

A4-D

HD + Ar (cncmp) XI-5290 1974.

Mc Kellar A.R.W.,
J. Chem. Phys., 1974, 61 (11),
4636-9.

Infrared spectrum of the
hydrogen-argon van der
Waals complex.

C.A. 1975, 82 n24. 162160x. 10

1976

Ar_nD^+ Wight C.A., Ault B.S.,
Andrews L.

Сингелъ.
ионъ J. Chem. Phys., 1976,
65(4), 1244-9.

● (Cell HCl_2^-) III

HDAz

Om-16008

1982

McKellar A., Robert W.

Faraday Discuss. Chem.

UK chemp Soc. 1982, 73, 89-108.

(cur. H₂-Az ; III)

D₂ Az

[Om-16008] 1982

McKellar A., Robert W.

Faraday Discuss.

UK crkmp

Chem. Soc. 1982,

73, 89-108.

(corr. H₂-Az; III)

Ar-HD

DM-16266

1983

7 Д60. Вращательная преддиссоциация ван-дер-ваальсова комплекса Ar-HD : вычисления методом комплексной координаты со связью каналов в неподвижной системе координат. Rotational predissociation of Ar-HD van der Waals complex. Space-fixed complex-coordinate coupled-channel calculations. Datta Krishna K., Chu Shih-I. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 95, № 1, 38—42 (англ.)

преддиссоциация

Для ван-дер-ваальсова комплекса Ar-HD ($v=1$, $j=2$) рассчитаны положения и ширины преддиссоциационных состояний. Использовался метод комплексного преобразования координаты диссоциации комплекса в базисе интегрируемых с квадратом ф-ций, отвечающих состояниям с определенным значением колебательного и вращательного квантового числа HD, а также углового момента относит. движения в ван-дер-ваальсовой молекуле и полного момента. Используемая поверхность потенц. энергии включала зависимость взаимодействия Ar и HD от длины связи H-D . А. Ф. Шестаков

р. 1983, 18, № 7

N_2-Ar

1983

Mutson Jeremy M.,
Ashton Ch. J., et al.

потери.
ф-ид,
теор.
расчет

J. Phys. Chem.,
1983, 87 (15), 2713-20.

(сер. N_2-Ar ; III)

HD-Ar 1983
Mutton Jeremy M.,
Ashton Ch. Y., et al.

nomens.

р-из,

теор.

расчет.

J. Phys. Chem., 1983,
87 (15), 2713-20.

(see H₂-Ar; III)

HD · Ar

1983

98: 167277f Predissociation of hydrogen deuteride-argon van der Waals molecules by internal rotation. Hutson, Jeremy M.; Le Roy, Robert J. (Guelph-Waterloo Cent. Grad. Work Chem., Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(6, Pt. 2), 4040-3 (Eng). Accurate close-coupling calcns. of level energies and widths of predissocg. levels of HD-Ar were carried out using the Le Roy-Carley BC₃ potential for H₂-Ar. The calcd. widths agree well with the exptl. data of McKellar. The principal product from predissocn. of HD($v = 1, j = 2$)-Ar is HD in its $v = 1, j = 1$ state. This channel is symmetry forbidden for H₂(1,2)-Ar, and its presence accounts for the much larger spectroscopic linewidths found for HD-Ar.

rometus.

q_p-ue,
rpeccous.

C. A. 1983, 98, N20

HD-Ar

1983

10 Д63. Предиссоциация ван-дер-ваальсова комплекса HD—Ar, вызванная внутренним вращением. Pre-dissociation of HD—Ar van der Waals molecules by internal rotation. Hutson Jeremy M., Le Roy Robert J. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 6, Pt 2, 4040—4043 (англ.)

Методом сильной связи рассчитаны уровни энергии и ширины для предиссоциирующих состояний ван-дер-ваальсова комплекса HD—Ar. Найденные ширины уровней хорошо согласуются с эксперим. данными. Обнаружено, что основной продукт распада комплекса HD($v=1, j=2$)—Ar соответствует HD($v=1, j=1$). Этот канал распада является запрещенным по симметрии для комплекса H₂($v=1; j=2$)—Ar. Наличие этого канала распада объясняет значительно большие спектроскопич. ширины линий HD—Ar. А. А. Зембеков

9. 1983, 18, 1110

HD-Ar

1983

17 Б153. Преддиссоциация ван-дер-ваальсовых молекул HD—Ar, индуцированная внутренним вращением. Predissociation of HD—Ar van der Waals molecules by internal rotation. Hutson Jeremy M., Le Roy Robert J. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 6, Pt 2, 4040—4043 (англ.)

преддиссоциация,
м.п;

X. 1983, 19,
N 17

Рассчитаны положения и ширины квазистационарных уровней ван-дер-ваальсова комплекса HD—Ar, коррелирующих с колебательно-вращательным состоянием свободной молекулы HD, $v=1$ и $j=2$. Диссоциация происходит в результате взаимодействия внутреннего вращения комплекса (заторможенное вращение HD) с относит. движением HD и Ar, причем продуктами диссоциации является атом Ar и молекула HD ($v=1$, $j=1$). Поверхность потенциальной энергии комплекса строилась на поверхности комплекса H_2 —Ar, представленной в виде разложения по колебательной координате H_2 (до третьей степени) и по полиномам Лежандра P_0 и P_2 от угла θ (угол между осью молекулы и вектором относит. расстояния); построение сводится к смещению центра тяжести системы HD по

сравнению с системой H_2 . В результате ведущим анизотропным членом является полином $P_1(\cos \theta)$. Резонансы локализовались по изменению суммы собственных фаз многоканальной матрицы рассеяния, рассчитанной в приближении сильной связи в представлении полного момента. Найденные значения E_n и Γ_n табулированы для $0 \leq l \leq 10$ (l — относительный угловой момент пары) и $0 \leq J \leq 8$ (J — полный угловой момент комплекса). При этом доп. расчеты с упрощенным потенциалом, учитывающим только анизотропию взаимодействия вследствие смещения центра тяжести HD относительно центра заряда (модель нагруженных сфер) воспроизводят примерно половину ширины уровней. Сравнение индивидуальных рассчитанных ширин линий в N ($J' = l' + 2$) и T-ветвях ($J' = l' - 2$) в полосе перехода $S_1(0)$ [переход HD ($v=0, j=0$) $\rightarrow$ HD ($v=1, j=2$) в комплексе] с эксперим. значениями обнаруживает удовлетворительное согласие. Отмечается, что бо́льшая анизотропия взаимодействия в комплексе HD—Ag по сравнению с взаимодействием в комплексе H_2 —Ag вследствие смещения центра тяжести в первой системе обуславливает заметно большую ширину линий.

Е. Е. Никитин

Ar-HD

OM, 18840 1984

13 Б1088. Инфракрасный спектр Ar—HD. Моделирование посредством точного расчета сечений фотодиссоциации. Infrared spectrum of Ar—HD: simulation through the accurate calculation of photodissociation cross sections. Kidd I. F., Balint-kuti G. G. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 105, № 1, 91—94 (англ.)

С использованием эмпирич. потенциала взаимодействия Ar с HD и квантовомех. потенциала для HD рассчитаны колебательно-вращательные энергии вандерваальсова комплекса Ar—HD. С помощью лит. данных для функции дипольного момента Ar—H₂ вычислены сечения фотодиссоциации для частот в области 3865—3905 см⁻¹. После усреднения с больцмановскими весами преддиссоциац. уровней воспроизведена часть ИК-спектра поглощения в данной области частот, отвечающей возбуждениям фрагмента HD от $v=0, j=0$ до $v=1, j=2$. Теор. результаты хорошо согласуются с эксперим. данными, особенно для положений спектральных линий.
А. В. Немухин

ИК спектр

X. 1984, 19, N 13

Ar-HD

ОМ. 18840 1984

8 Д272. Инфракрасный спектр Ar—HD: моделирование путем точных расчетов сечений фотодиссоциации. Infrared spectrum of Ar—HD: simulation through the accurate calculation of photodissociation cross sections. Kidd I. F., Balint-Kurti G. G. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 105, № 1, 91—94 (англ.)

В диапазоне энергий фотонов $3865 \div 3905 \text{ см}^{-1}$ рассчитано сечение фотодиссоциации ван-дер-ваальсовского комплекса Ar—HD. При вычислениях в качестве потенциала взаимодействия Ar—HD использован потенциал (Le Roy R. J., et al. «Adv. Chem. Phys.», 1980, 42, 353). Рассчитанное сечение фотодиссоциации определяет ИК-спектр поглощения Ar—HD. Проведено сопоставление теоретич. спектра с экспериментальным. Б. Ф. Горднеев

ИК спектр

ср. 1984, 18, № 8

ArD

(Om. 25364)

1986

Van Hemert M.C., Doh-
mann H., Peyerimhoff S.D.,

meopen.
pochem.

Chem. Phys., 1986,
110, n1, 55-66.



Ar-HD

1986

107: 49294r Infrared predissociation of the argon-hydrogen (HD) van der Waals molecule. Kidd, Ian F.; Balint-Kurti, Gabriel G. (Sch. Chem., Bristol Univ., Bristol, UK BS8 1TS). *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 1986, 82, 241-50 (Eng). The theory of photodissocn. and predissocn. processes is briefly discussed and the results of accurate quantum calcs. for the IR predissocn. of the Ar-HD van der Waals mol. are presented. The absorption lineshapes for IR radiation in the range 3866-3906 cm^{-1} were computed for transitions originating in all 11 bound states of the van der Waals complex. A selected few of these lineshapes are presented and discussed in detail. Every one of the 29 absorption processes in the frequency range studied leads to the eventual dissocn. of the complex. The final quantum state distribution of the HD products was computed for all the transitions. Comparisons are made between obsd. and computed linewidths for those cases where the former are available. Comparison is also made of the present theor. results with those of other theories. The system provides an excellent testing ground for theories of photodissocn. processes.

(repeccos)

c.A. 1987, 107, N6

ArD_3^+

1987

Bogey M., Bolvin H.,
et al.

Phys. Rev. Lett.

1987, 58 (10), 988-
-991.

(сер. ArH_3^+ ; III)

спектр
высокого
разрешен.

ArD_3^+

(DM-26065)

1987

Bogey M., Bolvin H.,
et al.

Phys. Rev. Lett., 1987,

u.n.

58, N 10, 988-991.

( AlH_3^+ ; III)

Ar_nD⁺ (DM 29011) 1987

Munt R.D., Andrews L.,

спектр
в
лампине

J. Chem. Phys., 1987,
87, N12, 6819-6823.

AsH_2^+
 AsH_2^+

(Om. 27977)

1987

Simandiras E.D.,
Gaw J.F., et al.,

u.n.

Chem. Phys. Lett.,
1987, 141, N3, 166-174.

(all. AsH_3^+ , III)

AsD_3^+

Om. 27 977)

1987

Simandiras E. D.,
Faw Y. F., et al.,

M. N.

Chem. Phys. Lett.,
1987, 141, N 3, 166-174.

(all. ● AsH_3^+ ; III)

ArD H_2^+ + DM-27977 1987

Simandiras E. D.,
Gaw J. F., et al.

компек-
тыра,
VI;

Chem. Phys. Lett.
1987, 141 (3), 166-74.

(see. ArH_3^+ ; II)

Ar HD₂⁺ (M. 27977) 1987

Simandiras E. D.,
Gaw J. F., et al.

compex-
mura,
Chem. Phys. Lett.
1987, 141(3), 166-74.

Vi;

(Cor. ● Ar H₃⁺; III)

Ar D₃⁺ M. 27977 1987

Simandiras E. D.,
Gaw J. F., et al.

empyrm., Chem. Phys. Lett.
Vi; 1987, 141(3), 166-74.

(cal. ● Ar H₃⁺; III)

MD - Ar

1988

Borysore A.,
Frommhold L. et al.

14

J. Chem. Phys., 1988,
88, N 8, 4855-4860.

●
(see. MD-He; iii)

Ar D⁺

1988

Laughlin K.B.,
Blake G.A., et al.

Phil. Trans. Roy. Soc.
London, 1988, A 324,
N 1578, ● 109. - 119.

(see Ar H⁺; III)

4

$D_3^+ (Ar)_n$ (OM 34 285) 1989

Hiraoka K., Mori T.,
J. Chem. Phys. 1989, 91, N8,
4821-4826.

Isotope effect and nature
of bonding in the cluster
ions $H_3^+ (Ar)_n$ and $D_3^+ (Ar)_n$.

ArD

1989

Lipson R.M.

u.n.

Mol. Phys. - 1989 - 65, ~ 5. - C.
1217-1225

● (Ces. Ar M., III)

ArD

(OM 83002)

1989

Schou J., Sternum B.,
et al.

Phys. Rev. Lett., 1989, 63,
N9, 969-971.

Observation of Fluorescence
from Heavy Rare-Gas
Hydrides and Deuterides
in Electron-Irradiated

Matrices of Solid Hydrogen
and Deuterium.

Ar - D₂O

Ar - DON.

М.П.

X. 1991, N 22

- OM 35860 1991

22 B1339. Перестраиваемая лазерная спектроскопия в далекой инфракрасной области дейтерированных изотопомеров Ar—H₂O. Tunable far-infrared laser spectroscopy of deuterated isotopomers of Ar—H₂O / Suzuki Sakae, Bumgarner R. E., Stockman Paul A., Green Peter G., Blake Geoffrey A. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 1.— С. 824—825.— Англ.

В интервале 490—720 ГГц с использованием перестраиваемого лазерного источника измерены субдоплеровские колебательно-вращат. спектры вандерваальных комплексов Ar—D₂O и Ar—DON, образующихся в сверхзвуковой струе. При интерпретации и анализе спектров использовались результаты проведенных ранее расчетов поверхности межмолек. потенциальной энергии комплекса аргон—вода (J. Chem. Phys.— 1990.— 92.— С. 169; 1988.— 89.— С. 4494) и значения вращат. постоянных основного состояния полученные из МВ-спектров. В спектре Ar—D₂O наблюдались переходы из основного состояния $\Sigma^+(0_{00})$ в состояния $\Sigma(1_{11})$ (нача-

ло полосы при 619643,5 МГц), $\Pi^+(1_{11})$ (579652,8 МГц), а в спектре $\text{Ar} - \text{DOH}$ — переход $\Sigma^+(0_{00}) \rightarrow \Pi^\pm(1_{01})$ (597037,5 МГц). Обнаружены и проанализированы кориолисовы вз-вия между возбужденными колебат. уровнями межмолек. колебания, $\Pi^+(1_{11}) \leftrightarrow \Sigma^+(1_{11})$ ($\text{Ar} - \text{D}_2\text{O}$) и $\Pi^+(1_{01}) \leftrightarrow \Sigma^+(1_{01})$ ($\text{Ar} - \text{DOH}$). Приведены значения вращат. параметров B, D, H, L верхних колебат. уровней и значения параметра внедиагонального матричного элемента кориолисова вз-вия Σ^+ и Π^+ состояний комплексов.

В. М. Ковба



Ar-D₂O

Om 35 768

1991

/ 114: 217044z The submillimeter rotation-tunneling spectrum of argon - water-d₁ and argon - ammonia. Zwart, E.; Meerts, W. Leo (Fys. Lab., Univ. Nijmegen, 6525 ED Nijmegen, Neth.). *Chem. Phys.* 1991, 151(3), 407-18 (Eng). Two bands for Ar-D₂O and 1 band for Ar-NH₃ were obsd. for the 1st time in the frequency region 300-500 GHz. For both complexes, the bands are explained in terms of a nearly free internal rotor model, following earlier investigations of these types of complexes. Evidence was found that this model is correct for Ar-D₂O. Two of the internal rotor states studied for the Ar-D₂O complex show a Coriolis interaction and the interaction const. was detd. The hyperfine const. for the studied excited state of the Ar-NH₃ complex are large.

check mpr

(7) ☒ Ar - NH₃

C.A. 1991, 114, N22

Ar - D₂O

от 35 768 1991

19 Б1343. Субмиллиметровый вращательно-туннельный спектр Ar-D₂O и Ar-NH₃. The submillimeter rotation-tunneling spectrum of Ar-D₂O and Ar-NH₃ / Zwart E., Meerts W. Leo // Chem. Phys.— 1991.— 151, № 3.— С. 407—418.— Англ.

Для комплексов Ar-D₂O (I) и Ar-NH₃ (II), полученных в сверхзвуковом пучке, впервые в области 300—500 ГГц наблюдались две и, соотв., одна полосы поглощения. Для обеих комплексов происхождения полос объяснено в терминах модели почти свободного ротатора. Получены доказательства, подтверждающие правомочность этой модели для I. Показано, что два состояния внутр. ротатора в случае I связаны кориолисовым вз-вием, и определены константы этого вз-вия.

Для II определены константы сверхтонкой структуры возбужденного состояния. Б. С. Авербух

субмилли-
метровый
вр.-тун.

(7) 

х. 1991, № 19

Ar - NH₃

ArD

1992

4Б1168. Спектры гидридов инертных газов. IV. Три новых полосы дейтерида аргона с участием низколежащего «p» ридбергова состояния. Spectra of the rare gas hydrides. IV. Three new bands of argon deuteride involving a low-lying «p» Rydberg state /Dabrowski I., DiLorenzo G., Herzberg G., Jorins J. W. C., Sadovskii D. A., Vervloet M. //J. Chem. Phys. .—1992 .—97 ,№ 10 .—С. 7093—7110 .—Англ.

М.П.

С высоким разрешением получены и проанализированы три интенсивные полосы испускания ArD при 6100, 6900 и 10 200 см⁻¹. Отмечено, что полосы имеют совершенно

Х. 1994, NY

lators :[Pap.] 19th Int. Congr. Theor. Chem. Latin Express., Rome, 10—14 Sept., 1990 /López Piñeiro A., Sánchez M. L., Moreno B. //J. Mol. Struct. Theochem. .—1992 .—254 .—С. 63—70 .—Англ.

Используя подход, основанный на гипервириальной теореме совместно с определенным набором лестничных операторов, выведены рекуррентные соотношения для матричных элементов двух смещенных относительно друг друга осцилляторов Морзе с произвольной величиной D_e . Полученные соотношения могут быть использованы для расчета либо матричных элементов от операторов типа $x^0 = \exp[-a\alpha(r-r_e)]$, либо факторов Франка-Кондона для колебательно-вращат. состояний, принадлежащих двум различным осцилляторам с любыми значениями v и J . Проведенные численные тесты подтверждают справедливость и легкость вычислений с использованием предложенных уравнений.

Е. А. Пазюк

ArD

1992

118: 69152y Spectra of the rare gas hydrides. IV. Three new bands of argon deuteride involving a low-lying "p" Rydberg state. Dabrowski, I.; DiLonardo, G.; Herzberg, G.; Johns, J. W. C.; Sadvovskii, D. A.; Vervloet, M. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can: K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(10), 7093-110 (Eng). Three fairly strong emission bands of ArD at 6100, 6900, and 10,200 cm^{-1} have been studied at high resoln. They show very different structures: the first exhibits only Q-form branches, the second P, R, O, and S-form branches, and the third Q, S, and O-form branches. The rotational anal. of each of these bands is not trivial, mainly because the upper state of the first which proved to be also the lower state of the second and third is strongly affected by Λ -uncoupling [i.e., transition to Hund's case (d)] and as a result the usual method of combination differences cannot be applied in their anal. However, more sophisticated combination differences have been found between the three bands which lead to unambiguous assignments of rotational quantum nos. and thus to rotational constns. It was found that the upper state of the 6100 cm^{-1} band can be most conveniently represented as a $p(\Sigma, \Pi)$ complex. This assumption, together with the theor. selection rules for such a case, led to a full understanding of the structure of the three bands.

(M. Creamp)

C.A. 1993, 118, N 8

Fr D

1993

Wunderlich C., Betz V.,
et al.

chemp

J. Chem. Phys. 1993, 98
(12), 9362-71.

● (see Fr H; III)

Ar-HD

1998

(uk camp)

130: 116637v Near-infrared absorption spectrum of the Ar-HD complex: Confrontation of theory with experiment. Mrugala, Felicia; Moszynski, Robert (Institute of Physics, N. Copernicus University, Grudziadzka 5, 87-100 Torun, Pol.). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(24), 10823-10837 (Eng), American Institute of Physics. Converged close-

C.A. 1999, 130, N9

coupling calcns. of the bound rovibrational levels, positions and widths of metastable states that predissoc. rotationally, vibrationally, and via tunneling, transition intensities, and spectrum shape were performed starting from accurate ab initio and empirical potential energy surfaces for Ar-HD. The computed transitions frequencies agree with the obsd. positions of lines in the recorded near-IR spectra (McKellar, A.R.W., 1982, 1996). The agreement of the measured and calcd. linewidths in the $S_1(0)$ band is also good. Surprisingly, the ab initio potential reproduces the obsd. linewidths somewhat better than the empirical potential fitted to high-resoln. IR data of Ar-H₂ and Ar-D₂ (Bissonette, C., et al., 1996). As a result of the inclusion of some important transitions between the continuum states of the complex, good agreement with expt. is achieved for the shape of the $S_1(0)$ band of the spectrum. Reliable theor. predictions of the transition energies in the $Q_1(1)$ band are also reported.

ArD⁺

1999

131: 94071x Far-Infrared Rotational Spectrum of ArD⁺. Odashima, Hitoshi; Kozato, Atsushi; Matsushima, Fusakazu; Tsunekawa, Shozo; Takagi, Kojiro (Department of Physics, Toyama University, Toyama, Japan 930-8555). *J. Mol. Spectrosc.* 1999, 195(2), 356-359 (Eng), Academic Press. Rotational transition frequencies of ArD⁺ were measured with an accuracy of a few hundred kilohertz in the 0.95-4.7 THz region, using a tunable far-IR radiation source. Effective rotational parameters B, D, and H were detd. for the ground vibrational state. The obsd. frequencies were combined with the previous data on all isotopic species of protonated Ar ion to improve the mass-independent Dunham parameters U_K , Δ^A_K , and Δ^H_K . (c) 1999 Academic Press.

(UK creamp)

C.A. 1999, 131, N7.

Ar-HD

2001

135: 336330h Near-infrared absorption spectrum of the Ar-HD complex: A theoretical study of predissociation effects. Mrugala, Felicia (Institute of Physics, N. Copernicus University, 87-100 Torun, Pol.). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(7), 3155-3172 (Eng), American Institute of Physics. Results of close-coupling calcs. on the near-IR absorption by the Ar-HD($v=0, j=1$) complex, exploiting the best available empirical and theor. models of intermol. potential and of induced-dipole moment for Ar-H₂, are reported. The 1st quant. description of the S₁(1) band of the spectrum is given, including transition energies, linewidths, and intensities, and the description of the Q₁(1) band, included in the recent study on Ar-HD [*J. Chem. Phys.* 109, 10823(1998)], is completed with calcn. of the spectrum shape. A pattern of pairs of lines of distinct widths and heights is found in the T- and N-transition regions of the S₁(1) band. The narrow lines in the pairs (widths $\sim 0.1-0.2 \text{ cm}^{-1}$) result

(UK, nrguec)

C.A. 2001, 135, 123

from transitions between bound and predissociating states. The wider lines (~6-10 times) appear due to transitions between predissociating states. The relations between heights of lines in the pairs differ qualitatively from the relative intensities of the corresponding lines in the $S_1(1)$ band of the absorption spectrum of Ar-H₂. In the $Q_1(1)$ band, transitions between states predissociating rotationally are the only ones which have discernible impact on the line contour. Results of this work and the recent results on the Ar-HD($v = 0, j = 0$) complex are summarized in a discussion of effects of the asym. isotopic substitution on the absorption spectrum shape.

AD⁺

2001

Schutte. C. G. H.,

Chem. Phys. Lett. 2001,
345 (5, 6), 525-31.

ab initio
pavem
X¹² + d.n.
De, y, p. a. u.
le conform.
recom. d. t.

(all. ~~to~~  ~~to~~ AD⁺, III)