова комплекса Ar—HCl. Метод представления с помощью дискретной переменной. Determination of the bound and quasibound states of Ar—HCl van der Waals complex. Discrete variable representation method / Choi Seung E., Light J. C. // J. Chem. Phys.— 1990.— 92, № 4.— С. 2129—2145.— Англ.

Расчет вращательных состояний ван-дер-ваальсовой молекулы Ar—HCl в основном колебат. состоянии выполнен с помощью записи колебательно-вращательного гамильтониана в представлении дискретной переменной. Рассчитано большое число связанных и вращательно преддиссоциирующих состояний в интервале вращательных квантовых чисел $0 \leq J \leq 60$. Для расчета использована модельная поверхность потенц. энергии. Предложен метод оценки времени жизни резонансных состояний с использованием интегрируемых с квадратом волн. функций.

Е. А. Ж.

М.П.

Ф. 1991, № 1

А.Н.С.

1990

Д6 Д102. Предсказания спектров ван-дер-ваальсовых молекул. Predictions of spectra for Van der Waals molecules / Clary D. C., Chakravarty Ch., Tiller A. R. // Dyn. Poyatom. Van der Waals Complexes: Proc. NATO Adv. Res. Workshop, Castara-Verduzan, Aug. 21—26, 1989.— New York; London, 1990.— С. 355—369.— Англ. Место хранения ГПНТБ

С использованием поверхностей потенц. энергий, полученных в приближении связанных электронных пар, проведены неэмпирич. расчеты спектров возбуждения ван-дер-ваальсовых колебательно-вращательных мод в молекулах ArHCl, ArHCN, H₂DF, ArOH и NeC₂H₄. Продемонстрировано, что предложенный метод позволяет получить адекватные результаты для спектров ван-дер-ваальсовых молекул, более сложных, чем комплексы атома с двухатомным фрагментом с замкнутой оболочкой.

М.П.

(74)



ф. 1992, № 6

Ar-HCl

1990

115: 17757t Rare gas-hydrogen chloride complexes: far-infrared observations of argon-hydrogen chloride and xenon-hydrogen chloride (Ar-HCl and Xe-HCl), and calculations of excited states for xenon-hydrogen chloride (Xe-HCl). McKellar, A. R. W.; Johns, J. W. C.; Hutson, J. M. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). NATO ASI Ser., Ser. B. 1990, 227(Dyn. Polyat. Van der Waals Complexes), 449-60 (Eng). Preliminary results are presented of a new far IR study of Ar-HCl and Xe-HCl made under equil. conditions, as well as new energy level calcs. for Xe-HCl to aid in the interpretation of these and future spectra. The expts. represent an extension of the work of E. M. Boom and J. van der Elsken to lower pressure, higher resolu., and higher sensitivity. Although the resolu. is still not high enough for detailed analyses to be made, the results are of interest because: (1) for Ar-HCl, present knowledge is sufficiently complete that one can begin to envisage a complete rotation-vibration calcn. to simulate the results, and (2) for Xe-HCl, there have been very few expts., so any addnl. data is valuable. Tb spectra may be useful as a guide to the appropriate wavelength regions for future studies involving FIR laser/supersonic jet techniques, which have high sensitivity and resolu. but are not ideal for spectral searching.

UK спектры;
водородные
состояния

⊗(4)

C.A. 1991, 115, N 2

Xe-HCl

ArHCl

Om 36076

1991

114: 254291y Ab initio study of intermolecular potential for argon-hydrogen chloride (ArHCl). Chalasinski, G.; Szczesniak, M. M.; Kukawska-Tarnawska, B. (Dep. Chem. Biochem., South. Illinois Univ., Carbondale, IL 62901 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(10), 6677-85 (Eng). The combination of supermol. Moeller-Plesset treatment with the perturbation theory of intermol. forces is applied in the anal. of the potential energy surface of ArHCl. Two min. have been found, a primary for collinear Ar-HCl and a secondary for collinear Ar-ClH. The depths of these min. are about 12% below the empirical ests., due to basis sets unsatn. of the dispersion contribution. The Ar-HCl structure is favored by the induction and dispersion terms whereas Ar-ClH by the exchange-repulsion term. The total ab initio potential, as well as its components, are compared with related terms of recent Hutson's H6(5) potential (1988) and the anisotropy of interaction is analyzed. It is concluded that the one-center multipole expansions of induction and dispersion contributions do not reproduce the correct anisotropy of induction and dispersion terms. Ab initio ests. of three-body effects in the Ar₂HCl complex are also discussed.

см. примечание,
параметры

c: A. 1991, 114, N 26

АрНс

От 36076 1991

→ 23 Б1160. Неэмпирическое исследование межмолекулярного потенциала ArHCl . Ab initio study of intermolecular potential for ArHCl / Chalasiński G., Szczepniak M. M., Kukawska-Tarnawska B. // J. Chem. Phys. — 1991. — 94, № 10. — С. 6677—6685. — Англ.

А Путем расчета в общем для супермолекулы базисе слагаемых энергии межмолек. вз-вия в соответствии с теорией возмущений Мёллера—Плессета (до 2-го порядка) исследована структура комплекса ArHCl . Глобальному минимуму соответствует линейная конфигурация Ar—H—Cl (расстояние до центра масс HCl 3,8354 Å, энергия диссоциации 152 см^{-1}), побочному — также линейная Ar—Cl—H (4,1746 Å и 123 см^{-1} , соотв.). Подробно анализируется величина вкладов разного порядка в энергию межмолек. вз-вия при изменении угла Ar—H—Cl . Проведено сравнение с аналогичными слагаемыми эмпирич. ПТ Хатсона (см. Hutson J. M. // J. Chem. Phys. — 1988. — 89. — С. 4550). В. А. Болотин

М.П.

Х. 1991, № 23

Ar-HCl

1991

— 24 Б1349. Вращательные спектры Σ изгибных состояний Ar—H/DCI и Σ валентных Ar—HCl. Rotational spectra of the Σ bend states of Ar—H/DCI and the Σ stretch of Ar—HCl / Chuang C., Gutowsky H. S. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 1.— С. 86—91.— Англ.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в области частот 3,1—17,6 ГГц с точностью около 3 кГц измерены вращат. спектры четырех изотопич. образцов вандерваальсовского комплекса, Ar—H³⁵Cl (I), Ar—H³⁷Cl (II), Ar—D³⁵Cl (III) и Ar—D³⁷Cl (IV), в Σ изгибном и Σ валентном колебат. состояниях. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели линейного волчка с учетом квартичного, секстичного и октичного центробежного искажения и Cl-ядерного квадрупольного вз-вия. Полученные прецизионные данные для I и II согласуются с ДИК-данными и для III и IV с результатами неэмпирич. расчета. Отриц. величина квартичной постоянной центробежного искажения и заметный вклад октичного и секстичного членов подтверждают сильное кориолисово вз-вие с II изгибным состоянием.

С. Н. Мурзин

М.Н.

X. 1991, № 24

Ar₂ HCl

1991

№ 16 Б1230. Исследование трехчастичных эффектов в межмолекулярных силах. II. Колебательно-вращательная—туннельная лазерная спектроскопия Ar₂HCl в далекой инфракрасной области. An investigation of three-body effects in intermolecular forces. II. Far-infrared vibration—rotation—tunneling laser spectroscopy of Ar₂HCl / Elrod M. J., Steyert D. W., Saykally R. J. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 5.— С. 3182—3186.— Англ.

М.Н.

В далекой ИК-области исследована вращательно-туннельная структура второй полосы (центр при 37,2 см⁻¹, переход *b*-типа) межмолек. колебания вандерваальсова комплекса Ar₂HCl. Для обоих изотопомеров (по хлору) удалось разрешить ядерную СТС. Рассчитаны и приводятся значения вращат. постоянных, параметров центробежного искажения, констант ядерного квадрупольного вз-вия Ar₂H³⁵Cl и Ar₂H³⁷Cl в основном и возбужденных колебат. состояниях. Полученные данные свидетельствуют о наличии вз-вия между вал. кол. Ar—Ar (или деформ. координатой) и колебат. координатой Ar₂—HCl. В результате этого возникает особенность колебат. движения в возбужденном колебат. со-

X. 1992, N 16

стоянии $\text{Ag}_2\text{H}^{35}\text{Cl}$ в виде перестройки осей вращения X и Y. В $\text{Ag}_2\text{H}^{37}\text{Cl}$ такой переход не обнаружен. Измеренные проекции СТС показывают также возможность вз-вия между валентной и деформац. межмолек. модами $\text{Ag}_2\text{—HCl}$, что затрудняет абс. колебат. нумерацию переходов. Сделан вывод, что «обратимое адиабатич.» приближение, использованное ранее при теор. исследовании Ag_2HCl (J. Chem. Phys.— 1989.— 90.— С. 1337) не пригодно для усложненной динамики внутримолек. движения в системах, подобных исследуемой. Сообщ. I см. J. Chem. Phys.— 1991.— 94.— С. 58.— Библ. 32.

В. М. Ковба.



Ar-HCl

Om 35799

1991

115: 59355d Coriolis coupling in argon-hydrogen chloride (Ar-HCl). Reeve, S. W.; Dvorak, M. A.; Firth, D. W.; Leopold, K. R. (Dep. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, MN 55455 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1991, 181(2-3), 259-66 (Eng). The Π bending state of Ar-HCl was examined by tunable far-IR spectroscopy and the J dependence of the Coriolis coupling to the Σ bending and stretching vibrations analyzed. The Coriolis coupling constants obtained are only slightly smaller than those previously observed in the complex containing a quantum of Π vibrational excitation (3.2% for the Π - Σ bend coupling and 1.1% for the Π - Σ stretch coupling). Deperturbed rotational constants determined for the Σ bending state of the ^{35}Cl and ^{37}Cl species cannot be used in conjunction with simple moment of inertia expressions to support the predicted antihydrogen bonded geometry for that state. Comparisons between the ground states and the Π states of the series Ar-HX (X = F, Cl, Br) are discussed.

HK checkup,

M.H.

C.A. 1991, 115, N 6

Ar-DCl

1991

16 Б1233. Диодная лазерная спектроскопия в непрерывной сверхзвуковой струе и динамика Ar—DCl. Колебательно-вращательный анализ полос ν_1 и $\nu_1 + \nu_2^1$ и эффект кориолисова взаимодействия в спектре полосы $\nu_1 + 2\nu_2^0$. Continuous-wave supersonic jet diode laser spectroscopy and dynamics of Ar—DCl: Rovibrational analysis of ν_1 and $\nu_1 + \nu_2^1$ and the effect of Coriolis coupling in the spectrum of $\nu_1 + 2\nu_2^0$ / Wang Zhongcheng, Quiñones A., Lucchese R. R., Bevan J. W. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 5.— С. 3175—3181.— Англ.

М.П.

С высоким разрешением и точностью, методом диодной лазерной спектроскопии исследована вращат. структура фундаментальной полосы ν_1 и комбинац. полос $\nu_1 + \nu_2^1$ и $\nu_1 + 2\nu_2^0$ вандерваальсовых комплексов Ar—D³⁵Cl и Ar—D³⁷Cl в непрерывной сверхзвуковой струе. Из анализа первых двух полос получены след. значения

X. 1992, N 16

(в см^{-1}) B_v , D_v и энергии колебат. уровней (данные для комплекса $\text{Ag}-\text{D}^{35}\text{Cl}$, приводятся также параметры и для второго изотопомера): состояние $00^0 0$ — $5,5256 \cdot 10^{-2}$; $5,63 \cdot 10^{-7}$; состояние $10^0 0$ — $5,4850 \cdot 10^{-2}$; $5,53 \cdot 10^{-7}$, $\nu_0 = 2089,41832$; состояние $11^1 0$ — $5,7435 \cdot 10^{-2}$; $4,04 \cdot 10^{-7}$, $\nu_0 = 2117,44530$; $q_v = 33,1$ МГц; состояние $11^{1/2} 0$ — $5,6332 \cdot 10^{-2}$; $7,34 \cdot 10^{-7}$; $\nu_0 = 2117,44476$. Эксперим. результаты сопоставляются с данными вариационных расчетов, выполненных с использованием $\text{H6}(3)$ потенциала Хатсона. Вычислены и приводятся значения ν_0 и B для состояний 000 , $01^1 0$, $01^{1/2} 0$, $02^0 0$, $12^0 0$. По результатам расчетов, на основании предсказаний аномальной интенсивности дано возможное отнесение комбинац. полосы $\nu_1 + 2\nu_2^0$. Расчеты показывают, что R-ветвь полосы много интенсивнее, чем P-ветвь за счет сильного кориолисова вз-вия между состояниями $\nu_1 + 2\nu_2^0$ и $\nu_1 + \nu_2^1$. В. М. Ковба

Ar-HCl

1992

22 Б1051. Колебательная зависимость анизотропного межмолекулярного потенциала Ar—HCl. Vibrational dependence of the anisotropic intermolecular potential of Ar—HCl /Hutson Jeremy M. //J. Phys. Chem. .—1992 .—96 ,№ 11 .—С. 4237—4247 .—Англ.

Предложена новая аппроксимация анизотропной эмпирич. поверхности потенциальной энергии (ППЭ) системы Ar—HCl. ППЭ представлена в виде разл. по полиномам Лежандра от косинуса угла деформации как сумма ПТ отталкивания, индукц. и дисперсионного членов и содержит явную зависимость от приведенного квантового числа фрагмента HCl. Для параметризации дальнедействующей части ППЭ использованы данные неэмпирич. расчетов. Подобранные параметры ППЭ обеспечивают наилучшее воспроизведение энергий колебательно-вращат. уровней комплекса Ar—HCl, полученных из спектров высокого разрешения в микроволновом, дальнем ИК- и ИК-диапазонах. Точность ПТ проверена также в расчетах скоростей вращат. преддиссоциации. Библ. 85.

А. А. Бучаченко

М.П.

Х. 1992, N 22-24

ArHCl

1993

119: 258661v Dipole moment analysis of excited van der Waals vibrational states of argon-hydrogen chloride (ArH^{35}Cl). Cooksy, A. L.; Elrod, M. J.; Saykally, R. J.; Klemperer, W. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(5), 3200-4 (Eng). The far-IR laser elec. resonance spectra of the prototypical atom-diatom complex ArH^{35}Cl are analyzed by using improved zero-field mol. consts., yielding accurate permanent and transition dipole moments for the 3 lowest excited van der Waals vibrational states. The consts. are obtained from a multistate fit to previous microwave, far-IR laser elec. resonance, and far-IR tunable laser spectra, as well as new far-IR measurements of the Σ -stretch state, which are reported in this article. The signs of the dipole moments and Coriolis coeffs. establish the relative orientations of the HCl subunit in these states. The fit converges only if these signs correspond to the HCl pointing in opposite directions along the inertial a-axis in the Σ -stretch and Σ -bend states. A weak preference, near the exptl. error limit, for the Ar-Cl-H av. angle in the Π -bend state is $>90^\circ$, contrary to expectation. For the best fit, the authors obtain the a-axis dipole moment components $-0.5413(11)$ D (Σ bend), $-0.263\ 45(29)$ D (Π and Σ -bend) and $-0.0465(43)$ D (Π and Σ stretches), where the signs of the Coriolis coeffs. and μ_a for the Σ stretch have been arbitrarily fixed pos. For the expected Π -bend configuration, with the Ar-Cl-H angle $<90^\circ$, the magnitudes along the a-axis change only slightly, but the b-axis components become

large for
(UK crank)

C.A. 1993, 119, N24

0.149(12) and -0.1403(64) D for the Π - Σ -bend and Π - Σ -stretch
interactions, resp.

Ar - HCl

1994

Auerhet, Marie-Lise,
Hutson, Jeremy M.,

(y8 cncmp) J. Phys. Chem. 1994, 98
(23), 5844-54.

(all. Cl-HCl;  III)

Ar · HCl

1994

номер и
выпуск

121: 66083c Quantum chemical investigation of the Ar-HCl interaction potential. Steepness and asymmetry with implications for energy transfer. Simonson, Margaret; Sewell, Thomas D.; Nordholm, Sture; Miklavc, Adolf (Department of Physical Chemistry, University of Goeteborg and Chalmers University of Technology, S-41296 Goteborg, Swed.). *Chem. Phys.* 1994, 184(1-3), 67-83 (Eng). SCF ab initio calcns. using a previously published, optimized basis set (G. Chalasinski et al., 1991) and second-order Moeller-Plesset (MP2) perturbation theory are used in a study of the Ar-HCl intermol. potential. The ab initio results are compared to the recently published H6(4, 3, 0) potential-energy surface (J. M. Hutson, 1992). Good agreement is obtained for most features considered. Minor differences are, however, apparent on the repulsive wall of the potential; possible implications for the dynamics of vibrational energy transfer are discussed.

C. A. 1994, 121, N 6

Ar-HCl

1995

123: 123704y On the role of bond functions in interaction energy calculations: $\text{Ar} \cdots \text{HCl}$, $\text{Ar} \cdots \text{H}_2\text{O}$, $(\text{HF})_2$. Burcl, Rudolf; Chalasinski, Grzegorz; Bukowski, Robert; Szczesniak, Malgorzata M. (Chem. Dep., Oakland Univ., Rochester, MI 48309-4401 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(4), 1498-507 (Eng). The authors analyze the effect of an extended set of bond functions on the SCF and MP2 interaction energies, and their SAPT perturbation components; electrostatic, induction, dispersion, and exchange. The electrostatic, induction, and exchange terms at the SCF level prove to be largely independent. The dispersion energy is substantially improved and the improvement do not depend much on the bond-function location. In contrast, the electrostatic-correlation term is usually seriously distorted and the distortion strongly dependent on the bond-function location. The distortion may be significantly reduced by appropriate shifting of the location; only then the interaction energies obtained with bond functions may be considered reliable. It is strongly recommended to control the electrostatic-correlation term. The authors present accurate results (within 5% error bar) for the Ar-HCl , $\text{Ar-H}_2\text{O}$, and $(\text{HF})_2$ complexes.

Хемікл
цре,
меоп. пакет

(42) ☒

C.A. 1995, 123, N10

Ar-H₂O
(HF)₂

Ar - HCl

1995

Hartz C.D., Wofford B.A. et al.,

ber. Bunsen - Ges. phys. Chem. -

М.п. 1995, 99, №3, 447-457.

Последние достижения в области
количественно-качественной лазерной
инфракрасной Фурье-спектро-
скопии сверхвысоких частот

пропущенных неустойчивых мо-
лекул, слабосвязанных димеров
и тримеров.

1995

F: ArHCl+

P: 3

7B125. Электронная структура слабо связанных систем. II. Бимолекулярные катионы $\text{NeX}\{+\}$ и $\text{ArX}\{+\}$ ($\text{X}=\text{H}_2\text{O}$, HCl и HF). The electronic structure of weakly bound systems. II. $\text{NeX}\{+\}$ and $\text{ArX}\{+\}$ ($\text{X}=\text{H}_2\text{O}$, HCl , and HF) bimolecular cations / Lopez Gustavo E. // J. Comput. Chem. - 1995. - 16, N 6. - С. 768-776. - Англ.

Неэмпирически (с использованием неограниченного метода ХФ, МП2, МП4, квадратичного метода КВ) исследован указанный в заглавии ряд бимолекулярных катионов, состоящих из атома инертного газа и молекулярного катиона. Во всех случаях минимумам на поверхностях потенциальных энергий отвечают Н-связанные изомеры. Энергии связывания систем изменяются в интервале 0,1-1,0 эВ.

РХХ 1997

$(ArHCl)^+$

1995

Lopez G. E.

сверхкрит.,
гиперкрит.
связи, VI,
теор.
расчет

J. Comput. Chem.,
1995, 16(6), 768-76.

●
(суп. $(NeHF)^+$; III)

ArHX⁺

X = Cl, Br, I

структура,
стабильность

124: 127456n Predicted structure, spectra and stability of ArHX⁺, KrHX⁺ and XeHX⁺ (X = Cl, Br or I). Lundell, Jan; Raesaenen, Markku; Kunttu, Henrik (Department of Chemistry, Physical Chemistry Laboratory, P.O. Box 55, University of Helsinki, FIN-00014 Helsinki, Finland). *THEOCHEM* 1995, 358, 159-65 (Eng). Results of effective core potential, ab initio calcns. on the ground state mol. properties of ArHX⁺, KrHX⁺ and XeHX⁺ (X = Cl, Br or I) are presented. Calcns. at the MP2, coupled cluster with double excitations and coupled cluster with single, double and triple excitations levels predict both linear and bent structures for these species. The obtained structures and their relative energies are well rationalized in terms of ionization energies of the individual atoms. The linear forms of XeHCl⁺ and XeHBr⁺ ions show strong, shared "hydrogen bond"-type bonding with a drastically reduced frequency of the hydrogen motion between the heavy atoms. These ions are predicted to be stable and exptl. accessible under the conditions of low temp., matrix isolation expts.

1995

(+2) ⊗

KrHX⁺
Xe ● HX⁺

X = Cl, Br, I

C.A. 1996, 124, N10

Ar HCl

1995

Mele Franca, Mineva
Tzonka, et al.

теор.
расчет
структур.

Theor. Chim. Acta 1995,
91 (3/4), 169-77.

и
сводили.

● (сес. (MF)₂; III)

$Ar_2 HCl$

1995

Mel Franca, Mineva
Tzorka, et al.

теор.
расчет
структ.
и
свойств.

Theor. Chim. Acta

1995, 91 (3/4), 169-

177.

(cell. $(MF)_2$; III)

Ar-HCl

1996

23 Б1177. Улучшенный метод определения колебательно-вращательных собственных состояний вандерваальсовых молекул. Enhanced method for determining rovibrational eigenstates of van der Waals molecules / Korambath Prakashan P., Wu Xudong T., Hayes Edward F. // J. Phys. Chem. — 1996 .— 100 , № 15 .— С. 6116—6124 .— Англ. . Место хранения ГПНТБ

Спектр

Представлен улучшенный расчетный алгоритм определения колебательно-вращательных собственных состояний ван-дер-ваальсовых молекул. Определен спектр собственных состояний ван-дер-ваальсова комплекса Ar-HCl и улучшенный потенциал взаимодействия для состояния $A^2\Sigma^+$ комплекса Ar-HQ. С. Н. Мурзин

(7) 

X. 1996, N 23

Ar. HCl

1996

/ 126: 298883v Vibrational spectrum of the Van der Waals molecule Ar-HCl. Xie, Junkai (Department of Chemistry, Sichuan Normal University, Chengdu, Peop. Rep. China 610066). *Sichuan Shifan Daxue Xuebao, Ziran Kexueban* 1996, 19(6), 71-74 (Ch), Sichuan Shifan Daxue. In this paper, we report the calcd. results of the Van der Waals vibrational energy levels for Ar-HCl and its isotopic mols. Ar-H³⁷Cl, Ar-DCI and Ar-D³⁷Cl. The potential energy surface of the Van der Waals complex Ar-HCl has been detd. by fitting the obsd. Van der Waals vibrational levels. By means of the discreet variable representation DVR method and DVR3D procedure of Tennyson, the potential energy surface gives good agreement with exptl. data for the vibrational frequency shifts for the isotopic mols. Ar-H³⁷Cl, Ar-DCI and Ar-D³⁷Cl relative to main isotope species Ar-HCl system.

(Kunkai Xie)

@ A. 1997, 126, N22

Ar_n HCl

$n=1,2,3$

UK record
paper.

1997

127: 211798v Sequential solvation of HCl in argon: high resolution infrared spectroscopy of Ar_nHCl ($n=1,2,3$). Anderson, David T.; Davis, Scott; Nesbitt, David J. (JILA, University of Colorado and National Institute of Standards and Technology, University of Colorado Boulder, CO 80309-0440 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(4), 1115-1127 (Eng), American Institute of Physics. High-resoln. near-IR spectra of the $\nu_{\text{HCl}}=1-0$ fundamental stretch in Ar₂HCl and Ar₃HCl have been characterized using a slit-jet IR spectrometer. Anal. of the jet-cooled, rotationally resolved spectra (i) permits unambiguous identification of the cluster size, (ii) provides vibrationally averaged geometries in the $\nu_{\text{HCl}}=1$ excited state, and (iii) allows the vibrational shift of the HCl chromophore to be measured as a function of the no. of Ar atoms in the complex. The equil. structures of Ar_nHCl ($n=1-3$) clusters calcd. using accurate Ar-Ar and Ar-HCl pair potentials are consistent with the vibrationally averaged structures inferred spectroscopically. The vibrational red-shifts for Ar_nHCl ($n=1-3$) reflect a near-linear dependence on the no. of Ar atoms, which is qual. reproduced by simple classical calcns. on $\nu_{\text{HCl}}=0$ and 1 pairwise additive potential surfaces. Theor. predictions of the Ar_nHCl red-shifts in a fcc lattice indicate good

C.A. 1997, 127, N 15

agreement with exptl. matrix results. However, to achieve this asymptotic limit requires up to $n \approx 54$ Ar atoms; this underscores a clear sensitivity to non-nearest neighbor Ar-HCl interactions significantly outside the first solvation shell. Finally, for smaller Ar_nHCl clusters with only one solvation shell ($n = 12$), the potentials predict an energetic preference for HCl in surface vs. interior sites. Anal. indicates that this effect is predominantly due to Ar/HCl size mismatch, which destabilizes the nearest neighbor Ar shell for HCl solvated in the center of the cluster.



Ar ... HCl

1998

chemp,

sp. aram.

M.A.

129: 181473g Rotational spectrum and spectroscopic constants of $^{36}\text{Ar}\dots\text{H}^{35}\text{Cl}$ and $^{40}\text{Ar}\dots\text{HCl}$. Kisiel, Z.; Pszczolkowski, L. (Al. Lotnikow 32/46, Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, 02-668 Warsaw, Pol.). *Chem. Phys. Lett.* 1998, 291(1,2), 190-196 (Eng), Elsevier Science B.V.. The rotational spectrum of the $^{36}\text{Ar}\dots\text{H}^{35}\text{Cl}$ isotopomer of the van der Waals dimer between an Ar atom and a HCl mol. was obsd. in natural abundance with a mol. beam, cavity Fourier transform microwave spectrometer. The derived spectroscopic consts. are compared with those redetd. for $^{40}\text{Ar}\dots\text{H}^{35}\text{Cl}$ and $^{40}\text{Ar}\dots\text{H}^{37}\text{Cl}$, which were obtained from new measurements of all rotational transitions <19 GHz and a new data anal. inclusive of Cl spin-rotation and H-Cl spin-spin effects.

CA 1998, 129, J14

Ar-HCl

1998

Woon, D.E. et al.,

Женуе
свесе,
снрехм.,
расем

J. Chem. Phys. 1998, 109(6),
2233-41

(all. Ar-H₂; ● III)

F: Ar-HCl

P: 3

131:250281 Photodissociation of Ar-HCl: An energy-resolved study of the dynamics of total fragmentation into H+Ar+Cl. Juanes-Marcos, J. C.; Garci Vela, A. C.S.I.C., Instituto de Matematicas y Fisica Fundamental Madrid 28006, Spain J. Chem. Phys., 111(6), 2606-2619 (English) UV photolysis of Ar-HCl is simulated by means of an exact wave packet treatment in three dimensions. The focus of the work is on the mechanism indirect dissocn. of the hydrogen atom, which leads to total fragmentatio Ar-HCl into H, Ar, and Cl. The results predict for this photodissockn. pa probability of about 13 % of the photolysis process. The remaining proba would be assocd. with direct photodissockn. of the H fragment. Kinetic-en distributions of the hydrogen fragments produced by

1999

indirect photodissocn calcd. for different excitation energies of Ar-HCl. The distributions re pronounced structure of peaks assocd. with broad and overlapping resonanc the system. The resonance structure is present in the whole energy range covered by the absorption spectrum. Hydrogen atoms initially populating resonances can dissoc. from the cluster extensively cooled down, after se collisions with Ar and Cl. A mechanism is suggested for the fragmentatio process due to indirect photodissocn., which involves successive jumps of hydrogen to lower-energy resonances, induced by the collisions. A classi collisional model is proposed to rationalize qual. the fragmentation dyna

ArHCl⁺

1999

KOMAM;
COCM.
OCH. JA. COCM.

130: 187412d Investigation of vibrational states of the ArHCl⁺ cation in the electronic ground state. Zuhrt, Ch.; Neumann, R.; Zulicke, L. (Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Potsdam, D-14469 Potsdam, Germany). *Chem. Phys.* 1999, 240(1-2), 117-128 (Eng), Elsevier Science B.V.. The potential energy surface (PES) of the electronic ground state of the ArHCl⁺ mol. ion is calcd. by the multireference single- and double-excitation CI (MRD-CI) technique. An anal. representation of the potential energy data is obtained as a power series. The vibrational eigenvalue problem is treated with high accuracy from the variational method using a direct product basis contracted in 2 steps (truncation/recoupling method). Unexpectedly for such a weakly bound system the spectrum turns out to be of a rather regular nature up to the 1st dissocn. energy, allowing for an assignment of quantum nos. to a major part of the vibrational states. Also, the wave functions are analyzed together with several geometrical and energetic characteristics of the various vibrational states.

C.A. 1999, 130, N14

2000

F: Arn(ClHCl)

P: 3

132:157069 Transition State Dynamics of Arn(ClHCl)
(n = 0-5): Effects of Complex Formation on the Dynamics
and Spectroscopy. Lavender, Holly B.; M Anne B.

Department of Chemistry, The Ohio State
University Columbus, OH 43210, USA J. Phys.
Chem. A, 104(3), 644-651 (English) 2000 The effects
of intermol. interactions on the transition state
dynamics o the Cl + HCl reaction are investigated
through time-dependent quantum simulations of the
evolution of the ground state wave function for Arn(Cl

C.A. 2000, 132

on the $\text{Ar}_n(\text{ClHCl})$ potential when $n = 0-5$. A reduced dimensional approach been employed in which the quantum/semiclassical time-dependent SCF (Q/SC approxn. is used to propagate the dynamics of the hydrogen and chlorine a resp., while the argon atoms are constrained to remain in the equil. configuration in $\text{Ar}_n(\text{ClHCl-})$. Anal. of the wave functions, obtained from simulations, shows that as more argon atoms are introduced there is a cha the short time dynamics. When no argon atoms are present, the hydrogen a rotates off of the Cl-Cl axis. As the no. of argon atoms is increased, t motion becomes blocked, and when four or five argon atoms are present, th Cl subsystem is constrained to dissociate collinearly. This change in the d of the hydrogen atom is reflected in an increase in the amt. of energy th transferred to the chlorine atoms as n is increased. It also results in changes in the calcd. photoelectron spectra of $\text{Ar}_n(\text{ClHCl-})$.

2000

Ar-HCl Wei, Ji-Chong et al.,

Ar-ClH Wujia Huaxue Xuebao
2000, 16(5), 788-792.

термод.,
квант.,
хим. анализ
и изомери-
зации

Thermodynamic and
quantum chemical
analysis of isomeri-
zation of van der

Waals complexes Rg-Hal,
Rg-AlH (Rg = Ne, Ar)

ArHCl⁺

2230

134: 33185c Intramolecular dynamics of cationic van der Waals complexes: case study of ArHCl⁺. Zulicke, L.; Neumann, R.; Zuhrt, Ch.; Schretter, J. (Universitat Potsdam, Institut fur Physikalische und Theoretische Chemie, D-14476 Golm, Germany). *Int. J. Quantum Chem.* 2000, 80(3), 486-498 (Eng), John Wiley & Sons, Inc. The structure and internal dynamics of cationic van der Waals complexes Rg_nM⁺, where Rg denotes a rare-gas atom and M a diat. mol., turn out to be remarkably complicated, and information on such systems is still rather scarce. The present study reports on results of a case study of ArHCl⁺, starting with extensive multi-ref. CI calcns. of the potential energy surfaces (PES) for several low-lying electronic states. The two lowest A' doublet-state PES are anal. fitted and their topog. is analyzed. For the electronic ground-state PES, 1²A', the full set of vibrational states is calcd., and the time-dependent intramol. dynamics is investigated quantum mech. (wavepackets) as well as classically (trajectories), particularly with respect to symptoms of irregularity. One result is that the geometrical structure of the complex in its electronic ground state can be controlled by different vibrational excitation. The peculiarities of the excited-state 2²A' PES are used to discuss possible photoprocesses and their control by appropriately chosen IR and UV laser pulses leading to different fragmentation channels, ArH⁺(X¹Σ⁺) + Cl(²P⁰) or Ar⁺(²P⁰) + HCl(X¹Σ⁺).

молекул.
расчет
нов-сму
расчет. 744
ум, срук
ружн.

C. A. 2001, 734, N3

F: H-Ar-Cl

P: 3-

134:357761 **A theoretical study of H-Ar-Cl** McDowell, Sean A. C. Department of Biological and Chemical Sciences, University of the West Indies, Bridgetown, Barbados. J. Chem. Phys. (2001), 114(19), 8395-8396. in English.

Ab initio calcs. at the B3LYP and MP4(SDQ) levels of theory were performed on the noble gas-contg. compd. H-Ar-Cl. The mol. should be metastable with an activation barrier of 73.0 kJ.mol⁻¹ for the lowest-energy fragmentation to HCl and Ar. Similar calcs. on H-He-Cl and H-Ne-Cl failed to locate stable species. This result suggests that it should be possible to generate and observe H-Ar-Cl at sufficiently low temps.